

Министерство образования и науки Российской Федерации
Санкт-Петербургский национальный исследовательский
университет информационных технологий, механики и оптики

НАНОСИСТЕМЫ: ***ФИЗИКА, ХИМИЯ, МАТЕМАТИКА***

2012, том 3, № 1

Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics
2012, volume 3(1)



НАНОСИСТЕМЫ:

ФИЗИКА, ХИМИЯ, МАТЕМАТИКА

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

Председатель – чл.-корр. РАН В.Н. Васильев (*НИУ ИТМО, С.-Петербург*),
академик РАН В.М. Иевлев (*ВГУ, Воронеж*), академик РАН А.И. Русанов (*СПбГУ, С.-Петербург*), академик РАН Ю.Д. Третьяков (*МГУ, Москва*)

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор – академик РАН Н.Ф. Морозов (*СПбГУ, С.-Петербург*)

Зам. главного редактора – д.ф.-м.н., проф. И.Ю. Попов (*НИУ ИТМО, С.-Петербург*)

Зам. главного редактора по направлениям:

Физика – д.ф.-м.н., проф. В.М. Уздин (*СПбГУ, С.-Петербург*),

Химия – чл.-корр. РАН В.В. Гусаров (*СПбГТИ (ТУ), С.-Петербург*),

Механика – д.ф.-м.н., проф. А.К. Беляев (*ИПМаш РАН, С.-Петербург*),

Математика – д.ф.-м.н., проф. И.Ю. Попов (*НИУ ИТМО, С.-Петербург*).

Члены редколлегии:

академик РАН В.Н. Пармон (*НГУ, Новосибирск*); академик РАН П.Д. Саркисов (*МХТИ, Москва*); чл.-корр. РАН Е.А. Гудилин (*МГУ, Москва*); чл.-корр. РАН Д.А. Индейцев (*ИПМаш РАН, С.-Петербург*); чл.-корр. РАН П.С. Копьев (*ФТИ им. А.Ф.Иоффе РАН, С.-Петербург*); чл.-корр. РАН И.В. Мелихов (*МГУ, Москва*); д.ф.-м.н., проф. В.Г. Беспалов (*НИУ ИТМО, С.-Петербург*); д.ф.-м.н., проф. А.Я. Вуль (*ФТИ РАН, С.-Петербург*); д.ф.-м.н., проф. А.О. Голубок (*НИУ ИТМО, С.-Петербург*); д.х.н., проф. А.Л. Ивановский (*ИХТТ УрО РАН и УрГУ, Екатеринбург*); д.ф.-м.н., проф. С.А. Козлов (*НИУ ИТМО, С.-Петербург*); д.ф.-м.н., проф. Ю.Б. Кудасов (*ВНИИЭФ, Саров*); д.ф.-м.н., проф. С.Е. Кулькова (*ИФПМ СО РАН, Томск*); д.ф.-м.н., проф. В.А. Маргулис (*Морд. ГУ, Саранск*); д.ф.-м.н., проф. Г.П. Мирошниченко (*НИУ ИТМО, С.-Петербург*); д.ф.-м.н., проф. Б.С. Павлов (*СПбГУ и Оклендский университет, Новая Зеландия*); д.ф.-м.н., проф. В.П. Романов (*СПбГУ, С.-Петербург*); д.ф.-м.н., проф. В.Я. Рудяк (*НГАСУ, Новосибирск*); д.х.н., проф. В.М. Таланов (*ЮРГТУ, Новочеркасск*); д.ф.-м.н., с.н.с. А.В. Чижов (*ОИЯИ, Дубна*); к.х.н., доц. О.В. Альмяшева (*СПбГЭТУ «ЛЭТИ», С.-Петербург*); к.ф.-м.н., доц. С.А. Чивилихин (*НИУ ИТМО, С.-Петербург*).

Иностранные члены редколлегии:

чл.-корр. НАН Украины А.В. Рагуля; д.ф.-м.н., проф. В.М. Адамян (*Одесский национальный университет, Одесса, Украина*); PhD, проф. А.А. Киселев (*Университет Висконсина, США*); проф. Х. Нейдхардт (*Институт прикладного анализа и стохастики имени Вейерштрасса, Берлин, Германия*); PhD, проф. К. Панкрашкин (*Университет Париж-Юг, Орсэ, Франция*).

Редакторы:

к.т.н., доц. И.В. Блинова; к.ф.-м.н., доц. М.А. Скрябин; к.ф.-м.н., доц. Е.С. Трифанова (*НИУ ИТМО, С.-Петербург*).

Адрес: НИУ ИТМО, 197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49, комн. 311.

Телефон: (812)232-67-65.

Электронная версия журнала размещена на сайте: <http://nanojournal.ifmo.ru/>

E-mail: porov@mail.ifmo.ru



NANOSYSTEMS:

PHYSICS, CHEMISTRY, MATHEMATICS

EDITORIAL COUNCIL

Corresponding member of RAS V.N. Vasiliev (*St. Petersburg*),
Academician A.I. Rusanov (*St. Petersburg*),
Academician Yu.D. Tret'yakov (*Moscow*),
Academician V.M. Ievlev (*Voronezh*)

EDITORIAL BOARD

Editor-in-Chief – academician N.F. Morozov (*St. Petersburg*)

Vice Editor-in-Chief – I.Yu. Popov (*St. Petersburg*)

Section Co-Editors:

Physics – V.M. Uzdin (*St. Petersburg*),

Chemistry – Corresponding member of RAS V.V. Gusarov (*St. Petersburg*),

Mechanics – A.K. Belyaev (*St. Petersburg*),

Mathematics – I.Yu. Popov (*St. Petersburg*).

Members:

Academician V.N. Parmon (*Novosibirsk*); Academician P.D. Sarkisov (*Moscow*);
Corresponding member of RAS E.A. Gudilin (*Moscow*); Corresponding member of RAS
D.A. Indeitsev (*St. Petersburg*); Corresponding member of RAS P.S. Kop'ev (*St. Petersburg*);
Corresponding member of RAS I.V. Melikhov (*Moscow*); Corresponding member of NAN of
Ukraine A.V. Ragulya; V.M. Adamyan (*Odessa*); O.V. Al'myasheva (*St. Petersburg*);
V.G. Bespalov (*St. Petersburg*); S.A. Chivilikhin (*St. Petersburg*); A.V. Chizhov (*Dubna*);
A.O. Golubok (*St. Petersburg*); A.L. Ivanovskii (*Ekaterinburg*); A.A. Kiselev (*Wisconsin*);
S.A. Kozlov (*St. Petersburg*); Yu.B. Kudasov (*Sarov*); S.E. Kul'kova (*Tomsk*); V.A. Margulis
(*Saransk*); G.P. Miroshnichenko (*St. Petersburg*); H. Neidhardt (*Berlin*); K. Pankrashkin
(*Paris*); B.S. Pavlov (*St. Petersburg and Auckland*); V.P. Romanov (*St. Petersburg*);
V.Ya. Rudyak (*Novosibirsk*); V.M. Talanov (*Novocherkassk*); A.Ya. Vul (*St. Petersburg*).

Editors:

I.V. Blinova; M.A. Skryabin; E.S. Trifanova (*St. Petersburg*).

Address: SPbNRU ITMO, 197101, St. Petersburg, Kronverkskiy pr., 49, room 311

Phone: (812)232-67-65

Journal site: <http://nanojournal.ifmo.ru/>

E-mail: popov@mail.ifmo.ru

Aim and scope

The scope of the journal includes all areas of nano-sciences. Papers devoted to basic problems of physics, chemistry and mathematics inspired by nanosystems investigations are welcomed. Both theoretical and experimental works concerning to properties and behavior of nanosystems, problems of its creation and application, mathematical methods of nanosystem studies are considered.

The journal publishes scientific reviews (up to 30 journal pages), research papers (up to 15 pages) and letters (up to 5 pages). All manuscripts are reviewed. Authors are informed about the referee opinion and the Editorial decision.

Содержание / Content

От редакции НФХМ / From Editorial Board of NPCM 6

ФИЗИКА / PHYSICS

S.A. Chivilikhin, V.V. Gusarov, I.Yu. Popov
Flows in nanostructures: hybrid classical-quantum models 7

С.П. Бардаханов, С.А. Новопашин, М.А. Серебрякова
Исследование теплопроводности наножидкостей на основе наночастиц оксида алюминия
S.P. Bardakhanov, S.A. Novopashin, M.A. Serebrjakova
Investigations of heat conductivity of nanofluids based on aluminum oxide nanoparticles 27

М.Б. Белоненко, А.С. Сасов, А.В. Алпатов*
Связанные состояния в двулучепреломляющих кристаллах с примесными двухуровневыми атомами
M.B. Belonenko, A.S. Sasov, A.V. Alpatov
Bound states in birefringent crystals doped with two-level atoms 34

А.А. Бирюков, М.А. Шлеенков*
Описание динамики наносистем методом функционала влияния
A.A. Biryukov, M.A. Shleenkov
The Influence Functional approach for a description of the nanosystems dynamics 42

А.Н. Бугай*
Interaction of terahertz radiation with DNA 51

Р.Х. Гайнутдинов, М.А. Хамадеев, Е.В. Зайцева, М.Х. Салахов*
Плотность фотонных состояний в оптических наноматериалах и управление энергетическими уровнями атомов
R.Kh. Gainutdinov, M.A. Khamadeev, E.V. Zajtseva, M.Kh Salakhov
Photon density of states in optical nanomaterials and control of energy levels of atoms 56

С.Ю. Глазов, Н.Е. Мещерякова*
Генерация высших гармоник в сверхрешетке на основе графена в присутствии постоянного электрического поля
S.Yu. Glazov, N.E. Mescheryakova
The high harmonic generation on superlattices based on graphene at the presence of a uniform electric field 64

Г.И. Гарнаева, Л.А. Неведьев, Е.Н. Ахмедшина*
Управление во временном нанодиапазоне появлением штарковского эха путем варьирования взаимной ориентации градиентов электрических полей
G.I. Garnaeva, L.A. Nefediev, E.N. Ahmedshina
Management of occurrence time an Shtarkovsky echo in nanogamut by of mutual orientation of gradients of electric fields variation 71

В.Е. Зализняк, О.А. Золотов
Универсальный потенциал взаимодействия для чистых металлов
V.E. Zalizniak, O.A. Zolotov
Universal interatomic potential for pure metals 76

*отмеченные работы были представлены на XI Международных чтениях по квантовой оптике проходивших с 5 по 10 сентября 2011 в Волгограде / marked works were presented at the XI International Workshop on Quantum Optics, September 5 – 10, 2011, Volgograd, Russia

Г.П. Мирошниченко, А.А. Сотникова*	
Погрешности в «просеянном» квантовом ключе при его передаче по одномодовому стохастическому анизотропному оптоволокну	
G.P. Miroshnichenko, A.A. Sotnikova	
Errors in “the sifted” quantum key while transmitting via single-mode stochastic anisotropic inhomogeneous fiber	87
Г.П. Мирошниченко, А.И. Трифанов*	
Микроскопическая дискретная модель неидеального фотодетектора	
G.P. Miroshnichenko, A.I. Trifanov	
Microscopic discrete model of nonideal photodetector	93
Л.А. Неведьев, Э.И. Низамова, С.В. Тактаева*	
Влияние некоррелированности неоднородного уширения на формирование переходных оптических процессов в системе трехуровневых нано-гейтов	
L.A. Nefediev, E.I. Nizamova, S.V. Taktaeva	
The influence of uncorrelation of inhomogeneously broadening on formation of transitive optical processes in three-level nano-gates system	101
Л.А. Неведьев, А.Р. Сахбиева*	
Кодирование информации в нано-временных интервалах между возбуждающими лазерными импульсами в оптическом эхо-процессоре	
L.A. Nefediev, A.R. Sakhbieva	
Coding information in nano-time intervals between the exciting laser pulses in optical echo processor	109
С.С. Оженко, Е.В. Казанцева, А.И. Маймистов*	
Распространение ультракоротких импульсов в сегнетоэлектрике, описываемом моделью Дюффинга пятого порядка	
S.S. Ozhenko, E.V. Kazantseva, A.I. Maimistov	
Ultrashort pulse propagation in ferroelectric modeled by the fifth-order Duffing model	117
Д.Д. Сукачев, А.В. Соколов, Н.Н. Колачевский, Е.С. Калганова, А.В. Акимов, В.Н. Сорокин*	
Субдоплеровское лазерное охлаждение атомов тулия в магнито-оптической ловушке и магнитное удержание атомов тулия в низкоградиентной магнитной ловушке	
D.D. Sukachev, A.V. Sokolov, N.N. Kolachevsky, E.S. Kalganova, A.V. Akimov, V.N. Sorokin	
Sub-Doppler laser cooling of thulium atoms in a magneto-optical trap and trapping thulium atoms in a magnetic trap with low gradient of magnetic field.	125
Информация и правила для авторов	132
Summaries	135

*отмеченные работы были представлены на XI Международных чтениях по квантовой оптике проходивших с 5 по 10 сентября 2011 в Волгограде / marked works were presented at the XI International Workshop on Quantum Optics, September 5 – 10, 2011, Volgograd, Russia.

От редакции НФХМ



Поздравляем председателя редакционного совета журнала «Наносистемы: физика, химия, математика» Васильева Владимира Николаевича с избранием членом-корреспондентом Российской академии наук по отделению нанотехнологий и информационных технологий.

UDC 539.3

FLOWS IN NANOSTRUCTURES: HYBRID CLASSICAL-QUANTUM MODELS

S. A. Chivilikhin¹, V. V. Gusarov^{2,3}, I. Yu. Popov¹

¹National Research University of Information Technologies, Mechanics and Optics,
Saint Petersburg, Russia

²Saint-Petersburg State Institute of Technology, Saint-Petersburg, Russia

³Ioffe Physical Technical Institute, Saint Petersburg, Russia

chivserg@mail.ru, victor.v.gusarov@gmail.com, popov1955@gmail.com

PACS 68.90.+g, 05.60.-k

Flow through nanotube has many interesting peculiarities. To describe these unusual properties we suggest a model of the flow based on crystallite liquid theory. Slip boundary condition is used instead of conventional no-slip condition. The condition is derived by consideration of interaction of flow particles with the nanotube wall potential in the framework of quantum mechanics. For nanotube with elastic walls another mechanism of flow plays an important role. Namely, a model of flow caused by elastic soliton wave in its wall is suggested. As for general consideration, a modification of the Navier-Stokes equations for the nanotube flow is derived from many-particle Hamiltonian in the framework of quantum statistical physics. Particularly, for a model confinement the effective viscosity of the nanotube flow is got. The obtained dependence of the viscosity on the nanotube diameter is in good correlation with the corresponding experimental results.

Keywords: Nanotube, flow, crystallite, soliton, quantum statistics.

1. Introduction

Last years, fluid and gas flows in nano-sized domains are intensively studied [1], [2]. At present, there are no general equations of nano-hydrodynamics. Usually, the molecular dynamics is used for computations [3]. As for analytical approaches, the simplest one involves introducing the slip condition at the boundary [4]. There is also a hybrid method, incorporating the continuous approach and the molecular dynamics (which is used to analyze the fluid structure and determine the rheological law) [5]. In [6], fluctuations are taken into account when deriving the hydrodynamic equations. In [7] viscous-elastic behavior of water in nano-sized gaps was experimentally studied. Great increase of effective viscosity of water in a channel of nano-width is observed. For nanochannel flow the molecular structure of the medium plays a crucial role. It is similar to Brownian motion [8] and body motion through rarefied gas [9]. More precisely, flows in nano-channels are influenced by local heterogeneity of molecular structure of the liquid if its size is compared with the channel width. A hypothesis about the existence of locally-ordered structures in liquid was put forward in [10]. During several decades scientists discuss whether there are local domains in liquid (crystallites) in which the molecular structure is similar to that for crystal [11], [12], [13]. Investigations of fluid flows in nano-sized domains show that it is strongly influenced by local ordering of nano-sized scale. Experiments [7], [14], show that the effective viscosity of water in nano-channel with hydrophilic walls is essentially greater than the corresponding macroscopic value. Calculations in the framework of molecular dynamics [14] show that there are ordered structures (like periodic) of sizes less than nanometer. Computational experiments in [15] lead to appearance of ice-like states in nanotubes of small diameters

under normal conditions. Experimental and theoretical investigations of water state in carbon nanotube [16], [17] show that there is ice-like envelope with liquid water inside in the nanotube. Increasing of effective fluid viscosity via channel diameter was marked in [18] for channels of few micrometers diameters. Influence of walls isn't evident. In some experiments there are increasing of effective viscosity, but in others the opposite effect takes place. Particularly, the experiments in [19] show that the fluid flow speed through carbon nanotube (of few nanometers diameter) is essentially greater than one calculated in the framework of classical fluid theory. Possible model of such phenomenon of "superfluidity" in very narrow nanochannel is suggested in [20]. As it was mentioned earlier, the effective viscosity can be both extremely small in some cases and extremely great in other situations (in comparison with its classical value). Such non-trivial correlation between the nanotube diameter and the viscosity, possibly, is related with local ordering in the liquid. The first variant of such approach is in [21], where the molecular dynamical model of nanotube flow close to crystallite model is suggested. In the present paper the relation of the effective viscosity of a fluid in nanotube with the dynamics of locally ordered nano-sized clusters is described. The number of such clusters increases if the temperature tends to the crystallization point. The sizes of such clusters are close to the diameters of hydro-silicate nanotubes [22]. For this reason, it is of importance to study the existence of crystal clusters of this kind in a liquid inside nanotubes and the influence of clusters on the mass transport through the tube. Computations based on molecular dynamics (with the Lennard-Jones potential) show that solid nano-sized clusters can exist both in the nanotube and outside it. The clusters (crystallites) can have a size of order 1 nm, which is close to the internal diameter of silicate nanotube. Note that the computed size of crystallite depends on parameters of the interaction potential, i.e. on the chemical composition of the liquid. Moreover, in unbounded domains the clusters are also nano-sized. There is a number of experimental results confirming the existence of crystallites in a liquid [11]. It is shown experimentally in [13] that water is inhomogeneous and consists of two parts: chaotic (liquid-like) phase and patches (crystallites) having average size about 1 nm at room temperature. As for hydrodynamic aspects, the flow in our model has common features with suspension flows [23], particularly, the nanotube flow has viscosity anisotropy as some suspension flows [24].

Non-direct experimental confirmation of our hypothesis about the existence of crystallites inside nanotubes is in [25] where the flow of alcohol and water mixture through a membrane with inserted nanotubes is studied. The authors show that the concentration of alcohol decreases essentially after passing through the nanotubes. It is in correlation with the crystallite model as has been mentioned above. The concentration of crystallites in liquid increases when the temperature tends to the freezing value. The freezing temperature for water is greater than one for alcohol. That is why water crystallites dominate over alcohol crystallites. Note that water crystallite doesn't contain alcohol molecules. Hence, the concentration of alcohol decreases during the process of flow through the nanotube.

Section 5 is devoted to general consideration. We derive modified Navier-Stokes equation for nanotube flow in the framework of quantum statistical physics starting from many-particle Hamiltonian. We obtain the viscosity as a function of the nanotube diameter and compare the result with known experiments. The comparison shows that there is good correlation between theoretical and experimental curves.

In the case of narrow nanotube with elastic walls (e.g., carbon nanotube) there are elastic waves, particularly, solitary waves in walls [26]. It has great influence on the flow. We suggest a solvable model of such flow. It is shown that wall soliton induces a flow, and a picture of the flow is obtained.

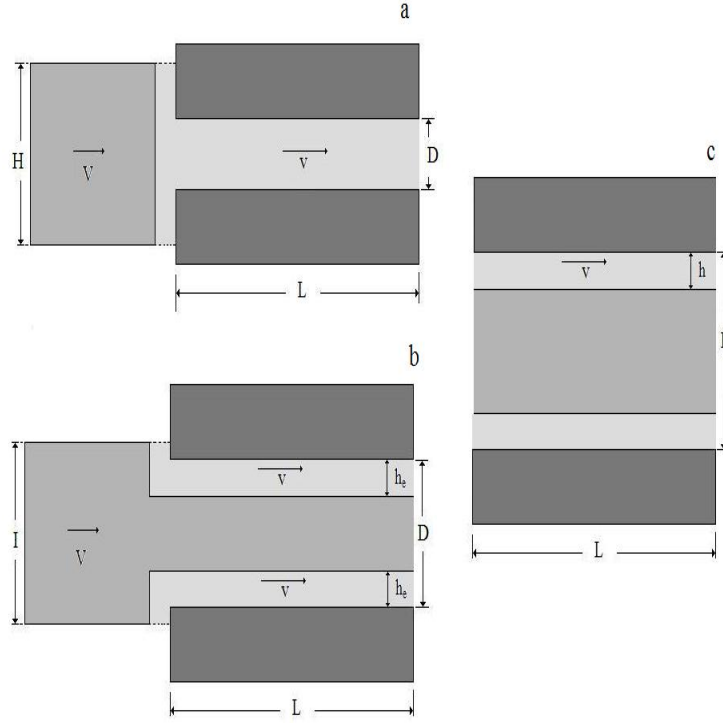


Fig. 1. Different regimes of crystallite containing flow through nanotube

2. Influence of crystallites on the flow through nanotube

We suggest a model based on the assumption about the existence of crystallites inside the nanotube. At first, we take into account energy transformations. Namely, we determine the power of pressure drop and equal it to the energy loss due to two reasons: viscous dissipation and melting.

We use quantum mechanical treatment to explain the type of the boundary condition on the inner surface Γ of the nanotube

$$v_x|_{\Gamma} - v_s = L_s. \quad (1)$$

where v_s and L_s are the characteristic velocity and length (slip velocity and slip length).

The character of the flow in the nanotube depends on the correlation between the locally equilibrium size of the crystallite and the nanotube diameter. We try to find the effective viscosity μ_{ef} of the fluid in the nanotube which is defined by the following way. Consider the correlation between our nanotube (possibly, containing crystallites) and classical tube (with the Poiseuille flow) of the same size and with the same pressure drop and flow rate. The viscosity of the Poiseuille flow having the same parameters is called the effective viscosity of the flow in the nanotube.

Note that there is some space (of width h) between the crystallite and the nanotube wall. It is occupied by so-called non-autonomous phase (liquid-like) having the properties of a fluid with another viscosity μ_0 [27]. Size correlations lead to a few particular cases described below (see Fig. 1). Introduce some notations. Let D be the nanotube diameter, L be its length, H_e be the equilibrium size of the crystallite and h_e be the equilibrium width of the non-autonomous phase.

For small nanotube diameter ($D < 2h_e$) there is no crystallite inside the nanotube, but it is at the entrance, and to form the flow it should transform to liquid-like non-autonomous phase. Roughly speaking, the flow is formed by “melting” of the crystallite at the “entrance” (fig. 1a). Mass balance gives us $\pi H_e^2 V = \pi D^2 v$, where v is the average (for the cross-section) velocity of the flow in the nanotube, V is the crystallite velocity. Let us write down the energy balance equation. To do this let us take into account that the power of the pressure forces $N_p = \frac{\pi}{4} D^2 v \Delta P$ is equal to the sum of powers corresponding to viscous energy dissipation in the nanotube $N_\mu = a \frac{\pi}{4} D^2 L \mu_0 v'^2$ and to crystallite transformation to the liquid-like non-autonomous phase (at the entrance of the nanotube) $N_q = \frac{\pi}{4} H_e^2 V q$:

$$N_p = N_\mu + N_q. \quad (2)$$

Here ΔP is the pressure difference in the nanotube, μ_0 is the viscosity of the non-autonomous phase inside the nanotube, q is the specific heat of crystallite transformation to liquid-like non-autonomous phase (for unit volume), a is some dimensionless parameter which will be chosen later, v' is the characteristic speed of liquid deformation inside the nanotube. To estimate this speed we use the boundary condition (1). Hence, we come to the following expression

$$v' = \frac{v - v_s}{0.5D + L_s}$$

Using (1), one transform (1) into the form:

$$\Delta P = a \frac{\mu_0 (v - v_s)^2}{v (0.5D + L_s)^2} L + q. \quad (3)$$

Let us choose the value of the parameter a in such a way that the expression (3) transforms to the corresponding expression for the classical Poiseuille flow when $v \gg v_s$, $D \gg L_s$ and $q = 0$. It leads to the value 8 of the parameter a . Expression 3 (valid for $v \geq v_s$) allows one to describe the relation between the flow velocity in the nanotube and the pressure drop (see Fig.2).

One can see that if $D < 2h_e$ then there is a flow through the nanotube only if $\Delta P \geq q$ (i.e. q is the critical value (threshold) for the pressure drop). The described algorithm leads to the following expression for the effective viscosity:

$$\mu_{ef} = \frac{qD^2}{32vL} + \mu_0 \left[\frac{0.5D}{0.5D + L_s} \left(1 - \frac{v_s}{v} \right) \right]^2. \quad (4)$$

In relation (3) (derived from the energy balance) the power of pressure forces has the same form as in the previous case. But the losses related with viscous dissipation are localized in the layer of width h_e . Due to this fact one obtains the expression $N_\mu = b\pi h_e (D - h_e) L \mu_0 v'^2$, where b is a dimensionless parameter which will be chosen later. The speed v' of liquid deformation in the nanotube is estimated by taking into account (1). In the considered case one obtains

$$v' = \frac{v - v_s}{h_e + L_s}.$$

The power loss due to crystallite transformation (to liquid-like non-autonomous phase) has the form $N_q = \frac{\pi}{4} [H_e^2 - (D - 2h_e)^2] V q$. Here we have taken into account that there is “melting” of only that part of the crystallite, which can’t come into the nanotube. Summing up all the arguments mentioned above one gets the relation between the flow velocity in the nanotube and the pressure drop:

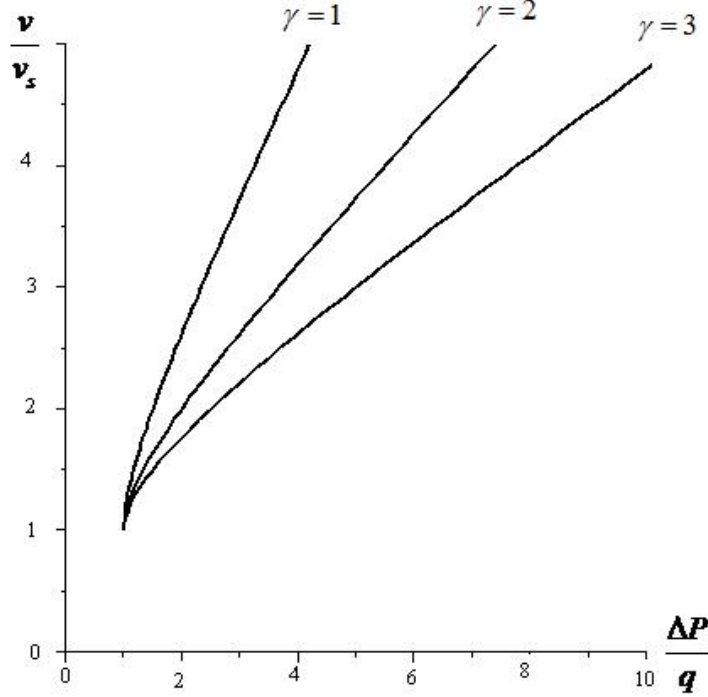


Fig. 2. Dimensionless flow velocity in the nanotube via the pressure

$$\Delta P = 4b \frac{\mu_0 (v - v_s)^2 h_e}{v (h_e + L_s)^2 D} \left(1 - \frac{h_e}{D}\right) L + q \left[1 - \left(\frac{D - 2h_e}{H_e}\right)^2\right]. \quad (5)$$

Choose the value of the parameter b in such a way that ensure the coincidence of ΔP obtained from (5) and (3) for $D = 2h_e$. Taking the corresponding value of the parameter ($b = 8$), one transforms (5) to the final form. Expression (5) shows that there exists the pressure threshold ensuring the flow through the nanotube with minimal possible velocity $v = v_s$:

$$\Delta P_{\min} = q \left[1 - \left(\frac{D - 2h_e}{H_e}\right)^2\right].$$

The graph of the nanotube flow velocity via the pressure drop in this case is similar to the graph on Fig. 2.

The effective viscosity of the liquid in the nanotube in this case is given by the following expression:

$$\mu_{ef} = \frac{qD^2}{32vL} \left[1 - \left(\frac{D - h_e}{H_e}\right)^2\right] + \mu_0 \frac{h_e (D - h_e)}{(h_e + L_s)^2} \left(1 - \frac{v_s}{v}\right)^2. \quad (6)$$

If $H_e + 2h_e \leq D < 2H_e + 3h_e$ then there is not greater than one crystallite in a cross-section of the nanotube. For $H_e + 2h_e = D$, there is no transformation of the crystallite and no changing of the width of the non-autonomous phase (its sizes have the locally equilibrium values). If the diameter increases, then these conditions come to contradiction. We assume that the width of the non-autonomous phase is preserved (h_e) and the cross-section of the crystallite increases from H_e to αH_e (α is some dimensionless parameter). For larger values of D ($\alpha H_e + 2h_e \leq$

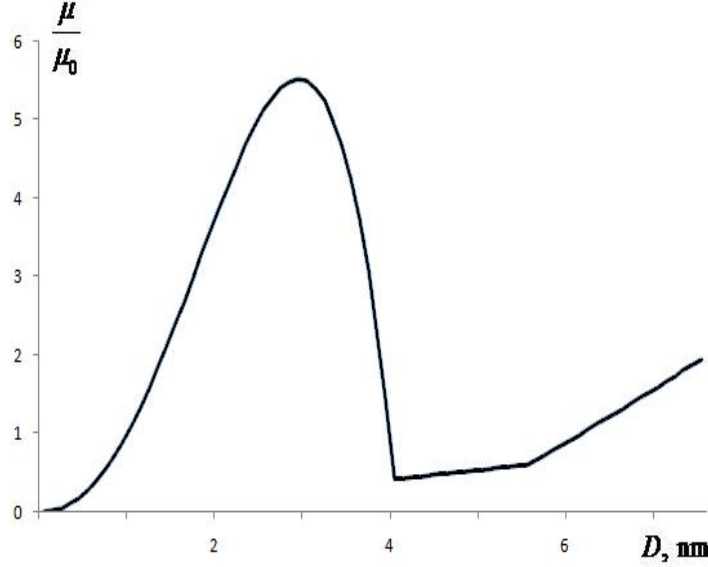


Fig. 3. The viscosity of liquid inside the nanotube via the nanotube diameter

$D < 2H + 3h_e$), the width of the crystallite is preserved ($H = \alpha H_e$) and the width of the non-autonomous phase h increases: $h = 0.5(D - \alpha H_e)$ see Fig. 1c.

Using the procedure described above one obtains the relation between the pressure drop and the flow velocity:

$$\Delta P = 32 \frac{\mu_0 (v - v_s)^2 h}{v (h + L_s)^2 D} \left(1 - \frac{h}{D}\right) L. \quad (7)$$

The effective viscosity in this case is as follows:

$$\mu_{ef} = \mu_0 \frac{h(D - h)}{(h + L_s)^2} \left(1 - \frac{v_s}{v}\right)^2. \quad (8)$$

Here

$$h = \begin{cases} h_e, & H_e + 2h_e < D < \alpha H_e + 2h_e, \\ 0.5(D - \alpha H_e), & \alpha H_e + 2h_e \leq D < 2H_e + 3h_e. \end{cases} \quad (9)$$

Expression (7) shows that there is no pressure threshold in this case (a flow exists under any pressure drop), and minimal flow velocity is v_s .

The graph of effective viscosity of the liquid inside the nanotube via the tube diameter is shown on Fig. 3 for $0 < D < 2H_e + 3h_e$. Here $H = 3 \text{ nm}$, $h_e = 0.5 \text{ nm}$, $L = 100 \text{ nm}$, $n = 2$, $\rho_0 = \rho_c$. The character of the dependence is qualitatively correlated with the experimental results [28], [29] and [30].

3. Slip boundary condition and surface waves

Boundary conditions play crucial role in nanotube flow. The character of this condition is determined by the quantum interaction between liquid and walls. Classical analog of the quantum effect, which predetermined the boundary condition in our model, is the accelerated flow through nanotube due to interaction of liquid with surface mechanical waves in the nanotube wall [26].

Consider the corresponding quantum problem. Let one deal with a nanotube having a periodic set of atoms (centers) at the wall (a cylinder of radius R with OZ axis. These centers are at N vertices of symmetric polygons. Polygons are parallel, and the distance between neighbor polygons is h . To describe the system we use zero range potential method [31]. Using of δ -interaction allows one to simplify considerably the procedure of spectral analysis [32], [33]. Correct mathematical description of point-like interaction is given in the framework of the theory of self-adjoint extensions of symmetric operators. Formally, the Hamiltonian H of the system is a perturbation of free Hamiltonian (i.e. the Laplace operator $-\Delta$) by periodic system of zero range potentials which are in the vertices (nodes) of the above mentioned polygons:

$$H = -\Delta + \sum_{n \in \mathbb{Z}_N} \sum_{s \in \mathbb{Z}} \alpha \delta(r - r_{ns}),$$

where α is the intensity of the perturbation, r_{ns} is the radius-vector of a node having the following cylindrical coordinates: $r_{ns} = (R \cos(\theta n), R \sin(\theta n), sh)$, $s \in \mathbb{Z}$, $n \in \mathbb{Z}_N$, $\theta = 2\pi/N$.

The construction of our model is as follows. First, we restrict the Laplace operator onto the set of smooth functions vanishing at the nodes. The closure of restricted operator is symmetric and non-self-adjoint. It has self-adjoint extensions which give us the model operators [32]. To choose the particular extension it is necessary to satisfy the condition at the nodes. The continuous spectrum of the model operator contains values corresponding to modes of waveguide type concentrated near the wall of the nanotube. The corresponding wave function has the following form:

$$\psi(r) = \sum_{n,s} c_{ns} G(r_{ns}, r; E), \quad (10)$$

where the coefficients c_{ns} , $c_{ns} \in \mathbb{C}$, are determined by the "boundary" conditions at the nodes, E is the energy of the mode, $G(r_{ns}, r; E)$ is the Green function of the Laplace operator:

$$G(r, r'; E) = G(r - r'; E) = \frac{\exp(-\sqrt{-E} |r - r'|)}{4\pi |r - r'|}.$$

Wave function has the following asymptotics in a neighborhood of each point r_{ns} :

$$\psi(r) = \frac{a_{-1}}{|r - r_{ns}|} + a_0 + o(|r - r_{ns}|), \quad r \rightarrow r_{ns}.$$

The "boundary" condition at the node r_{ns} gives us the following correlation: $a_0 = \alpha a_{-1}$. This condition means that for each center r_{ns} :

$$\lim_{|r - r_{ns}| \rightarrow 0} \frac{1}{|r - r_{ns}|} \frac{\partial}{\partial |r - r_{ns}|} (|r - r_{ns}| \psi) = \alpha.$$

Using well-known asymptotic expansion for $G(r_{ns}, r; E)$ in a neighborhood of each point r_{ns} , one obtains the following system for c_{ns} :

$$(-\alpha - \sqrt{-E})c_{ns} + 4\pi \sum_{n', s' (n', s') \neq (n, s)} c_{n' s'} G(r_{ns} - r_{n' s'}; E), \\ s = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, n \in \mathbb{Z}_N.$$

To use Bloch's theory let us introduce a function

$$\widehat{c}(j, q) = \sum_{n,s} c_{ns} e^{-iqs} e^{-i\theta jn}, \quad j \in \mathbb{Z}_N, \quad q \in [0, 2\pi],$$

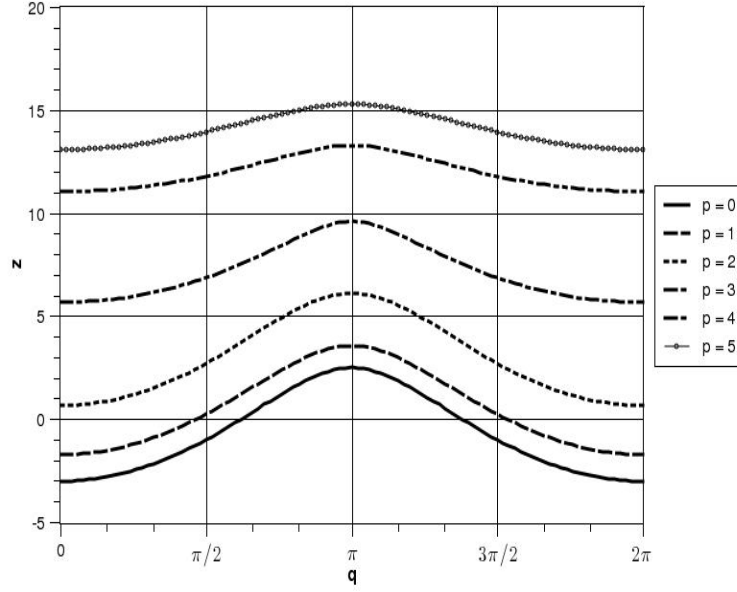


Fig. 4. Waveguide energy bands

Due to the formula for the Fourier coefficients one has

$$c_{ns} = \sum_{j \in \mathbb{Z}_N} \frac{e^{i\theta j n}}{2\pi} \int_0^{2\pi} \widehat{c}(j, q) e^{iqs} dq.$$

Then, the dispersion equation takes the form

$$(-\alpha - \sqrt{-E} - \widehat{G}(j, q; E)) \widehat{c}(j, q) = 0, \quad \forall j, q,$$

$$\begin{aligned} \widehat{G}(j, q; E) &= \\ &= \sum_{n,s: (n,s) \neq (0,0)} \frac{\exp(-iqs - i\theta j n) \exp(-\sqrt{-E} \sqrt{2R^2(1 - \cos(\theta n)) + h^2 s^2})}{\sqrt{2R^2(1 - \cos(\theta n)) + h^2 s^2}} \end{aligned}$$

If for any fixed values $j = j_0$, $q = q_0$ one has $\widehat{c}(j, q) \in L^2$, and the following relation takes place

$$\alpha = -\sqrt{-E} - \widehat{G}(j, q; E), \quad (11)$$

then the wave function is given by (10) with the coefficients (12):

$$c_{ns} = \frac{1}{2\pi} e^{iqs + i\theta j n} \quad (12)$$

Here we used that

$$\widehat{c}(j, q) = \delta_{jj_0} \delta(q - q_0)$$

Particularly, we calculate roots $z = -E$ of the dispersion equation (11) for the following values of the parameters: $\alpha = 1$, $N = 10$, $K = 2000$, K is the number of series terms taken into account. The graph of waveguide bands (i.e. the dependence of energy on the quasi-momentum q) is shown on Fig. 4 for $p \leq 5$, p is the number of the band. For other values of p one has the analogous pictures. The dependence of band width ($2 \leq p \leq 4$) on the number N of polygon vertices ($6 \leq N \leq 15$) is shown on Fig. 5 for fixed parameters $\alpha = 1$, $K = 2000$.

To explain fast flow in nanochannels, which is observed in experiments some authors (see, e.g., [4], [34]) formally replace the no-slip condition by the slip one. The parameter v_s , slip speed, is chosen empirically. We have shown above that there exist waveguide modes

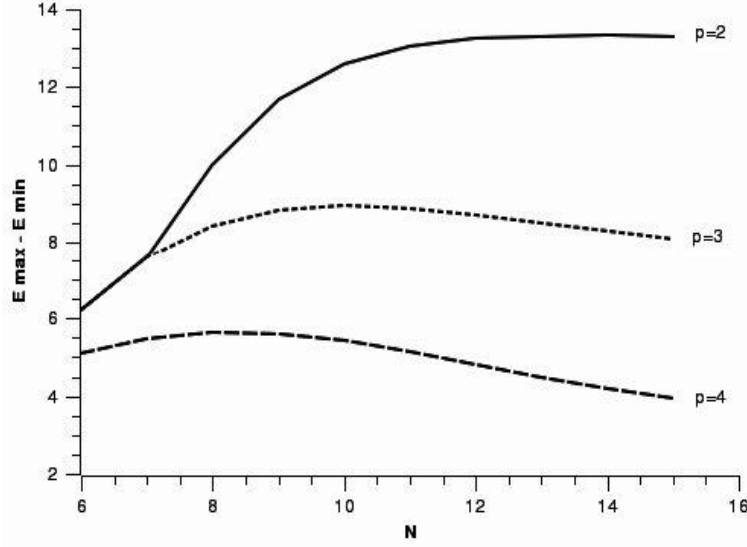


Fig. 5. Dependence of the band width on the number of vertexes of N-polygon

concentrated near the channel wall and have found its parameters. The existence of these surface waves leads to the slip condition. One can determine the slip speed by the following way. Consider the quantum scattering of a particle by the wall potential to determine the momentum transmitted to the wall. We use a way analogous to that in [35].

Let H_0 be the unperturbed Hamiltonian, H_1 be the perturbation (wall potential V), ψ_a be the solution of the scattering problem by the wall potential V corresponding to the particle with fixed momentum p_a . The momentum operator $\hat{p}$ commutes with H_0 , Φ_a is the eigenfunction of $\hat{p}$ ($\hat{p}\Phi_a = p_a\Phi_a$). Solution ψ_a corresponds to Φ_a , i.e. satisfies the equation:

$$\begin{aligned} \psi_a &= \Phi_a + (E - H_0 + i0)^{-1} H_1 \psi_a, \\ (E - H_0) \psi_a &= H_1 \psi_a. \end{aligned} \quad (13)$$

Let us determine the mean value of the operator $(i\hbar)^{-1}[\hat{p}, H] = (i\hbar)^{-1}[\hat{p}, H_1]$:

$$(\psi_a, (i\hbar)^{-1}[\hat{p}, H_1] \psi_a) = (\psi_a, (i\hbar)^{-1} \hat{p} H_1 \psi_a) - (\psi_a, (i\hbar)^{-1} H_1 \hat{p} \psi_a).$$

Taking into account the completeness of the system $\{\Phi_b\}$, one has

$$H_1 \psi_a = \sum_b (\Phi_b, H_1 \psi_a) \Phi_b, \quad \psi_a = \sum_b (\Phi_b, \psi_a) \Phi_b.$$

Hence,

$$\begin{aligned} (\psi_a, (i\hbar)^{-1}[\hat{p}, H_1] \psi_a) &= \\ &= -(i\hbar)^{-1} (\psi_a, \sum_b (\Phi_b, H_1 \psi_a) p_b \Phi_b) + (i\hbar)^{-1} (\psi_a, \sum_b (\Phi_b, \psi_a) p_b H_1 \Phi_b) = \\ &= -(i\hbar)^{-1} \sum_b p_b ((\Phi_b, H_1 \psi_a) (\psi_a, \Phi_b) - (\Phi_b, \psi_a) (\psi_a, H_1 \Phi_b)). \end{aligned}$$

Consequently,

$$(\psi_a, (i\hbar)^{-1}[\hat{p}, H_1] \psi_a) = 2\hbar^{-1} \sum_b p_b \text{Im}((\Phi_b, H_1 \psi_a) (\psi_a, \Phi_b)) \quad (14)$$

Taking into account (13), one gets

$$\begin{aligned} (\psi_a, \Phi_b) &= (\Phi_a + (E_a - H_0 + i0)^{-1} H_1 \psi_a, \Phi_b) = \\ &= \delta_{ab} + (E_a - E_b - i0)^{-1} (H_1 \psi_a, \Phi_b) \end{aligned} \quad (15)$$

Using the well known formula

$$(x - i0)^{-1} = x^{-1} + i\pi\delta(x), \quad \Im(x - i0)^{-1} = \pi\delta(x),$$

one obtains from (14), (15):

$$\begin{aligned} (\psi_a, (i\hbar)^{-1} [\hat{p}, H_1] \psi_a) &= \\ 2\hbar^{-1} \Im \sum_b p_b (\Phi_b, H_1 \psi_a) (\delta_{ab} + \pi\delta(E_a - E_b) (H_1 \psi_a, \Phi_b)), \\ (\psi_a, (i\hbar)^{-1} [\hat{p}, H_1] \psi_a) &= \\ 2\hbar^{-1} p_a \Im (\Phi_a, H_1 \psi_a) + 2\pi\hbar^{-1} \sum_b p_b |(\Phi_b, H_1 \psi_a)|^2 \delta(E_a - E_b). \end{aligned} \quad (16)$$

If one takes the identical operator instead of $\hat{p}$, then (15) transforms to the form

$$0 = 2\hbar^{-1} \Im (\Phi_a, H_1 \psi_a) + 2\pi\hbar^{-1} \sum_b |(\Phi_b, H_1 \psi_a)|^2 \delta(E_a - E_b). \quad (17)$$

One gets the expression for $\Im (\Phi_a, H_1 \psi_a)$ from (17) and inserts it into (16). Then,

$$\begin{aligned} (\psi_a, (i\hbar)^{-1} [\hat{p}, H_1] \psi_a) &= \\ 2\pi\hbar^{-1} \sum_b (p_b - p_a) |(\Phi_b, H_1 \psi_a)|^2 \delta(E_a - E_b). \end{aligned} \quad (18)$$

Note that the right hand side of (18) is the mean momentum transmitted during the scattering of ψ_a per 1 second. Summation over all states ψ_a gives us the full mean transmitted momentum. We are interested in the longitudinal transmitted momentum δp :

$$\delta p = (\psi_a, (i\hbar)^{-1} [\hat{p}_\tau, H_1] \psi_a).$$

Using (18), one obtains

$$\delta p = 2\pi\hbar^{-1} \sum_b (p_b - p_a) |(\Phi_b, H_1 \psi_a)|^2 \delta(E_a - E_b),$$

or

$$\begin{aligned} \delta p &= 2\pi\hbar^{-1} \sum_b p_b |(\Phi_b, H_1 \psi_a)|^2 \delta(E_a - E_b) - \\ &- 2\pi\hbar^{-1} p_a \sum_b |(\Phi_b, H_1 \psi_a)|^2 \delta(E_a - E_b), \\ \delta p &= 2\pi\hbar^{-1} \sum_b |(\Phi_b, H_1 \psi_a)|^2 \delta(E_a - E_b) \left(\frac{\sum_b p_b |(\Phi_b, H_1 \psi_a)|^2 \delta(E_a - E_b)}{\sum_b |(\Phi_b, H_1 \psi_a)|^2 \delta(E_a - E_b)} - p_a \right) \end{aligned}$$

Hence, the expression takes the form

$$\delta p = \gamma (p_s - p), \quad (19)$$

where

$$\gamma = 2\pi\hbar^{-1} \sum_b |(\Phi_b, H_1 \psi_a)|^2 \delta(E_a - E_b), \quad (20)$$

$$p_s = \frac{\sum_b p_b |(\Phi_b, H_1 \psi_a)|^2 \delta(E_a - E_b)}{\sum_b |(\Phi_b, H_1 \psi_a)|^2 \delta(E_a - E_b)} \quad (21)$$

In our case $H_1 = V$.

Remark. One can get for the mean momentum transmitted during the scattering of ψ_a per 1 second the expression analogous to that in [35]: $\delta p = (\psi_a, (-\frac{\partial V}{\partial \tau})\psi_a)$, where $\frac{\partial V}{\partial \tau}$ is the derivative of the wall potential in the longitudinal direction (and ψ_a is considered as a distribution).

Variation of flow velocity per 1 second due to the interaction with wall can be estimated as $\delta v = -\frac{\delta p}{m}$, where m is the molecule mass for the liquid. Hence, one can get the following formula for the normal derivative of the velocity of the flow at the wall:

$$\frac{\partial v}{\partial n} = -\frac{\tau}{a} \frac{\delta p}{m} = \frac{\tau \gamma}{a} \left(\frac{p}{m} - \frac{p_s}{m} \right).$$

Consequently,

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial n} &= \frac{1}{L_s} (v - v_s), \\ v &= \frac{p}{m}, v_s = \frac{p_s}{m}, L_s = \frac{a}{\tau \gamma}, \end{aligned}$$

where τ is the mean time of molecule transition between two equilibrium states ("Frenkel transition") [36], a is the distance between these equilibrium positions.

4. Statistical derivation of modified hydrodynamic equations for nanotube flows

At present there is no general theory of the nanoflows. A natural question appears: what is the form of the hydrodynamic equations for the nanotube flow? To answer the question it is necessary to consider the background of the equation. The problem of the Navier-Stokes equation derivation is discussed during a long time. Initially, it was derived from a continuum formulation of conservation of mass and momentum. One can ask the deeper question of how to obtain these equations directly from microscopic models, in particular from many body Hamiltonian systems. Then one can ask for the microscopic origin of the viscosity, the nonlinearity, and the time irreversibility. At the present time there is no rigorous derivation of fluid dynamics from Hamiltonian mechanics. In [37] the Euler equations are derived from the Hamiltonian systems under some weak ergodicity assumptions. Some authors [38], [39] derive the Navier-Stokes equation from the Boltzmann equation, but the Boltzmann equation isn't really a microscopic model. An alternative way is to substitute at the microscopic level various simplified and regularized versions for the Hamiltonian systems. One class of simplified models is the lattice gas, in which the particles are confined to a lattice [37]. One can mention also other models [40], [41], [42], [43]. We follow the dynamical Bogolyubov approach and the Zwanzig projection operator method [44], to derive the modified Navier-Stokes equation for the flow through nanotube. The main peculiarity is that we have a quantization (quantum statistics) in the nanotube cross-section and the classical statistics for the longitudinal direction.

First, we introduce few basic definitions. The statistical operator (density function) $\hat{\rho}(t)$ describes macro-state of a system which can be in a great number of micro-states (with some probabilities). This macro-state is called a non-equilibrium state, as it evaluates in time in accordance with the Liouville equation. The Zwanzig projection operator method is based on the consideration of the reduced (quasi-equilibrium) statistical operator. Quasi-equilibrium state is described by quasi-equilibrium statistical operator $\hat{\rho}_l(t)$ which ensures the maximum of the system entropy under the normalization condition and some additional conditions. Namely, if the average value $\langle \hat{A} \rangle^t$ of some observable $\hat{A} = \{ \hat{A}_\gamma \}$ then these conditions takes the form

$$\int d\Gamma \hat{\rho} = 1, \quad \int d\Gamma \hat{A}_\gamma \hat{\rho} = \langle \hat{A}_\gamma \rangle^t. \quad (22)$$

The entropy principle has the form

$$\delta \left\{ - \int d\Gamma \hat{\rho} \ln \hat{\rho} - (\Phi(t) - 1) \int d\Gamma \hat{\rho} - \sum_{\gamma} F_{\gamma}(t) \int d\Gamma \widehat{A}_{\gamma} \hat{\rho} \right\} = 0,$$

where $\Phi(t) - 1$, $F_{\gamma}(t)$ are the Lagrange multiplies. It gives us the following expression for $\hat{\rho}_l(t)$:

$$\hat{\rho}_l(t) = \exp \left\{ -\Phi(t) - \sum_{\gamma} F_{\gamma}(t) \widehat{A}_{\gamma} \right\}, \quad (23)$$

where the Lagrange multipliers are determined by (22).

We consider locally homogeneous system, i.e. a system with weak spatial heterogeneity, for which one has $kr_c \ll 1$, where k is the wave number, r_c is the correlation radius. For these systems the length corresponding to essential variation of average local characteristics is essentially greater than r_c . The starting point for the derivation of the hydrodynamic equations is the conservation laws which have (for some value a) the following general form

$$\frac{\partial a}{\partial t} = - \sum_{\beta} \frac{\partial j_{\beta}}{\partial r_{\beta}}, \quad (24)$$

where $j_{\beta}(t) = \langle \widehat{j}_{\beta} \rangle^t$ is the corresponding average flux density. Greek index β run over three values marking spatial coordinates. Let one represents the full statistical operator in the form $\widehat{\rho}(t) = \widehat{\rho}_l(t) + \Delta \widehat{\rho}(t)$. Introduce the statistical part of the flux density: $j_{\beta}^{(s)} = \langle \widehat{j}_{\beta} \rangle_l^t$. Let us pass to local moving coordinate system at each point (r, t) . In this system the concentration and the densities of energy and momentum are as follows: $n' = nh' = e$, $p'_{\beta} = 0$, where e is the average density of the internal energy. Hence, for the corresponding fluxes one has

$$j_{0\beta}^{(s)'} = 0, j_{\alpha\beta}^{(s)'} = \delta_{\alpha\beta} P, j_{1\beta}^{(s)'} = 0.$$

Here P is the pressure. The full flux has the form:

$$j_{0\beta}^{(s)'} = I_{0\beta}, j_{\alpha\beta}^{(s)'} = \delta_{\alpha\beta} P + I_{\alpha\beta}, j_{1\beta}^{(s)'} = 0.$$

Here $I_{\alpha\beta}$, $I_{0\beta}$ are the contributions to the average values given by non-equilibrium addition $\Delta \widehat{\rho}(t)$ to the statistical operator. The corresponding contribution to the flux of particles number is zero. We take into account that

$$p_{\beta} = \tau v_{\beta}, h = e + \sum_{\alpha} \tau v_{\alpha}^2 / 2, j_{1\beta} = n v_{\beta},$$

where $\tau(r) = m n(r)$ is the average mass density, m is particle mass, n is the concentration. Transformation to immovable coordinate system is given by the following formulas:

$$\begin{aligned} \widehat{j}_{\alpha\beta} &= m v_{\alpha} v_{\beta} \widehat{n}' + v_{\alpha} \widehat{p}_{\beta}' + v_{\beta} \widehat{p}_{\alpha}' + \widehat{j}_{\alpha\beta}', \\ \widehat{j}_{0\beta} &= v_{\beta} \left(\widehat{h}' + \sum_{\alpha} (\tau v_{\alpha}^2 \widehat{n}' / 2 + v_{\alpha} \widehat{p}_{\alpha}') \right) + \\ &\quad \sum_{\alpha} (v_{\alpha}^2 \widehat{p}_{\beta}' / 2 + v_{\alpha} \widehat{j}_{\alpha\beta}') + \widehat{j}_{0\beta}'. \end{aligned}$$

Hence,

$$j_{\alpha\beta} = \tau v_{\alpha} v_{\beta} + \delta_{\alpha\beta} P + I_{\alpha\beta}, \quad (25)$$

$$j_{0\beta} = v_\beta(e + \sum_\alpha \tau v_\alpha^2/2) + v_\beta P + \sum_\alpha v_\alpha I_{\alpha\beta} + I_{0\beta}. \quad (26)$$

Equation 24 takes the following form for mass, momentum and energy, correspondingly:

$$\frac{\partial \tau}{\partial t} = - \sum_\beta \frac{\partial(\tau v_\beta)}{\partial r_\beta}, \quad \frac{\partial(\tau v_\alpha)}{\partial t} = - \sum_\beta \frac{\partial(j_{\alpha\beta})}{\partial r_\beta}, \quad (27)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(e + \sum_\alpha \tau v_\alpha^2/2 \right) = - \sum_\beta \frac{\partial(j_{0\beta})}{\partial r_\beta}. \quad (28)$$

Introducing so-called material derivatives [45], [46]

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \sum_\beta v_\beta \frac{\partial}{\partial r_\beta}$$

and taking into account (25), (26), one transform (27), (28) to the following form:

$$\tau \frac{Dv_\alpha}{Dt} = - \sum_\beta \frac{\partial}{\partial r_\beta} (\delta_{\alpha\beta} P + I_{\alpha\beta}), \quad (29)$$

$$\tau \frac{D}{Dt} \left(\frac{e}{\tau} + \frac{1}{2} \sum_\alpha v_\alpha^2 \right) = - \sum_\beta \frac{\partial}{\partial r_\beta} (v_\beta P + \sum_\alpha v_\alpha I_{\alpha\beta} + I_{0\beta}). \quad (30)$$

Equation (29) is well-known Navier-Stokes equation (it corresponds to the momentum conservation law). The form of the equation in these notations is the same for nanotube flow as for conventional hydrodynamics. The difference is in the values of the including terms. The most interesting is the term $I_{\alpha\beta}$. It is related with the internal friction, i.e. with the viscosity. Namely, $I_{\alpha\beta}$ is the contribution to the average value of the momentum flux of the non-equilibrium addition $\Delta\hat{\rho}(t)$ to the statistical operator in local moving (with flow velocity) coordinate system. In conventional hydrodynamics one has the classical statistical operator. As for the nanotube flow, there is a quantization in orthogonal cross-section of the tube (i.e. quantum statistics) and classical moving in the longitudinal direction (classical statistics). Correspondingly, the values of $I_{\alpha\beta}$ are absolutely different, particularly, we have anisotropy and viscosity matrix instead of scalar value of the viscosity in conventional equation. The viscosity matrix depends on assumptions concerning to the quantum statistical operator in the nanotube cross-section. Rigorous derivation of this matrix is difficult problem. As for estimations, one can make averaging over the nanotube cross-section and transit to one-dimensional hydrodynamic model. Then the 1D viscosity will be proportional to the average energy density for the cross-section which can be calculated by conventional way (estimation of the statistical sum). Naturally, it depends on the eigenvalues distribution, i.e. on the model used for the cross-section quantum ensemble. The simplest case is when we assume that the nanotube confinement is a parabolic potential (with a parameter proportional to R^{-2} , R is the nanotube radius) and one has the ensemble of non-interacting fermions. Then the energy levels are equidistant and proportional to R^{-2} . It leads to the dependence of the viscosity on the radius of nanotube cross-section. Namely, it is proportional to

$$\left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-aR^{-2}n} \right)^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} akT R^{-4} n e^{-aR^{-2}n}.$$

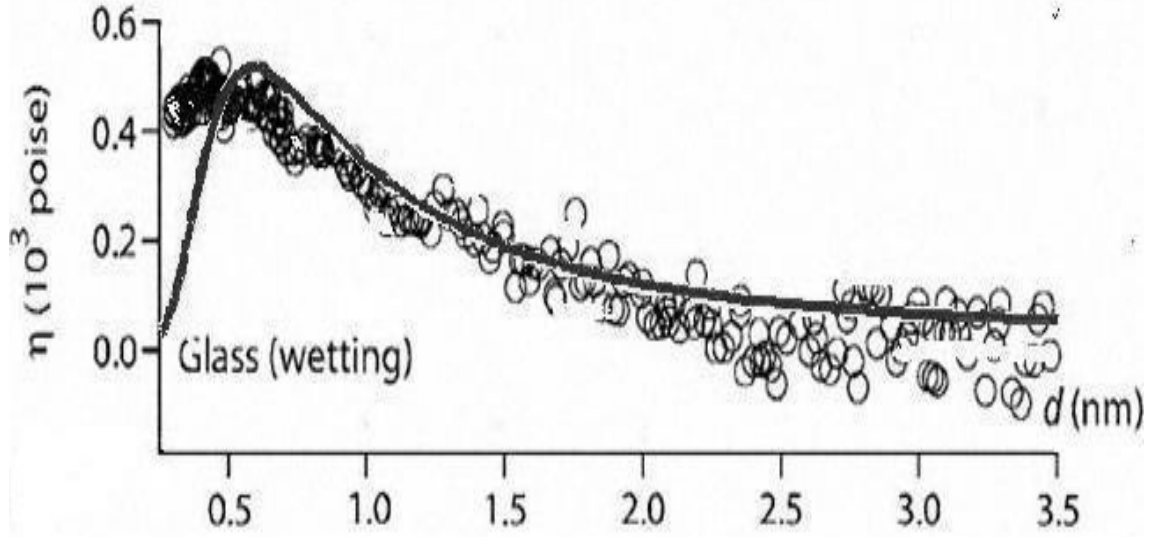


Fig. 6. Dependence of the viscosity η on the nanochannel diameter d

Here k is the Boltzmann constant, T is the temperature. The parameter of the parabolic potential is $akT(\hbar R^2)^{-1}$. Consequently, in this case the viscosity η is as follows

$$\eta = b d^{-4} (e^{ad^{-2}} - 1)^{-1}$$

(b, a are some constants, $d = 2R$). This viscosity via nanotube radius dependence is in correlation with the experimental results [14]. The comparison is shown on Fig. 6.

The values of the parameters are as follows: $a = 0.57 \text{ nm}^2$, $b = 250 \text{ poise} \cdot \text{nm}^4$. Experimental results from [14] are marked as small circles. One can see the correlation between the theoretical curve and the experimental results. Particularly, there is a local maximum of the viscosity for some value of nanotube radius. There are no experimental data for $d < 0.25 \text{ nm}$ and one has no possibility to compare thoroughly the increase rate for theoretical and experimental curves near zero. Our model gives $\lim_{d \rightarrow 0} \eta = 0$. The viscosity η practically vanishes for $d = 0.25 \text{ nm}$. It corresponds to one-atom cross-section of the nanotube. Hence, for one-atom chain inside the nanotube we obtain zero viscosity, i.e. "superfluidity". The analogous phenomenon is in Maslov's model [20] for very narrow nanotube.

5. Soliton induced flow in nanotube

For the case of narrow channel (below the flow threshold) another effect can play an important role. It should be stressed that boundary condition, wall structure and profile play crucial role. Namely, it is necessary to take into account vibration and waves in molecular chains forming the nanotube wall. There are experimental evidences of such wall vibration [26]. The most interesting is solitary wave. There are different models describing such solutions (see, e.g., [47]). We shall consider so-called "Davidov soliton", stable solution of this type in long molecular chain. The analogous waves are also in nanotubes [48].

5.1. Preliminary estimations

Consider the soliton influence on the flow. Soliton moves in nanotube wall and looks like a moving local extension (or constriction) of the tube. Let the area of the cross-section of the

tube be $S = S(x - Vt)$, where x is the longitudinal coordinate, V is the soliton velocity. The continuity equation has the form

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial(Su)}{\partial x} = 0, \quad (31)$$

where u is the velocity of the flow. Integration of 31 gives one the relation between the flow velocity and the cross-section area:

$$u = V + (v - V) \frac{S_0}{S}, \quad (32)$$

where v and S_0 are the flow velocity and the area of the cross-section outside the domain occupied by the soliton. Taking the pressure forces power equals to the power related with the viscous dissipation, one obtains:

$$vS_0\Delta P = \mu \int_0^L \left(\frac{u - v_s}{R + L_s} \right)^2 \pi R^2 dx. \quad (33)$$

Let $\bar{v}$ be the flow in the same nanotube without soliton, i.e.

$$\bar{v}S_0\Delta P = \mu \left(\frac{\bar{v} - v_s}{R + L_s} \right)^2 \pi R^2 L. \quad (34)$$

Assuming that the perturbation of the area due to soliton is small, one obtains the corrected expression for the flow velocity

$$v = \bar{v} + 2 \left(1 - \frac{\langle S \rangle}{S_0} \right) \frac{V - \bar{v}}{1 + v_s/\bar{v}}, \quad (35)$$

where $\langle S \rangle$ is the average area of the nanotube cross-section. Expression 35 shows that solution causes the increasing of the flow velocity in two cases: a) $V > \bar{v}$, $\langle S \rangle > S_0$ (fast soliton corresponds to the extension of the nanotube); b) $V < \bar{v}$, $\langle S \rangle < S_0$ (slow soliton corresponds to the constriction of the nanotube). In other cases the soliton causes the decreasing of the flow velocity.

5.2. Solitons

To describe this solution one can consider an exciton of effective mass m interacting with displacement $u(x, t)$ of molecules having masses M from the equilibrium positions at points $x = na$. The corresponding Hamiltonian is [49]

$$H = \frac{1}{a} \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\psi_x|^2 + \frac{1}{2} M u_t^2 + M V_0^2 U(\rho) - \vartheta \rho |\psi|^2 \right) dx,$$

where ρ is the relative decreasing of the equilibrium distance a between neighbor molecules, $\rho = -u_x$, V_0 is the longitudinal sound speed in the linear approximation of the chain, ϑ is the energy which characterizes the interaction of the exciton and the displacement, $U(\rho)$ is the dimensionless potential of intermolecular interaction having minimum at $\rho = 0$, ψ is normalized exciton wave function. The Hamiltonian leads to the following system of equations:

$$i\hbar\psi_t + \frac{\hbar^2}{2m}\psi_{xx} + \vartheta\rho\psi = 0,$$

$$u_{tt} - V_0^2 U_{\rho\rho} u_{xx} = \frac{\vartheta}{M} (|\psi|^2)_x.$$

The system has a stable solution having the form of solitary wave of the profile Φ depending on U . Particularly, for cubic nonlinearity, $U(\rho) = \frac{1}{2}\rho^2 + \frac{\gamma}{3}\rho^3$:

$$\Phi(\xi) = \frac{1}{2} \left(\frac{3\sigma}{4} \right)^{1/3} \left(\frac{\tau}{\gamma} \right)^{1/3} \text{sch}^2 \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\tau\sigma^2}{6\gamma} \right)^{1/3} \xi \right).$$

The speed V of this soliton is as follows:

$$V = V_0 \frac{1 + \frac{\tau M}{\gamma m} \left(1 - \frac{3}{5}(\gamma\sigma)^{1/3}(\tau/6)^{2/3} \right)}{1 + \frac{\tau M}{\gamma m}},$$

$$\sigma = \frac{2\vartheta m a^2}{\hbar^2}, \quad \tau = \frac{\vartheta}{M V_0^2}.$$

Geometrically, this solution seems as a local extension (or constriction) of the tube, which moves with velocity V . This motion causes the motion of the liquid in the neighborhood of this extension (restriction). We shall consider the flow in nanolayer between two planes. The estimation of the Reynolds number shows that for many cases the Stokes approximation is appropriate.

5.3. Stokeslet model of creeping flow

To describe the flow we use a model in which the local perturbation (occupied small spatial region) is replaced by a point-like one [50], [51]. The mathematical background of the model is the theory of self-adjoint extensions of symmetric operators [33]. Consider two-dimensional straight channel (strip). The result for cylindrical channel is absolutely analogous. The Stokes flow for this case is described by the stream function ψ satisfying the biharmonic equation. As for the boundary conditions, it is more convenient to study moving boundary and fixed singularity, i.e. we assume that the normal derivative of the stream function isn't zero (it is equal to the wall velocity).

Let us describe briefly the model of point-like perturbation for the Stokes flow. The starting point is the operator Δ_0^2 which is the closure of the restriction of Δ^2 onto the set of smooth functions vanishing in a neighborhood of zero. The domain of the operator is

$$D(\Delta_0^2) = \left\{ u, u \in L_2(\Omega), \Delta^2 u \in L_2(\Omega), u(0) = u'_{x_i}(0) = u''_{x_i x_j}(0) = 0, i, j = 1, 2 \right\}.$$

Model operator Δ_e^2 is obtained as a self-adjoint extension of symmetric operator Δ_0^2 . Due to the correlation $\Delta_0^2 \subset \Delta_e^2 \subset \Delta_0^{2*}$ one can search an extension as a restriction of the adjoint operator. The domain of the operator Δ_0^{2*} consists from the elements of the following form:

$$u(x) = \sum_{i,j=1}^2 c_{ij}^u g_{x_i x_j}(x) + \sum_{i=1}^2 c_i^u g_{x_i}(x) + c_0 g(x) + \xi(x) \left(a_0 + \sum_{i=1}^2 a_i^u x_i + \sum_{i,j=1}^2 a_{ij}^u \beta_{ij} x_i x_j \right) + u_0(x).$$

Here $u_0 \in D(\Delta_0)$, $\beta_{ij} = 1, i \neq j, \beta_{ii} = 2^{-1}$, $\xi(x)$ — smooth cutting function: $\xi(x) = 1, |x| \leq 1, \xi(x) = 0, |x| \geq 2$. To construct the model operator one should establish some correlation between these coefficients in the asymptotic expansion, for example,

$$U_0 = A U_1, U_1 = (c_0^u, c_1^u, c_2^u, c_{11}^u, c_{12}^u, c_{22}^u), U_0 = (a_0^u, a_1^u, a_2^u, a_{11}^u, a_{12}^u, a_{22}^u), A = A^*$$

As for detailed description of all classes of extensions, see [52].

5.4. Soliton induced flow in nanolayer

We consider the Stokes flow in a layer induced by rotlet line, i.e. the flow with translation symmetry along this line. This flow is two-dimensional and it is necessary to deal with point-like perturbation (rotlet) in $\mathbb{R}^2$. The stream function for the model operator constructed above gives us the model for the Stokes flow with rotlet in two-dimensional strip. In our case there are two perturbations in opposite points of the channel walls (soliton position). Let the channel walls be $\{(x, y) : x = 0\}$, $\{(x, y) : x = 2\}$. Due to the linearity of the problem it is possible to consider the equivalent task – moving boundary and point perturbations at fixed positions (instead of moving perturbations and unmoving boundary). The solution has the form of a sum of solutions corresponding to each perturbation (at points $(0, 0)$, $(2, 0)$):

$$\begin{aligned}\psi(x, y) &= \psi(x, y, 0, 0) + \psi(x, y, 2, 0), \\ \psi(x, y, 0, 0) &= \Psi(x, y, 0, 0) + \int_{-\infty}^{\infty} (\Psi(x, y, 0, \eta) + \Psi(x, y, 2, \eta)) v(\eta) d\eta.\end{aligned}$$

Here $\Psi(x, y, 0, 0)$ is the solution corresponding to the rotlet at the point $(0, 0)$. The solution is obtained in explicit form:

$$\begin{aligned}\psi(x, y, 0, 0) &= \frac{x \cdot c}{2} + Re[\sum_{n=1}^{\infty} (A \cdot [x \cdot \sin(\frac{1}{2}\lambda_n \cdot x) - \tan(\frac{1}{2}\lambda_n) \cdot \cos(\frac{1}{2}\lambda_n \cdot x)] \cdot \exp(-\frac{1}{2}\lambda_n \cdot |y|) + \\ &+ B \cdot [x \cdot \cos(\frac{1}{2}\mu_n \cdot x) - \cot(\frac{1}{2}\mu_n) \cdot \sin(\frac{1}{2}\mu_n \cdot x)] \cdot \exp(-\frac{1}{2}\mu_n \cdot |y|) + \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} (a \cdot [x \cdot \sin(\frac{1}{2}\lambda_n \cdot x) - \tan(\frac{1}{2}\lambda_n) \cdot \cos(\frac{1}{2}\lambda_n \cdot x)] \cdot \exp(-\frac{1}{2}\lambda_n \cdot |y - \eta|) + \\ &+ b \cdot [x \cdot \cos(\frac{1}{2}\mu_n \cdot x) - \cot(\frac{1}{2}\mu_n) \cdot \sin(\frac{1}{2}\mu_n \cdot x)] \cdot \exp(-\frac{1}{2}\mu_n \cdot |y - \eta|)) d\eta \cdot (v - \frac{c}{2})].\end{aligned}$$

Here λ_n , μ_n are complex roots of equations

$$\sin \lambda_n + \lambda_n = 0, \sin \mu_n - \mu_n = 0,$$

A , B , a , b are some constants (model parameters, c , v are flow parameters, namely, c is the flux through the cross-section of the channel, v is the rotlet velocity (in our case it is the wall velocity). The pictures of the streamlines are different for different values of the flow parameters. Particularly, for $c = 10$, $v = 10$ there is a cell occupying the whole cross-section of the channel where one has an eddy (Fig. 7). For the flow parameters greater than $c = 50$, $v = 50$ the cell is divided into two parts by the flow in the center of the channel (Fig. 8).

Acknowledgements

The work was supported by Federal Targeted Program “Scientific and Educational Human Resources for Innovation-Driven Russia” (contracts P689 NK-526P, 14.740.11.0879, and 16.740.11.0030), grant 11-08-00267 of Russian Foundation for Basic Researches and by the Russian Ministry of Education and Science within the framework of the SC No. 16.516.11.6073 research project.

References

- [1] edited by Li D. (Ed.) Encyclopedia of microfluidics and nanofluidics. – New York: Springer, 2008.
- [2] Rivera J. L., Starr F. W. Rapid transport of water via carbon nanotube syringe // J. Phys. Chem. C – 2010. – 114. 3737–3742.
- [3] Kadau, Germann, T. C., Hadjiconstantinou, N. G., Lomdahl, P. S. & Dimonte G. Nanohydrodynamics simulations: An Atomic view of the Rayleigh-Taylor instability // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. – 2004. – 101. 5851–5855.
- [4] Joly, L., Ybert, C., E W. N., ROBBINS M.O. Probing the Nanohydrodynamics at liquid-solid interface using thermal motion. // Phys. Rev. Lett. – 2006. – 96. 046101-1 046101-4.
- [5] Nie, X. B., Chen, S. Y., Bocquet, L. A Continuum and molecular dynamics hybrid method for micro- and nano-fluid flow. // J. Fluid. Mech. – 2004. – 500. 55–64.

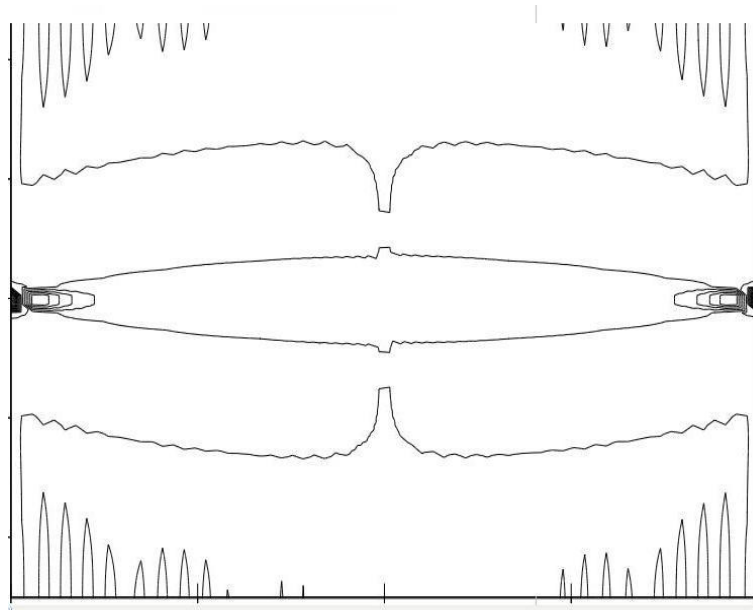


Fig. 7. Soliton induced flow in nanolayer (cellular structure)

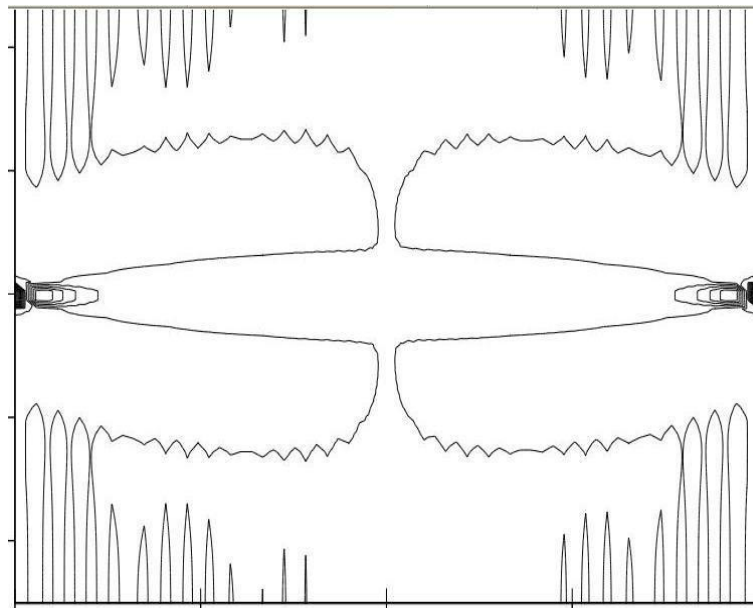


Fig. 8. Soliton induced flow in nanolayer (absence of cellular structure)

- [6] Kang W., Landman U., U. niversality Crossover of the Pinch-Off Shape Profiles of Collapsing Liquid Nanobridges.// *Phys. Rev. Lett.* – 2007 – 98. 064504-1–064504-4.
- [7] Antognozzi, M., Humphris A. D. L. and Miles M. J. Observation of molecular layering in a confined water film and study of the layers viscoelastic properties.// *Appl. Phys. Lett.* – 2001. – 78. 300–302.
- [8] Einstein A., Smolukhovskii M. *Brownian motion.* – Leningrad: GITTL, 1936.
- [9] Kogan M. N. *Dynamics of rare gas (Kinetic theory).* – Moskow: Nauka, 1967.
- [10] Frenkel Ya. I. New development of the theory of liquid state.// *Appl. Uspekhi Fiz. Nauk.* – 1941. – 25. 1–18.
- [11] Ubbelohde A. R. *Melting and Crystal Structure.* – Oxford: Clarendon Press, 1965.
- [12] Zatsepina G. N. *Structure and Properties of Water.* – Moskow: Nauka, 1974.
- [13] Huang C. et. al. The inhomogeneous structure of water at ambient conditions.// *Proc. Nat. Acad. Sci. USA.* – 2009. – 106. 15214–15218.

- [14] Li T.-D., Gao J., Szoszkiewicz R., Landman U., Riedo E. Structured and viscous water in subnanometer gaps.// *Phys. Rev. B.* – 2007. – 75. 115415-1–115415-6.
- [15] Mashl R. J., Joseph S., Aluru N. R., Jakobsson E. Anomalous Immobilized Water: A New Water Phase Induced by Confinement in Nanotubes. // *Nano Letters.* – 2003. – 3. 589–592.
- [16] Kolesnikov A.I., Zanotti J.-M., Loong Ch.-K., and Thiagarajan P. Anomalous Soft Dynamics of Water in a Nanotube: A Revelation of Nanoscale Confinement // *Phys. Lett.* – 2004. – 93. 035503-1–035503-4.
- [17] Kolesnikova A.I., C.-K. Loong C.K., de Souza N.R., Burnham C.J. Moravskiy A.P. Anomalous soft dynamics of water in carbon nanotubes // *Physica B.* – 2006. – 385386. 272-274.
- [18] Deryagin B. V., Ovcharenko F. D., Churaev V. N. (Eds.) *Water in Disperse Systems.* – Moscow: Nauka, 1989.
- [19] Jason K. H., Hyung G. P., Yinmin W., Michael S., Alexander B., Artyukhin C.P., Grigoropoulos A. N., Olgin B. Fast Mass Transport Through Sub-2-Nanometer Carbon Nanotubes.// *Science.* – 2006. – 312. 1034–1037.
- [20] Maslov V. P. Superfluidity of classical liquid in a nanotube for even and odd numbers of neutrons in a molecule. // *Theor. and Math. Phys.* – 2007. – 153. 1677–1796.
- [21] Hanasaki I., Nakatani A. Fluidized piston model for molecular dynamics simulations of hydrodynamic flow. // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2006. – 14. 9–20.
- [22] Chivilikhin S. A., Popov I.Yu., Gusarov V. V. and Svitenkov A.I. Model of fluid flow in a nano-channel *Glass phys and chem.* – 2008. – 33. 315–319.
- [23] Batchelor, G. K. Stress generated in a non-dilute suspension of elongated particles by pure straining motion // *J. Fluid Mech.* – 2008. – 46. 813–829.
- [24] Hinch, E. J., Leal, L. G. The effect of Brownian motion on the rheological properties of a suspension of non-spherical particles // *J. Fluid Mech.* – 1972. – 52. 683–712.
- [25] Kononova S. V. et. al. Polymer-inorganic nanocomposites based on aromatic polyamidoimides effective in the process of liquids separation // *Russ. J. Gen. Chem.* – 2010. – 80. 1136–1142.
- [26] Insepov Z., Wolf D., Hassanein A. Nanopumping Using Carbon Nanotubes// *Nano Letters.* – 2006. – 6, 1893–1895.
- [27] Gusarov, V. V., Popov, I. Yu. Flows in two-dimensional non-autonomous phases in polycrystalline systems. // *Nuovo Cim.* – 1996. – 18D. 799–805.
- [28] John A. Thomas and Alan J. H. McGaughey. Reassessing Fast Water Transport through Carbon Nanotubes. // *Nano Lett.* – 2008. – 8. 2788–793.
- [29] Yingchun Liu, Qi Wang. Transport behavior of water confined in carbon nanotubes // *Phys. Rev. B.* – 2005. – 72. 085420-1–085420-4.
- [30] Sony J., and N. R. Aluru. Why Are Carbon Nanotubes Fast Transporters of Water? // *Nano Lett.* – 2008. – 72. 452–458.
- [31] Demkov Yu. N. and Ostrovskii V. N. *Zero-range Potential Method in Atomic Physics.* – Leningrad: Leningrad University Publishing, 1975.
- [32] Albeverio S., Gesztesy F., Hoegh-Krohn, Holden H. *Models in Quantum Mechanics* Berlin. – Solvable: Springer, 1989.
- [33] Pavlov B. S. Extensions theory and explicitly solvable models. // *Uspekhi Math. Nauk.* – 1987. – 42, 6. 99–131.
- [34] Chivilikhin S. A., Gusarov V. V., Popov I.Yu., Blinova I. V. et. al. Simulation of the formation of nanorolls // *Russian J. Math. Phys.* – 2007. 15, 410–412.
- [35] Gerjuoy E. Momentum Transfer Cross Section Theorem // *J. Math. Phys.* – 1965. – 6. 993–996.
- [36] Frenkel Ya. I. *Kinetic Theory of Liquid.* – Moscow: Nauka, 1975.
- [37] Olla S., Varadhan S. R. S and Yau H.-T. Hydrodynamical limit for a Hamiltonian system with weak noise// *Comm. Math. Phys.* – 1993. – 155. 523–560.
- [38] De Masi A., Esposito R. and Lebowitz J. L. Incompressible Navier-Stokes and Euler limits of the Boltzmann equation // *Comm. Pure Appl. Math.* – 1989. – 42. 1189–1214.
- [39] Bardos C., Golse F. and Levermore D. On the asymptotic limits of kinetic theory towards incompressible fluid dynamics// *Comptes Rendus de l'Acad. Sci. Paris. Ser.* – 1989. 1, 11. 727–727.
- [40] Reiser B. Real processing IV: The derivation of the Navier-Stokes equation from the principle of minimal deformation // *Physica A.* – 2001. – 219. 512–522.
- [41] Jackson J. L. and Mazur P. On the statistical mechanical derivation of the correlation formula for the viscosity // *Physica.* – 1964. 30, 2295–2304.
- [42] Visscher P. B. Visscher Renormalization-group derivation of Navier-Stokes equation // *J. Stat. Phys.* – 1985. – 38. 989–1013.

- [43] Helbing D. Gas-kinetic derivation of Navier-Stokes-like traffic equations // *Phys. Rev. E.* – 1996. – 53. 2366–2381.
- [44] Kuni F. M. *Statistical Physics and Thermodynamics.* – Moscow: Nauka, 1981.
- [45] Bird R. B., Stewart W. E., Lightfoot E. N. *Transport Phenomena.* – NY: John Wiley and Sons, 2007.
- [46] Batchelor, G. K. *An Introduction to Fluid Dynamics.* – Cambridge: Cambridge University Press. 1967.
- [47] Khusnutdinova K. R., Samsonov A. M. and Zakharov A.S. Non-linear long-wave models for layered waveguides with non-ideal lead // *Theor. Math. Phys.* – 2009. 159. 475–489.
- [48] Brizhik L., Eremko A., Piette B. and Zakrzewski W. Davidov soliton in zigzag nanotube// *Int.J. Quant. Chem.* – 2010. – 110. 10–24.
- [49] Davidov A.S. *Solitons in Molecular Systems.* –Dordrecht: Reidel,1985.
- [50] Popov I. Yu. Operator extensions theory and eddies in creeping flow // *Physica Scripta.* – 1993. – 47. 682–686.
- [51] Gugel Yu. V., Popov I. Yu., Popova S. L. Hydrotron: creep and slip // *Fluid Dyn. Res.* – 1996.– 18. 199–210.
- [52] Popov I. Yu. Stokeslet and the operator extension theory // *Revista Matematica Univ. Compl. Madrid.* – 1996. – 9. 235–258.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НАНОЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

С. П. Бардаханов¹, С. А. Новопашин², М. А. Серебрякова²

¹Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН,
Новосибирск, Россия

²Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск, Россия
sanov@itp.nsc.ru

PACS 66.25.+g

В работе экспериментально исследована теплопроводность наножидкостей на основе наночастиц оксида алюминия (средний диаметр частиц 13 нм). В качестве базовых жидкостей использованы этиленгликоль и изопропанол. Для измерений использован нестационарный метод нагретой проволоочки. Показано, что теплопроводность наножидкостей при малых объёмных концентрациях наночастиц Al_2O_3 (<0,5 %) соответствует классической теории Максвелла. С дальнейшим ростом концентрации наночастиц в этиленгликоле теплопроводность отклоняется от теории в меньшую сторону, так как становится агрегативно неустойчивой, а в изопропанолe наблюдается аномальное отклонение от теории в большую сторону. В заключение обсуждаются возможные причины наблюдаемого явления.

Ключевые слова: наножидкость, теплопроводность.

1. Введение

Суспензии на основе наночастиц твердой фазы названы наножидкостями [1]. Теплопроводность суспензий с малой концентрацией частиц твердой фазы может быть описана теорией Максвелла [2]. Теория построена на основе ряда допущений: 1) концентрация частиц твердой фазы мала (расстояние между частицами существенно превышает их размер); 2) частицы неподвижны в жидкости; 3) частицы имеют сферическую форму; 4) для описания процесса теплопередачи справедливы уравнения кондуктивной теплопроводности. При использовании частиц нанометрового диапазона некоторые предположения могут нарушаться, в частности, наночастицы подвержены броуновскому движению и поверхностные явления могут играть заметную роль в процессе теплопередачи.

Наряду с фундаментальными проблемами описания теплопроводности наножидкостей, возможно их широкое практическое использование. С ростом производительности электронных устройств и развитием высокоэнергетичных технологий возникает необходимость создания эффективных охлаждающих систем и управления большими тепловыми потоками. Один из способов интенсификации теплообмена - повышение теплопроводности жидкости путём добавления твёрдых частиц с высокой теплопроводностью. Особый интерес при создании таких суспензий представляют наночастицы. В отличие от частиц микронного размера они медленнее осаждаются, не приводят к засорению и износу каналов и не подавляют турбулентность дисперсной фазы. Возможность их использования при создании эффективных теплоносителей является дополнительным стимулом для проведения многочисленных исследований.

Однако многие полученные к настоящему времени экспериментальные данные имеют большой разброс и зачастую противоречат друг другу. Часть данных свидетельствует об аномальном увеличении теплопроводности наножидкостей по сравнению с теорией [3–12]. Но в ходе совместных исследований, проведенных организациями из разных стран, аномального увеличения теплопроводности при малых концентрациях наночастиц не обнаружено [13].

Классификация наножидкостей и анализ теоретических подходов к моделированию коэффициентов переноса проведены в [14]. В частности отмечено, что строгая теория процессов переноса в наножидкостях пока не развита, а применение моделирования теплопроводности методами молекулярной динамики все таки дает предсказания отличные от классической теории.

Большой разброс экспериментальных данных связан с рядом объективных причин: методикой синтеза наночастиц, функцией распределения наночастиц по размерам, технологией приготовления наножидкости, а также методом измерения теплопроводности и интерпретации результатов.

Цель данной работы состоит в измерении теплопроводности наножидкостей на основе наночастиц Al_2O_3 и сравнении полученных результатов с классической теорией Максвелла.

2. Эксперимент

В работе использовались наночастицы оксида алюминия (Degussa, Germany). По данным производителя, средний диаметр частиц составляет 13 нм, удельная площадь поверхности 100 м²/г. На рисунке 1 показаны фотография, полученная на электронном просвечивающем микроскопе и гистограмма распределения частиц по размерам (Рис. 2).

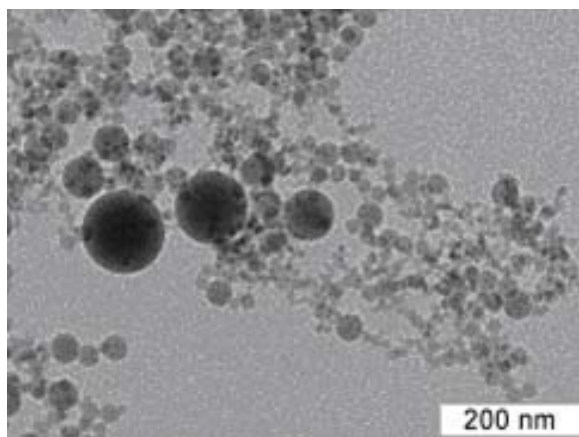


Рис. 1. Микрофотография порошка Al_2O_3 .

Для синтеза наножидкостей герметично закрытые пробирки со смесями необходимого количества базовой жидкости и порошка наночастиц помещались в ультразвуковую баню, мощность ультразвукового диспергатора 80 Вт, и обрабатывались в течение часа. Измерения теплопроводности проводились при температуре 25°C, для чего пробирки с наножидкостями помещались в жидкостный термостат.

Измерения теплопроводности наножидкостей проводились при помощи нестационарного метода нагретой проволоочки, реализованного в виде прибора для сопоставления теплового сопротивления жидкостей [15]. Используется платиновая проволоочка диаметром 20 мкм и длиной 5 мм. Проволочка нагревается коротким импульсом тока. В дальнейшем

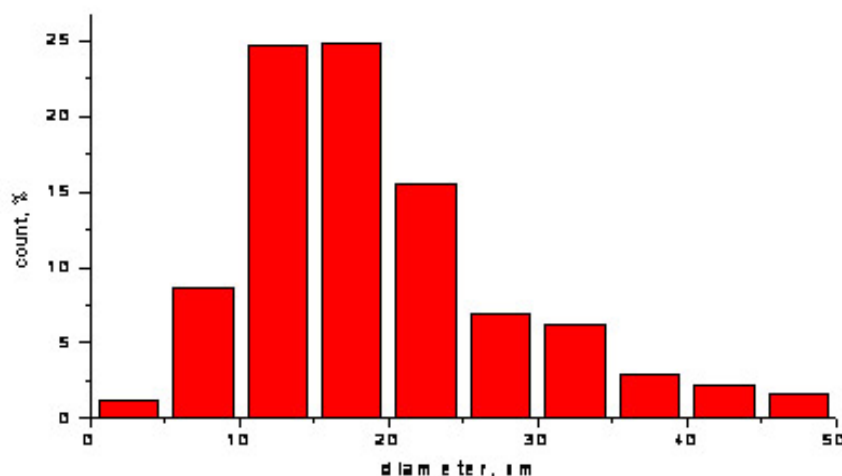


Рис. 2. Гистограмма распределения наночастиц по размерам

происходит остывание проволоочки за счет теплообмена с жидкостью. Эта же проволоочка используется в качестве термометра сопротивления. Динамика остывания проволоочки связана с теплопроводностью окружающей жидкости. Метод позволяет получить относительные величины. Для проведения количественных измерений требуются калибровочные измерения теплопроводности. В качестве измеряемой величины выбран интеграл напряжения на проволочке за определенное время. Калибровочная кривая зависимости табличного значения теплопроводности от интеграла напряжения приведена на Рис. 3. В качестве реперных точек использованы ВМ-4; 2 — этанол; 3 — 25% этанола, 75% воды; 4 — этиленгликоль; 5 — 50% этанола, 50% воды; 6 — 75% этанола, 25% воды; 7 — вода.

Эта кривая использовалась для измерения теплопроводности синтезированных наножидкостей.

3. Результаты измерений и обсуждение результатов

3.1. Наножидкости на основе этиленгликоля и наночастиц Al_2O_3

Для измерений было приготовлено пять наножидкостей на основе этиленгликоля и наночастиц оксида алюминия с объёмными концентрациями наночастиц: 0,28, 0,56, 0,84, 1,12 и 1,40%. Результаты измерений и прямая, соответствующая теории Максвелла, показаны на Рис. 4. Погрешность измерений не превышает размера точек на графике. Сравнение полученных данных с теорией говорит о том, что для малых объёмных концентраций (до ~ 0,5%) теория Максвелла справедлива. С увеличением концентрации наножидкость становится неустойчивой к агломерации, что регистрировалось по выпадению осадка. Это привело к стабилизации величины теплопроводности на определенном уровне.

На рисунке 5 приведено сопоставление полученных данных с результатами, для наночастиц большего диаметра [16]. Как видно, жидкости на основе более крупных частиц оставались устойчивыми, и их теплопроводность достаточно хорошо согласуется с теплопроводностью, предсказанной теорией, до больших объёмных концентраций наночастиц. Вероятно, это связано с двумя факторами: во-первых, различие морфологии поверхности наночастиц вследствие синтеза их различными методами и, как следствие, стабилизация наножидкостей за счёт двойного электрического слоя происходит по-разному; во-вторых,

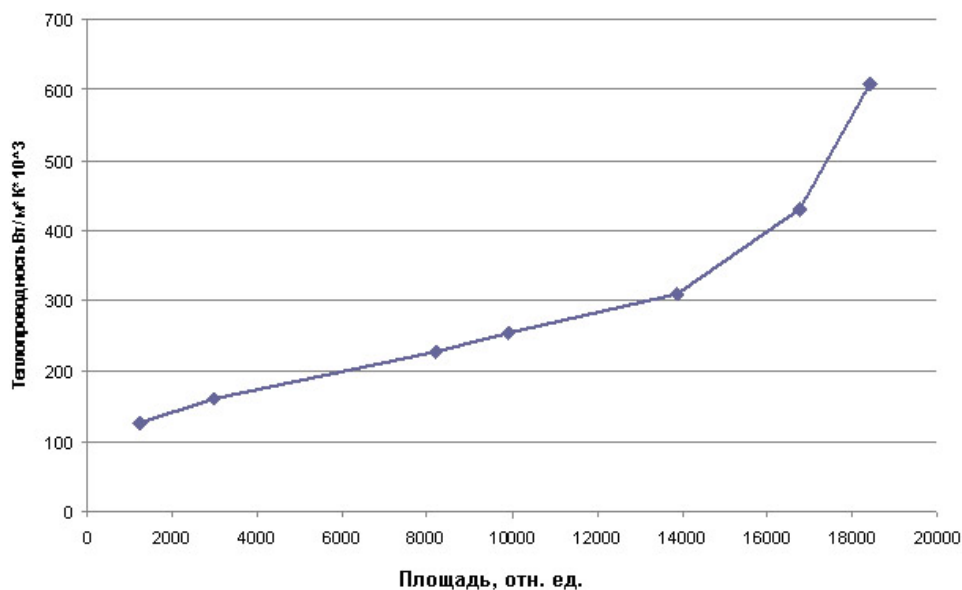


Рис. 3. Калибровочная кривая: 1 — ВМ-4; 2 — этанол; 3 — 25% этанола, 75% воды; 4 — этиленгликоль; 5 — 50% этанола, 50% воды; 6 — 75% этанола, 25% воды; 7 — вода

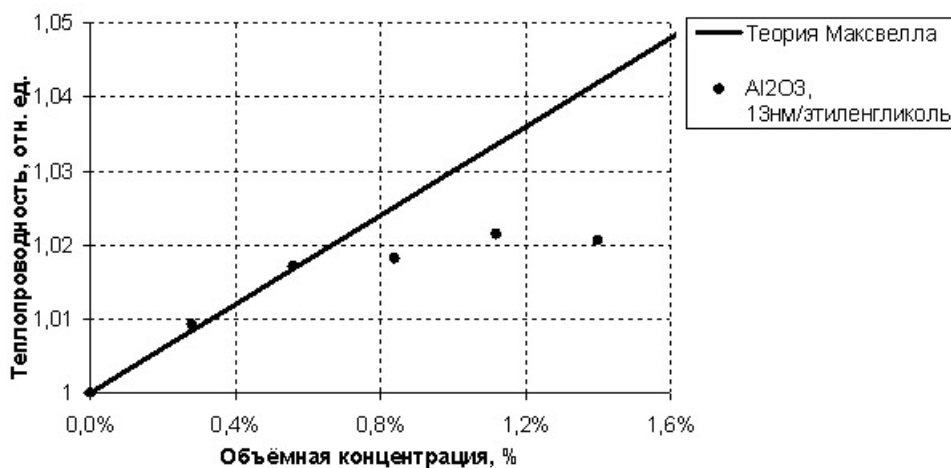


Рис. 4. Зависимость теплопроводности наножидкости на основе этиленгликоля от объемной концентрации наночастиц.

частицы меньшего диаметра имеют меньшую массу и более подвижны, а расстояние между ними меньше, чем между крупными частицами при той же объемной концентрации, поэтому вероятность образования ими агломератов, выше.

3.2. Наножидкости на основе изопропанола и наночастиц Al_2O_3

Для экспериментов было приготовлено девять наножидкостей на основе изопропанола и наночастиц оксида алюминия с объемными концентрациями: 0,20, 0,40, 0,59, 0,79, 0,99, 1,19, 1,38, 1,58 и 1,78%. Была проведена серия измерений: после приготовления образцов, спустя 11 дней и спустя 21 день после приготовления. Экспериментальные результаты и прямая, соответствующая теории Максвелла, представлены на Рис. 6. Значения точек

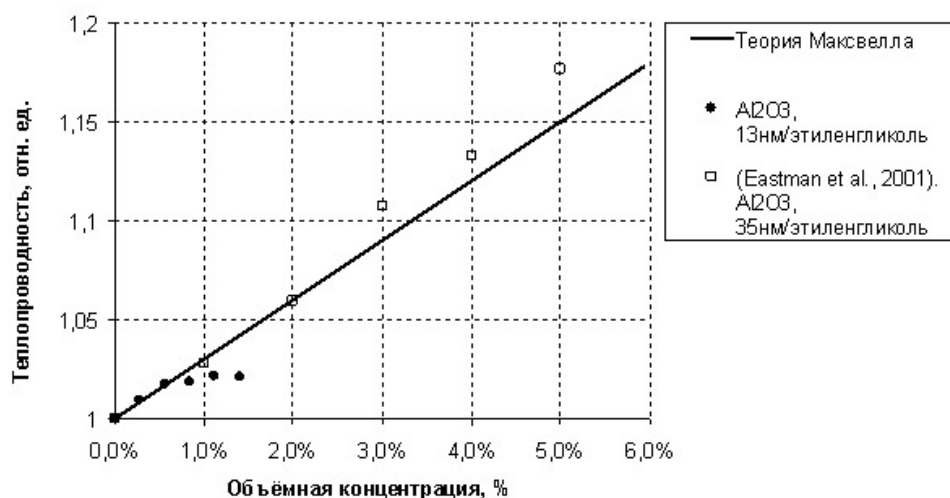


Рис. 5. Сравнение с ранее опубликованными данными [16] для наножидкости на основе этиленгликоля.

на графике — результат усреднения серии измерений, погрешность не превышает размеров самих точек.

Усреднённые результаты измерений и погрешность показаны на рисунке 7. В отличие от этиленгликоля, наножидкость остается устойчивой вплоть до концентраций 2%. Однако, при концентрациях выше 0.5% теплопроводность наножидкости на основе изопропанола проявляет аномальные свойства: экспериментальные данные дают значение, превышающее предсказания теории. Кроме того, следует отметить, что измерения, проведенные в разное время, после синтеза наножидкости дают заметный разброс данных, в то время как погрешность каждого конкретного измерения укладывается в размер точки на графике.

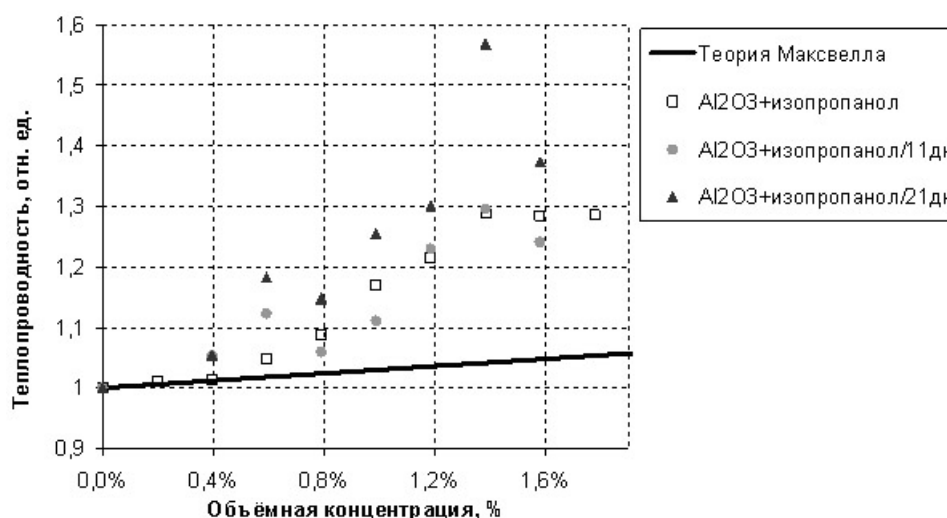


Рис. 6. Зависимость теплопроводности наножидкости на основе изопропанола от объемной концентрации наночастиц.

Экспериментальные данные показывают, что отклонение от теоретических значений для обеих жидкостей происходит при концентрациях наночастиц выше 0.5 %. Это может

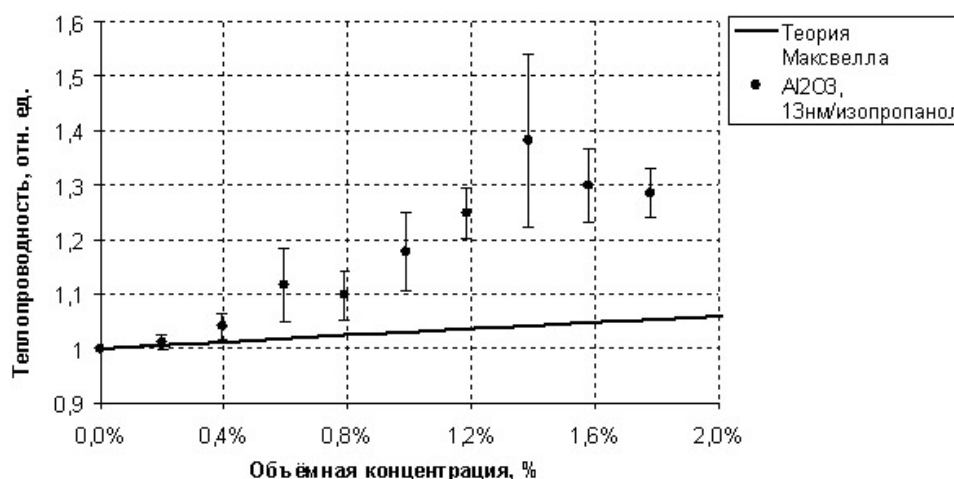


РИС. 7. Осредненная зависимость теплопроводности наножидкости на основе изопропанола от объемной концентрации наночастиц.

быть связано с тем, что для данных концентраций нарушаются допущения, положенные в основу теории. Устойчивость наножидкостей обеспечивается величиной потенциального барьера, возникающего вследствие двойных электрических слоев на границе жидкость — наночастица. Величина этого барьера зависит от электрохимического потенциала наночастиц в определенной жидкости, и очевидно, определяет различие устойчивости различных наножидкостей. Увеличение концентрации наночастиц увеличивает вероятность их непосредственного контакта вследствие броуновского движения, что может приводить к агрегации наночастиц.

Проблема аномального увеличения теплопроводности наножидкости на основе изопропанола более сложная. Учитывая, что в экспериментах наблюдается существенный разброс данных, полученных с большим временным интервалом, можно предположить, что в наножидкости реализуются случайные перколяционные цепи наночастиц, структура которых изменяется вследствие присоединения новых наночастиц и разрыва каких-либо цепей. Таким образом, наличие перколяционных цепей наночастиц может приводить к аномальному росту теплопроводности, а различные значения теплопроводности, измеренные с большим временным интервалом, связаны со случайным распределением перколяционных цепочек по длине и ориентации.

4. Заключение

В ходе выполнения работы были получены следующие результаты:

- (1) Показано, что теплопроводность наножидкостей при малых объемных концентрациях наночастиц Al_2O_3 ($<0,5\%$) соответствует классической теории Максвелла,
- (2) Обнаружено, что с ростом концентрации наночастиц в этиленгликоле теплопроводность отклоняется от теории в меньшую сторону, так как наножидкость становится агрегативно неустойчивой.
- (3) Обнаружено, что теплопроводность наножидкости на основе изопропанола для концентрации наночастиц Al_2O_3 выше $0,5\%$ обладает аномальной теплопроводностью. Предложена перколяционная модель этого явления для подтверждения которой требуется проведение дополнительных исследований.

Благодарности

Работа была выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 09-08-00282), гранта Президента РФ по поддержке ведущих научных школ НШ-3563.2010.1.

Литература

- [1] Choi S.U.S. Enhancing thermal conductivity of fluids with nanoparticles, in: D.A. Siginer, H.P. Wang (Eds.). *Developments and Applications of Non-Newtonian Flows*, 1995, FED-231/MD 66, ASME, New York, 99-105.
- [2] Maxwell J.C. *A Treatise on Electricity and Magnetism*, 2nd ed. — Oxford: Clarendon Press. — 1881, 1, 435.
- [3] Eastman J.A., Choi S.U.S., Li S., Thompson L.J., Enhanced thermal conductivity through the development of nanofluids // *Proceedings of the Symposium on Nanophase and Nanocomposite Materials II*. Materials Research Society, USA —1997. — 457. — 3-11.
- [4] Eastman J.A., Choi S.U.S., Li S., Yu W., Thompson L.J. Anomalous increased effective thermal conductivities of ethylene glycolbased nanofluids containing copper nanoparticles // *Applied Physics Letters*. — 2001. — 78. — 718-720.
- [5] Lee S., Choi S.U.S., Li S., Eastman J.A. Measuring thermal conductivity of fluids containing oxide nanoparticles. // *Journal of Heat Transfer*. — 1999. — 121. — 280-289.
- [6] Wang X., Xu X., Choi S.U.S. Thermal conductivity of nanoparticle–fluid mixture. // *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*. — 1999. — 13. — 474-480.
- [7] Xuan Y., Li Q. Heat transfer enhancement of nanofluids. // *International Journal of Heat and Fluid Flow*. — 2000. — 21. — 58-64.
- [8] S.K. Das, N. Putra, P. Thiesen, W. Roetzel, Temperature dependence of thermal conductivity enhancement for nanofluids // *Journal of Heat Transfer*. — 2003. — 125. — 567-574.
- [9] Murshed S.M.S., Leong, K.C. Yang C. Enhanced thermal conductivity of TiO₂–water based nanofluids // *International Journal of Thermal Sciences*. — 2005. — 44. — 367-373.
- [10] Hong T., Yang H., Choi C.J. Study of the enhanced thermal conductivity of Fe nanofluids. // *Journal of Applied Physics*. — 2005. — 97. — 064311-1-064311-4.
- [11] Li C.H., Peterson G.P. Experimental investigation of temperature and volume fraction variations on the effective thermal conductivity of nanoparticle suspensions (nanofluids). // *Journal of Applied Physics*. — 2006. — 99. — 084314-1-084314-8.
- [12] Wang X.Q, Mujumbar A.S. Heat transfer characteristics of nanofluids: a review. // *Inter. J. Therm. Sci.* — 2007. — 46. — 1-19.
- [13] Buongiorno J., Venerus D. C., Prabhat N. et al., A benchmark study on the thermal conductivity of nanofluids, // *Journal of Applied Physics*. — 2009. — 106. — 094312.
- [14] Рудяк В.Я., Белкин А.А. Моделирование коэффициентов переноса наножидкостей // *Наносистемы: физика, химия, математика*. — 2010. — Т. 1, № 1. — С.156 — 177.
- [15] Skripov P.V., Smotritskiy A.A., Starostin A.A., Shishkin A.V. A Method of Controlled Pulse Heating: Applications // *J. Eng. Thermophys.* — 2007. — 16, 3. — 155-163.
- [16] Eastman J.A., Choi S.U.S., Li S., Thompson L.J., Lee S. Enhanced thermal conductivity through the development of nanofluids // *Proc. Mater. Res. Soc. Symposium*. Materials Res. Soc., Pittsburgh, PA. USA. Boston. MA. USA. — 1997. — 457. — 3-11.

СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ДВУЛУЧЕПРЕЛОМЛЯЮЩИХ КРИСТАЛЛАХ С ПРИМЕСНЫМИ ДВУХУРОВНЕВЫМИ АТОМАМИ

М. Б. Белоненко¹, А. С. Сасов¹, А. В. Алпатов¹

¹Волгоградский институт бизнеса, Волгоград, Россия

mbelonenko@yandex.ru

PACS 78.20.Fm

Рассмотрена динамика взаимодействия электромагнитных импульсов в среде с примесными двухуровневыми атомами. Используя кинетические уравнения для средних значений операторов псевдоспина, расцепленные в приближении хаотических фаз, проведено численное исследование условий образования связанных состояний оптических импульсов и показана эволюция системы для различных параметров задачи. Проведена аналогия между полученными результатами и общеизвестными солитонными режимами.

Ключевые слова: связанные состояния, двулучепреломление, примеси, двухуровневые системы.

1. Введение

Развитие современной вычислительной техники, связанное с повышением быстродействия компьютеров, влечет за собой и развитие оптических систем как таких систем, в которых обработка информации может происходить с максимально возможной скоростью. Из этого с необходимостью следует актуальность построения таких полностью оптических приборов, в которых свет может быть использован для управления светом [1,2]. С другой стороны рост интереса к оптическим эффектам в нелинейной среде, возникающим при взаимодействии уединенных волн, стимулируется и успешными экспериментами, в которых получены устойчивые световые структуры, локализованные в пространстве (многомерные оптические солитоны). Важным направлением в теории взаимодействия уединенных оптических волн, особенно с точки зрения практических приложений, является исследование связанных состояний световых солитонов и изучение их устойчивости. Связанные состояния обычно появляются при взаимодействии оптических солитонов и представляют различные долгоживущие во времени структуры. В качестве широко известного выше упоминаемого состояния приведем так называемый бризер — солитонное связанное состояние, возникающее при взаимодействии оптических 2π -импульсов [3]. Отметим также, что в последнее время все больше возрастает теоретический и практический интерес к созданию устройств памяти на основе уединенных волн. Существует множество различных способов записи информации, таких как оптические, электрические, магнитные и т.д. В последние годы быстро развивается теория записи информации, представляемой в виде электромагнитных солитонов, которая является достаточно перспективной [4,5]. Особенно перспективно хранить информацию в виде аналогичном тому, в котором производится ее обработка. То есть, если для обработки используется оптическое устройство, управляющее светом при помощи света, то и информацию желательно хранить в виде аналога оптического солитона. Одним из способов сохранения параметров электромагнитного солитона, распространяющегося в среде, является локализация его в некотором пространстве, ограниченном со всех сторон потенциальными барьерами (стенками). В этом случае, если энергия

солитона меньше некоторого порогового значения (энергии потенциального барьера), то солитон не может выйти за пределы данного пространства. Такой способ локализации солитона в ячейке описан в [6]. Другим перспективным, на наш взгляд, способом сохранения состояния оптического импульса является получение связанных состояний путем взаимодействия двух электромагнитных импульсов в среде. В этом случае требуется найти такие параметры вещества и сигналов, при которых данный процесс будет возможен. В данной работе в качестве такого вещества предлагается использовать двулучепреломляющий кристалл с двухуровневыми примесями. Исследованию возможности записи информации в таких системах и посвящена данная работа. Отметим, что основные физические эффекты в аналогичных ситуациях исследовались многими авторами. Так эффект самоиндуцированной прозрачности в анизотропных средах исследовался в работах [7,8]. Эффекты связанные с учетом диполь-дипольного взаимодействия в работах [9,10], а особенности поведения самоиндуцированной прозрачности с учетом состояния поляризации в [11,12]. Вместе с тем, сразу отметим, что наш подход отличается от использованных в вышеперечисленных работах прежде всего отсутствием приближений типа «медленно меняющихся амплитуд и фаз» и «однонаправленного распространения». Также в работе при получении основных результатов не предполагалась малой величина диполь-дипольного взаимодействия.

2. Постановка задачи и основные уравнения

Рассмотрим примесную двухуровневую систему, находящуюся в двулучепреломляющем кристалле. Пусть расстояние между уровнями системы — Ω , энергия кулоновского взаимодействия между i -й и j -й примесными системами — J_{ij} . Воспользуемся псевдоспиновым формализмом, в котором оператор дипольного момента системы есть S^z , а оператор энергии — S^x (такой выбор связан с простотой учета диполь-дипольного взаимодействия). Тогда уравнения движения Гейзенберга для средних значений операторов псевдоспина, расцепленные в приближении хаотических фаз есть [7,8]:

$$\begin{cases} \langle \dot{S}^x \rangle = (J \langle S^z \rangle + \alpha E_1 + \beta E_2) \langle S^y \rangle, \\ \langle \dot{S}^y \rangle = \Omega \langle S^z \rangle - (J \langle S^z \rangle + \alpha E_1 + \beta E_2) \langle S^x \rangle, \\ \langle \dot{S}^z \rangle = -\Omega \langle S^y \rangle, \end{cases} \quad (1)$$

где $J = \sum_j J_{ij}$, E_1, E_2 — электрические поля электромагнитной волны, отличающиеся взаимно ортогональной поляризацией, α, β — удвоенные дипольные моменты нашей системы, возникающие в направлениях, совпадающих с направлениями E_1, E_2 . Учет диполь-дипольного взаимодействия [9,10] произведен здесь для полноты, и в случае малых концентраций примесных атомов его можно не учитывать. Взаимодействие электрического поля с примесной подсистемой выбрано в стандартном виде. Здесь необходимо отметить, как одна компонента псевдоспина может давать вклад в разнонаправленные (вплоть до взаимной ортогональности) компоненты поляризации. Простейшим примером таких систем могут служить сегнетоэлектрики с водородными связями, в которых положение протонов на водородных связях (которые и описываются эффективным псевдоспином $1/2$) однозначно связано со смещением тяжелых ионов. Вклад в поляризацию дают именно тяжелые ионы, которые могут смещаться в общем случае в направлении никак не связанном с положением протонов на водородных связях, описываемых псевдоспиновыми операторами. Отметим, что псевдоспиновый формализм является лишь эффективным и говорит только том, что у системы надо рассматривать два уровня энергии, ничего не говоря о конкретизации направления поляризации. Так, в частности, система уравнений (1) может быть

применена для рассмотрения примесей в сегнетоэлектрической матрице аналогичной по строению дигидрофосфату калия.

Данную систему необходимо решать совместно с уравнениями на компоненты электрического поля [11]:

$$\begin{aligned}(E_1)_{tt} - c_1^2 (E_1)_{\xi\xi} + 4\pi\alpha \langle S^z \rangle_{tt} &= 0, \\ (E_2)_{tt} - c_2^2 (E_2)_{\xi\xi} + 4\pi\beta \langle S^z \rangle_{tt} &= 0,\end{aligned}\tag{2}$$

где c_1, c_2 — скорости электромагнитных волн с поляризацией E_1, E_2 . Скорости c_1, c_2 учитывают свойства самого кристалла, в который помещены примеси, а последние слагаемые учитывают вклад поляризации от примесных подсистем. Отметим здесь, что наша модель имеет существенное ограничение, связанное с тем, что мы рассматриваем связь различных поляризационных компонент с одним и тем же переходом в примесном атоме. Понимая необходимость обобщения, мы не включаем более общий случай в нашу работу, считая, что он выходит за ее рамки.

Заметим, что решение системы уравнений (1,2) для волн одной поляризации неоднократно исследовалось в работах [12-15], где в различных приближениях были получены решения солитонного типа, как для огибающих волн, так и для случая ультракоротких оптических импульсов. Важное отличие данной работы состоит в том, что здесь рассматриваются волны имеющие поляризацию не одной компоненты, причем, в силу того, что кристалл двулучепреломляющий, компоненты поляризации распространяются с разной скоростью.

3. Основные результаты численных расчетов

Система уравнений (1,2) решалась численно с использованием явной численной схемы. Типичный результат приведен на рисунке 1. Контроль правильности вычислений проводился с учетом того, что система уравнений (1) допускает интеграл движения $\langle S^x \rangle^2 + \langle S^y \rangle^2 + \langle S^z \rangle^2 = const$.

Начальные условия задаются в виде гауссова импульса для одной из компонент поляризации электрического поля. Другая компонента — нулевая. Примесная система находится в равновесном состоянии. Граничные условия выбраны «прозрачными», т.е. пропускающими импульс электрического поля без отражения. Помимо контроля правильности численных расчетов при помощи существующих точных интегралов движения системы, дополнительный контроль правильности проводился путем сравнения с аналитическими и численными результатами авторов, отраженных, к примеру, в [18,19,26].

Отметим квазипериодический характер изменения поляризации примесной подсистемы и связанный с ним квазипериодический характер изменения компоненты поля E_1 , которое вследствие величины дипольного момента наиболее сильно связано с поляризацией. Часть энергии уходит в сопутствующее излучение. Компонента же поля E_2 распадается на два бегущих локализованных состояния (что и следует из симметрии задачи и начальных условий). Также имеются и изменения компоненты E_2 , но гораздо менее выраженные, обязанные своему существованию локализации поляризации. Если связь между полями E_1, E_2 и поляризацией положить одинаковой, то получим результат, представленный на рисунке 2.

Обратим внимание на то, что характерным масштабом времени в данной задаче выступает величина $\hbar/\Omega$, которая соответствует временам примерно 10^{-13} с. На рисунках за единицу времени принята величина 10^{-12} с. Таким образом, теоретически обнаруженные нами состояния могут существовать на временах более чем в 100 раз превышающих характерное время задачи, а, следовательно, могут быть названы долгоживущими.

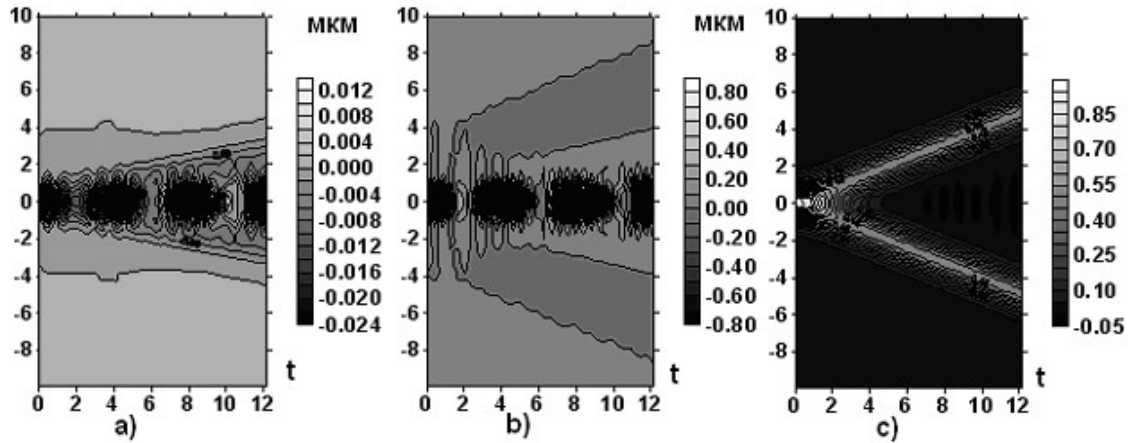


РИС. 1. Эволюция первоначального состояния поляризации. а) поляризация примесной подсистемы; б) компонента поля $E_1(c_1 > c_2)$; в) компонента поля E_2 . $\Omega = 0.4 \cdot 10^{-22}$ Дж; $J = 0.4 \cdot 10^{-22}$ Дж; $\alpha = 4.0 \cdot 10^{-29}$ Кл·м; $\beta = 0.8 \cdot 10^{-30}$ Кл·м. В шкале яркости — поляризация, нормированная на поляризацию насыщения.

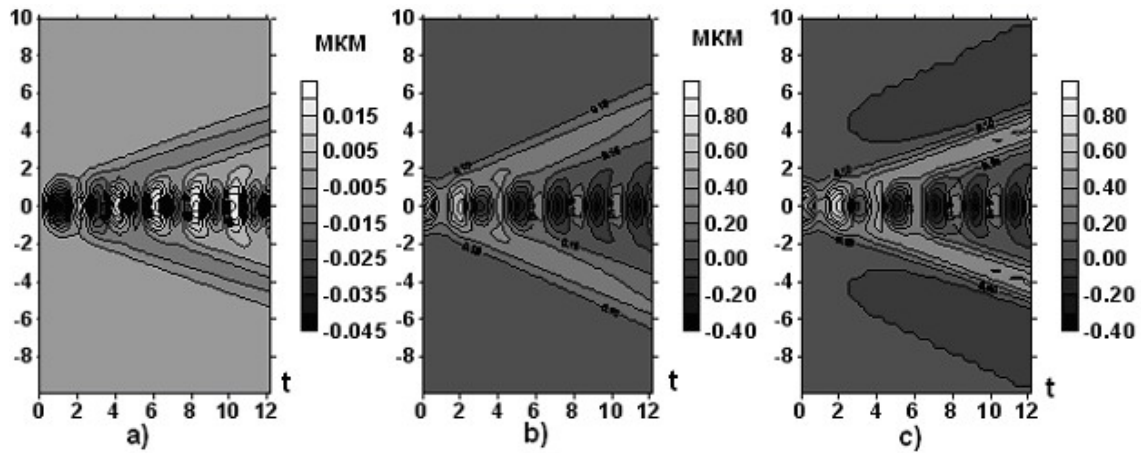


РИС. 2. Эволюция первоначального состояния поляризации. а) поляризация примесной подсистемы; б) компонента поля $E_1(c_1 > c_2)$; в) компонента поля E_2 . $\Omega = 0.4 \cdot 10^{-22}$ Дж; $J = 0.4 \cdot 10^{-22}$ Дж; $\alpha = 0.8 \cdot 10^{-29}$ Кл·м; $\beta = 0.8 \cdot 10^{-29}$ Кл·м. В шкале яркости — поляризация, нормированная на поляризацию насыщения.

Отметим, что при этом, помимо образования связанного состояния, значительно большая часть энергии уходит в излучение. В данном случае излучение при распаде «захватывает» часть поляризации и, помимо осциллирующего локализованного состояния, имеются бегущие локализованные состояния, скорости которых определяются скоростями электромагнитных волн различной поляризации. Отметим, что локализованное состояние резко стабилизируется при уменьшении константы диполь-дипольного взаимодействия между примесными подсистемами (рис. 3).

В противоположность этому увеличение величины Ω разрушает локализованное состояние и приводит к крайне нерегулярному отклику, в том числе и для поляризации.

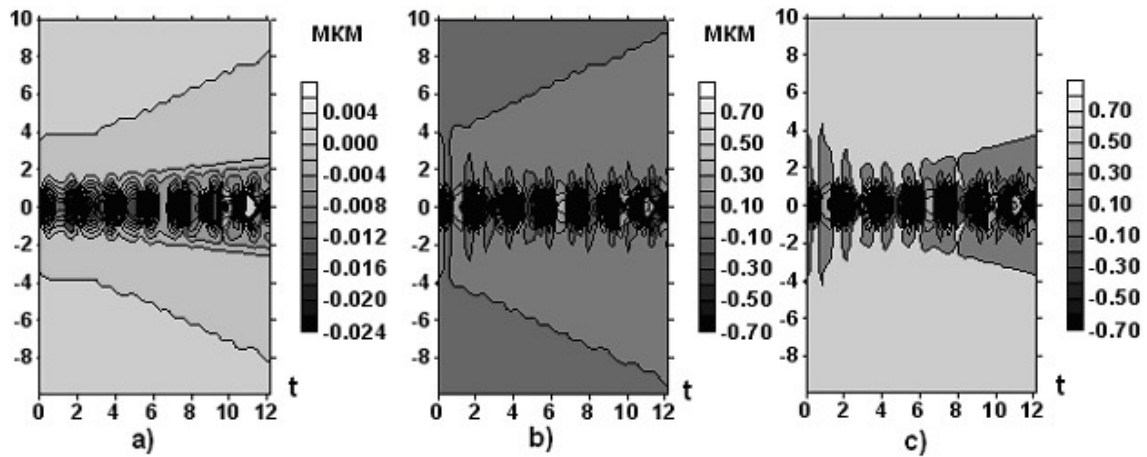


РИС. 3. Эволюция первоначального состояния поляризации. а) поляризация примесной подсистемы; б) компонента поля $E_1 (c_1 > c_2)$; в) компонента поля E_2 . $\Omega = 0.4 \cdot 10^{-22}$ Дж; $J = 0.4 \cdot 10^{-25}$ Дж; $\alpha = 4.0 \cdot 10^{-29}$ Кл·м; $\beta = 4.0 \cdot 10^{-29}$ Кл·м. В шкале яркости — поляризация, нормированная на поляризацию насыщения.

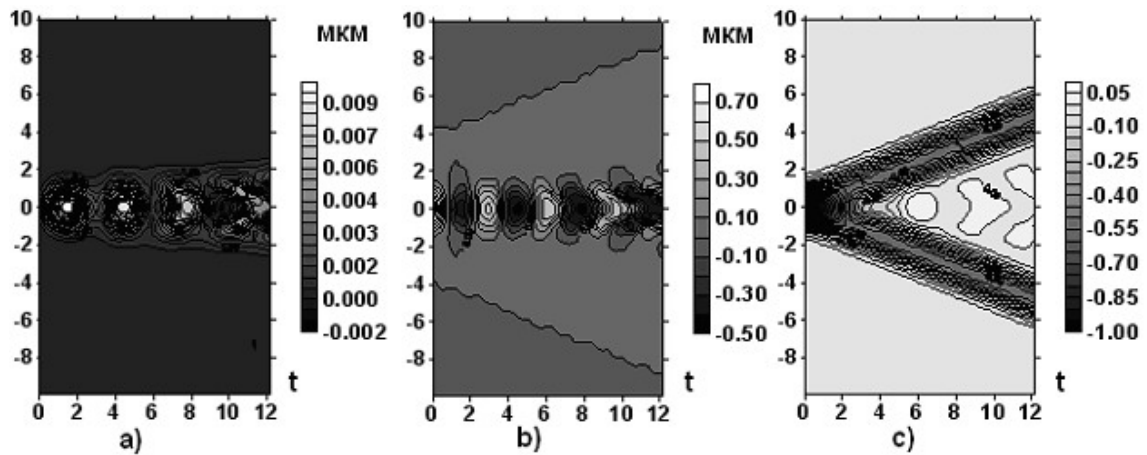


РИС. 4. Эволюция первоначального состояния поляризации. а) поляризация примесной подсистемы; б) компонента поля $E_1 (c_1 > c_2)$; в) компонента поля E_2 . $\Omega = 0.4 \cdot 10^{-22}$ Дж; $J = 0.4 \cdot 10^{-22}$ Дж; $\alpha = 8.0 \cdot 10^{-29}$ Кл·м; $\beta = 0.8 \cdot 10^{-29}$ Кл·м. В шкале яркости — поляризация, нормированная на поляризацию насыщения.

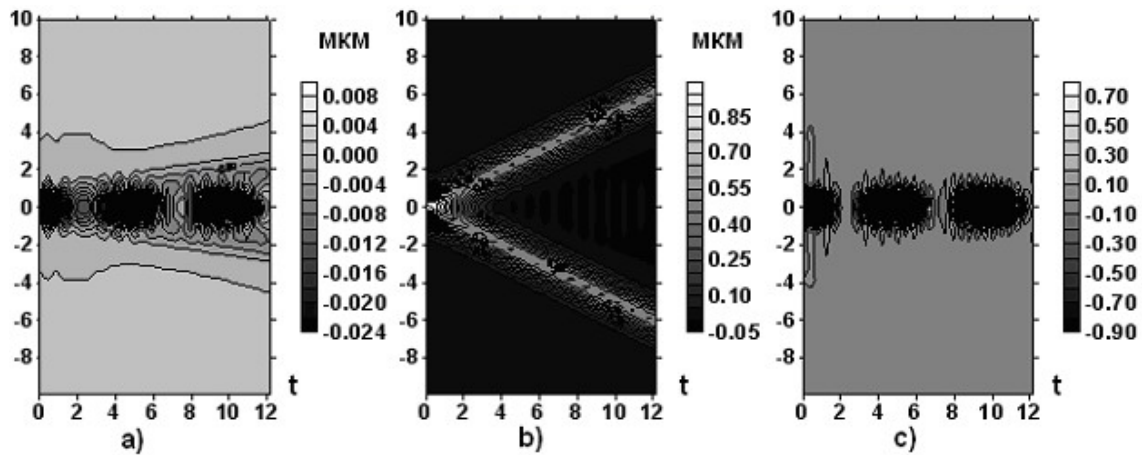


РИС. 5. Эволюция первоначального состояния поляризации. а) поляризация примесной подсистемы; б) компонента поля $E_1 (c_1 > c_2)$; в) компонента поля E_2 . $\Omega = 0.4 \cdot 10^{-22}$ Дж; $J = 0.4 \cdot 10^{-22}$ Дж; $\alpha = 8.0 \cdot 10^{-30}$ Кл·м; $\beta = 4.0 \cdot 10^{-29}$ Кл·м. В шкале яркости – поляризация, нормированная на поляризацию насыщения.

Отметим, что все вышеперечисленные зависимости и выводы сохраняются и в случае, когда компоненты поля E_1, E_2 действуют на поляризацию примесной системы противоположным образом. Например, типичный случай динамики в случае противоположной полярности импульсов E_1, E_2 представлен на рисунке 4.

Также сохраняется и вывод о том, что происходит распад на два локализованных образования у той компоненты поля, которая наиболее слабо связана с примесной системой (рис. 5). Все это позволяет сделать вывод о том, что связанное состояние обязано своим существованием «сильной» примесной системе и одной из компонент электромагнитного поля.

Отметим, что само существование рассмотренных выше локализованных состояний не является удивительным фактом, если принять в рассмотрение то обстоятельство, что динамика примесной системы и одной компоненты электрического поля описывается в некоторых приближениях при помощи эффективного уравнения sin-Gordon [16], решения которого в виде бризеров и будут аналогами полученных нами численных решений. Подтверждением того факта, что полученные решения являются аналогами бризеров являются результаты, касающиеся изменения постоянных связи примесной системы и какой либо компоненты электрического поля (α, β). Здесь термин «бризер» используется для обозначения локализованных «осциллирующих» решений в системах, неинтегрируемых методом обратной задачи, существование которых, как и в нашем случае, вызвано взаимодействием с так называемыми «внутренними» модами. В нашем случае роль «внутренних мод» играют процессы в примесной подсистеме. Вместе с тем отметим, что полученные нами решения носят более нерегулярный характер, а та часть решения, что соответствует более слабо связанной компоненте, распространяется с периодическим изменением скорости (см. например рис. 4с). Подобное периодическое изменение скорости можно связать с обменом энергией между локализованным состоянием и нелокализованными модами. Отметим, что полностью аналогичный эффект был уже исследован в случае брэгговских солитонов самоиндуцированной прозрачности [16]. Такое поведение солитона самоиндуцированной

прозрачности, аналогичное поведению зумерона [17], связывается в [16] также с обменом энергией между солитоном и модами несолитонной части спектра. Зумерон, как и солитон, обладает устойчивостью при распространении и взаимодействии, но его скорость и амплитуда в процессе движения испытывают осцилляции. В данном случае мы связываем периодические изменения скорости нашего состояния с перекачкой энергии между импульсом, энергия которого сосредоточена в основном в электрическом поле, и примесной подсистемой. Данное поведение наблюдалось в широком диапазоне параметров, что свидетельствует о том, что данный режим является достаточно устойчивым.

4. Выводы

- (1) Установлено, что при взаимодействии электромагнитного импульса имеющего произвольную поляризацию в двулучепреломляющем кристалле с примесной подсистемой образуется связанное долгоживущее состояние солитонного типа. Данная динамика наблюдается в широком диапазоне начальных условий и параметров задачи, что делает возможным создание устройств памяти на основе оптических импульсов.
- (2) Выявлено, что существуют такие параметры задачи, при которых один из импульсов после взаимодействия испытывает периодические изменения скорости и ширины. Такой импульс напоминает широко исследуемый в последнее время зумерон [16,18,19]. Данное поведение возникает вследствие перекачки энергии между локализованным состоянием электромагнитного поля и примесной подсистемой.
- (3) Полученное связанное состояние напоминает хорошо известный бризер, возникающий в задачах самоиндуцированной прозрачности, которые, в свою очередь, могут быть получены из предельного случая рассматриваемой в работе системы [20].
- (4) Установлено, что увеличение диполь — дипольного взаимодействия в примесной подсистеме уменьшает время жизни локализованного состояния.

Литература

- [1] Гиббс Х. Оптическая бистабильность. Управление светом с помощью света. — Пер. с англ. Москва: Мир, 1988. — 520 с.
- [2] Розанов Н.Н., Ходова Г.В. // Оптика и спектроскопия. — 1986. — 61, 1. — 198.
- [3] Додд Р., Эйлбек Дж., Гиббон Дж., Моррис Х. Солитоны и нелинейные волновые уравнения. — Пер. с англ. Москва: Мир, 1988. — 694 с.
- [4] Tikhonenko V., Christou J., Luther-Davies B. Three dimensional bright spatial soliton collision and fusion in a saturable nonlinear medium // Phys. Rev. Let. — 1996. — 76, 15. — 2698-2702.
- [5] Kang J.U., Stegeman G.I., Aitchison J.S., Akhmediev N.N. Observation of Manakov spatial solitons in AlGaAs planar waveguides // Phys. Rev. Let. — 1996. — 76, 20. — 3699-3702.
- [6] Капля Е. В. Взаимодействие и локализация электромагнитных солитонов в окрестности слоев неоднородности в нанoeлектронных устройствах на основе полупроводниковых сверхрешеток. // Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. — Волгоград: Волгоградский Государственный Архитектурно-строительный Университет, 2004.
- [7] Агранович В.М., Адамашвили Г.Т., Рупасову В.И. Самоиндуцированная прозрачность анизотропных сред // ЖЭТФ. — 1981. — 80,5. — 1746-1756.
- [8] Steudel H., Zabolotskii A.A., Meinel R. Solitons for the rotating reduced Maxwell-Bloch equations with anisotropy // Phys. Rev. E. — 2005. — 72, 5. — 056608(1)-056608(7).
- [9] Смирнов А.В. Затухание солитонов в двухуровневых средах, связанное с диполь-дипольным взаимодействием резонансных центров // Квантовая электроника. — 1990. — 17, 11. — 1513-1517.
- [10] Белоненко М.Б., Кабаков В.В. Самоиндуцированная прозрачность в резонансной среде с диполь-дипольным взаимодействием // Оптика и спектроскопия. — 2000. — 88, 3. — 435-438.
- [11] Заболотский А.А. Самоиндуцированная прозрачность циркулярно поляризованных фемтосекундных импульсов // Письма в ЖЭТФ. — 2003. — 77, 9. — 558-562.

- [12] Steudel H. and Zabolotskii A.A. Solitons of the reduced Maxwell-Bloch equations for circularly polarized light // J. Phys. A. — 2004. — 37, 18. — 5047-5055.
- [13] Аллен Л., Эберли Дж. Оптический резонанс и двухуровневые атомы. — Москва: Мир, 1978. — 224 с.
- [14] Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. — Москва: Мир, 1975. — 308 с.
- [15] Afanas'ev A.A., Vlasov R.A., Khasanov O.K., Smirnova T.V., Fedotova O.M. Coherent and incoherent solitons of self-induced transparency in dense, resonant media // J. Opt. Soc. Am. B. — 2002. — 19. — 911-919.
- [16] Sazonov S.V., Ustinov N.V. Optical transparency modes in anisotropic media // SPIE Proceedings. — 2006. — 6259. — 6259-12.
- [17] Лэм Дж. Л. Введение в теорию солитонов. — Пер. с англ. Москва: Мир, 1983. — 294 с.
- [18] Белоненко М.Б., Кабаков В.В. Динамика автолокализованных возбуждений в сегнетоэластиках с примесными двухуровневыми центрами // Изв. РАН, Сер. физ. — 1998. — 62,8. — 1497-1501.
- [19] Belonenko M.B., Kabakov V.V. The peculiarities of the self-induced transparency effect in ferroelectric medium // Laser Physics. — 1997. — 7, 6. — 1197-1201.
- [20] Сазонов С. В. Электромагнитные видеосолитоны и бризеры в сегнетоэлектрике типа KDP // ФТТ. — 1995. — 37, 6. — 1612-1622.
- [21] Сазонов С. В., Соболевский А. Ф. О нелинейном распространении предельно коротких импульсов в оптически одноосных средах // ЖЭТФ. — 2003. — 123, 6. — 1160-1178.
- [22] Манцызов Б. И. Оптический зумерон как результат биений внутренних мод брэгговского солитона // Письма в ЖЭТФ. — 2005. — 82, 5. — 284-289.
- [23] Калоджеро Ф., Дегасперис А. Спектральные преобразования и солитоны. — Пер. с англ. Москва: Мир, 1985. — 472 с.
- [24] Манцызов Б.И. Оптический зумерон // Известия РАН, Сер. физ. — 2005. — 69, 12. — 1789-1793.
- [25] Mantsyzov B.I., Keiichiro N. // SPIE Proceedings. — 1996. — 2798. — 2798-15.
- [26] Belonenko M.B., Sasov A.S. Effect of the ferroelectric environment on the dynamics of self-induced transparency in solitons // Journal of Russian Laser Research. — 2006. — 27,1. — 70-80.

ОПИСАНИЕ ДИНАМИКИ НАНОСИСТЕМ МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ВЛИЯНИЯ

А. А. Бирюков¹, М. А. Шлеенков²

Самарский государственный университет

¹biryukov@ssu.samara.ru, ²shleenkov@list.ru

PACS 85.35.-p, 03.65.Yz

В рамках формализма функционального интегрирования и метода функционала влияния получены выражения, описывающие эволюцию статистической матрицы плотности наносистемы в координатном и энергетическом представлениях. Найден явный вид функционала влияния квантованного электромагнитного поля на наносистему. Показана эквивалентность предложенного метода методам, развитым в рамках теории возмущений.

Ключевые слова: наносистемы в электромагнитном поле, формализм функционального интегрирования, метод функционала влияния.

1. Введение

В настоящее время активно изучаются и исследуются наносистемы, проявляющие свойства сложных многоуровневых квантовых систем. Одним из направлений этих исследований является изучение магнитно-электрических свойств и динамики состояний под действием электромагнитного излучения. Также научный и практический интерес представляют описание процессов возбуждения наносистем вплоть до их разрушения под действием электромагнитного поля. Имеются технологии возбуждения атомов и молекул мощным лазерным излучением, так что наблюдается их диссоциация. Например, в работах [1], [2] наблюдалось явление изотопически-селективной диссоциации различных многоатомных молекул (BCl_3 , SiF_4 , SF_6) при различных характеристиках сильного лазерного поля CO_2 -лазера. В работах [3],[4] исследовалась инфракрасная многофотонная диссоциация молекул трихлорсилана (SiHCl_3) и метилтрифторсилана (SiF_3CH_3). Использование лазерного излучения для разделения изотопов обсуждалось в работе [5]. Эта идея была реализована в работах [6],[7]. Особенности диссоциации молекул UF_6 в поле лазера и применение этого явления для разделения изотопов урана обсуждаются в работе [8]. В этих задачах принципиальным является использование мощного лазерного поля для воздействия на исследуемую квантовую систему, поэтому описание данных явлений в рамках теории возмущений, в частности в низших ее порядках, является некорректным. Исследования показывают, что дифференциальные уравнения, описывающие данные процессы, являются существенно нелинейными. Исследования этих уравнений, построение их решений представляют большие математические трудности. В связи с этим возникает задача – поиск непertурбативных подходов для описания динамики наносистем, взаимодействующих с интенсивным электромагнитным полем.

В данной работе предлагается непertурбативный подход к квантовому описанию эволюции наносистемы, взаимодействующей с интенсивным электромагнитным полем. Поведение квантовой системы определяется статистической матрицей плотности, явный вид

которой определяется в формализме функционального интегрирования, используя метод функционала влияния.

2. Эволюция системы «вещество+излучение» в представлении функционального интегрирования

Рассмотрим квантовую наносистему, взаимодействующую с электромагнитным полем. Полный гамильтониан системы имеет вид:

$$\hat{H}_{full} = \hat{H}_{syst} + \hat{H}_{field} + \hat{H}_{int},$$

где $\hat{H}_{syst}$ — оператор Гамильтона квантовой наносистемы (атомов, молекул);

$$\hat{H}_{field} = \hbar\Omega_k(\hat{a}_k^*\hat{a}_k + 1/2)$$

— гамильтониан свободного электромагнитного поля, $\hat{a}_k^*$ и $\hat{a}_k$ — операторы рождения и уничтожения, моды k электромагнитного поля;

$$H_{int} = \hbar g_k \hat{x}(\hat{a}_k^* + \hat{a}_k)$$

— гамильтониан взаимодействия исследуемой квантовой подсистемы и электромагнитного поля в дипольном приближении, где электромагнитное поле поляризовано вдоль оси x , $\hat{x}$ — оператор координаты частицы квантовой системы, константа взаимодействия g_k :

$$g_k = \frac{q}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar\Omega_k}{2\varepsilon_0 V}},$$

где q — заряд частицы квантовой системы, ε_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума, V — объем квантования электромагнитного поля.

Будем описывать динамику системы «вещество+излучение» с помощью статистического оператора $\hat{\rho}_{full}(t)$, эволюция которого во времени определяется уравнением:

$$\hat{\rho}_{full}(t) = \hat{U}(t)\hat{\rho}_{full}(0)\hat{U}^+(t), \quad (1)$$

где $\hat{\rho}_{full}(0)$ — статистический оператор системы «вещество+излучение» в начальный момент времени, а оператор эволюции $\hat{U}(t)$ имеет вид:

$$\hat{U}(t) = \hat{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}_{full}(\tau) d\tau \right]. \quad (2)$$

Представим операторное уравнение (1) для статистического оператора в базисе векторов $|x, \alpha\rangle$:

$$|x, \alpha\rangle = |x\rangle \otimes |\alpha\rangle,$$

где вектора $|x\rangle$ и $|\alpha\rangle$ определяются уравнениями [13]:

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \quad \int |x\rangle\langle x| dx = 1, \quad \langle x|y\rangle = \delta(x-y), \quad (3)$$

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad \int \frac{d^2\alpha_k}{\pi} |\alpha_k\rangle\langle\alpha_k| = 1, \quad \langle\alpha'_k|\alpha_k\rangle = \exp \left[-\frac{|\alpha'_k|^2 + |\alpha_k|^2}{2} + \alpha'^*_k \alpha_k \right]. \quad (4)$$

Уравнение (1), представленное в базисе векторов $|x, \alpha\rangle$, принимает вид

$$\rho_{full}(x_f, \alpha_f^*, x'_f, \alpha'_f; t) = \int dx_{in} dx'_{in} \frac{d^2 \alpha_{in}}{\pi} \frac{d^2 \alpha'_{in}}{\pi} \times \\ \times U(x_f, \alpha_f^*, t | x_{in}, \alpha_{in}) \rho_{full}(x_{in}, \alpha_{in}^*, x'_{in}, \alpha'_{in}; 0) U^*(x'_f, \alpha'_f, t | x'_{in}, \alpha'^*_{in}), \quad (5)$$

где

$$\rho_{full}(x_{in}, \alpha_{in}^*, x'_{in}, \alpha'_{in}; 0) = \langle x_{in}, \alpha_{in} | \hat{\rho}_{full}(0) | x'_{in}, \alpha'_{in} \rangle, \\ \rho_{full}(x_f, \alpha_f^*, x'_f, \alpha'_f; t) = \langle x_f, \alpha_f | \hat{\rho}_{full}(t) | x'_f, \alpha'_f \rangle$$

— статистические матрицы плотности соответственно в начальный момент времени $t = 0$ и в некий момент времени t ;

$$U(x_f, \alpha_f^*, t | x_{in}, \alpha_{in}) = \langle x_f, \alpha_f | \hat{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}_{full}(\tau) d\tau \right] | x_{in}, \alpha_{in} \rangle$$

— ядро оператора эволюции.

В выбранном базисе квантовую систему описываем в координатном представлении, электромагнитное поле — в голоморфном представлении [9]. Описание квантованного электромагнитного поля в представлении когерентных состояний (4) обусловлено тем, что в этом представлении в пределе больших амплитуд его свойства аналогичны свойствам классической электромагнитной волны.

Уравнение для статистической матрицы плотности (5) представим в формализме функционального интегрирования. Ядро оператора эволюции (2) в представлении функционального интегрирования принимает вид [10], [14]:

$$U(x_f, \alpha_f^*, t | x_{in}, \alpha_{in}) = \int \mathcal{D}\alpha(t') \mathcal{D}p(t') \mathcal{D}x(t') \exp \left\{ \frac{1}{2} (\alpha^*(t) \alpha(t) + \alpha^*(0) \alpha(0)) \right\} \times \\ \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t \left[p(t') \dot{x}(t') - \frac{\hbar}{2i} (\alpha^*(t') \dot{\alpha}(t') - \dot{\alpha}^*(t') \alpha(t')) - \right. \right. \\ \left. \left. - H_{syst}(p(t'), x(t')) - \mathcal{H}_{field}(\alpha^*(t'), \alpha(t')) - \mathcal{H}_{int}(x(t'), \alpha^*(t'), \alpha(t')) \right] dt' \right\}. \quad (6)$$

Используя (6), уравнение для матрицы плотности системы «поле+излучение» (5) представим в виде:

$$\rho_{full}(x_f, \alpha_f^*, x'_f, \alpha'_f; t) = \int \mathcal{D}\alpha(t') \mathcal{D}\alpha'(t') \mathcal{D}p(t') \mathcal{D}p'(t') \mathcal{D}x(t') \mathcal{D}x'(t') \frac{d^2 \alpha_{in}}{\pi} dx_{in} \frac{d^2 \alpha'_{in}}{\pi} dx'_{in} \times \\ \times \exp \left\{ \frac{1}{2} (\alpha^*(t) \alpha(t) + \alpha^*(0) \alpha(0)) \right\} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t \left[p(t') \dot{x}(t') - \frac{\hbar}{2i} (\alpha^*(t') \dot{\alpha}(t') - \dot{\alpha}^*(t') \alpha(t')) - \right. \right. \\ \left. \left. - \mathcal{H}_{syst}(p(t'), x(t')) - \mathcal{H}_{field}(\alpha^*(t'), \alpha(t')) - \mathcal{H}_{int}(x(t'), \alpha^*(t'), \alpha(t')) \right] dt' \right\} \times \\ \times \rho(x_{in}, \alpha_{in}, x'_{in}, \alpha'_{in}, t = 0) \exp \left\{ \frac{1}{2} (\alpha'^*(t) \alpha'(t) + \alpha'^*(0) \alpha'(0)) \right\} \times \\ \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t \left[p'(t') \dot{x}'(t') - \frac{\hbar}{2i} (\alpha'^*(t') \dot{\alpha}'(t') - \dot{\alpha}'^*(t') \alpha'(t')) - \right. \right. \\ \left. \left. - \mathcal{H}_{syst}(p'(t'), x'(t')) - \mathcal{H}_{field}(\alpha'^*(t'), \alpha'(t')) - \mathcal{H}_{int}(x'(t'), \alpha'^*(t'), \alpha'(t')) \right] dt' \right\}. \quad (7)$$

Таким образом, мы получили замкнутое выражение, описывающее эволюции системы «поле+излучение». Это выражение представляет собой функциональный интеграл (который может быть представлен бесконечномерным интегралом) по промежуточным состояниям системы «вещество+излучение» с фиксированными начальными и конечными условиями. Вычисление данных интегралов требует специальных математических средств.

3. Описание динамики квантовой системы, взаимодействующей с электромагнитным полем методом функционала влияния

В ряде задач нас интересует лишь динамика исследуемой квантовой системы (атома, молекулы или другой наносистемы) в электромагнитном поле. Рассмотрим модель, когда электромагнитное поле имеет столь большую интенсивность, что обратным влиянием исследуемой квантовой системы на него можно пренебречь, то есть изменение состояния электромагнитного поля в процессе эволюции системы «вещество+излучение» можно не учитывать. В этом случае можно провести редукцию статистической матрицы плотности полной системы (7) к статистической матрице плотности квантовой системы:

$$\rho_{syst}(x_f, x'_f; t) = \int_{\alpha_f = \alpha'_f} \rho_{full}(x_f, \alpha_f^*, x'_f, \alpha_f; t) \frac{d^2 \alpha_f}{\pi}. \quad (8)$$

В ряде случаев допустимо, что в начальный момент времени подсистемы «вещество» и «излучение» не взаимодействовали между собой. В этом случае возможна факторизация начальной матрицы плотности:

$$\rho_{full}(x_{in}, \alpha_{in}^*, x'_{in}, \alpha'_{in}, t = 0) = \rho_{syst}(x_{in}, x'_{in}, t = 0) \cdot \rho_{field}(\alpha_{in}^*, \alpha'_{in}, t = 0). \quad (9)$$

Подставляя (7) в (8), а также используя условия (9), запишем статистическую матрицу плотности исследуемой квантовой подсистемы $\rho_{syst}(x_f, x'_f; t)$ в некий момент t в виде:

$$\begin{aligned} \rho_{syst}(x_f, x'_f; t) = & \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t \left[p(t') \dot{x}(t') - H_{sist}(p(t'), x(t')) - p'(t') \dot{x}'(t') + H_{sist}(p'(t'), x'(t')) \right] dt' \right\} \times \\ & \times F[x(t'), x'(t')] \rho_{syst}(x_{in}, x'_{in}; t = 0) Dp(t') Dx(t') Dp'(t') Dx'(t') dx_{in} dx'_{in}, \end{aligned} \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} F[x, x'] = & \int_{\alpha_f = \alpha'_f} \int \mathcal{D}\alpha(t') \mathcal{D}\alpha'(t') \frac{d^2 \alpha_{in}}{\pi} \frac{d^2 \alpha'_{in}}{\pi} \frac{d^2 \alpha_f}{\pi} \rho_{field}(\alpha_{in}, \alpha'_{in}; t = 0) \times \\ & \times \exp \left\{ \frac{1}{2} (\alpha^*(t) \alpha(t) + \alpha^*(0) \alpha(0) + \alpha'^*(t) \alpha'(t) + \alpha'^*(0) \alpha'(0)) \right\} \times \\ & \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t \left[\frac{\hbar}{2i} (\alpha^*(t') \dot{\alpha}(t') - \dot{\alpha}^*(t') \alpha(t') - \alpha'^*(t') \dot{\alpha}'(t') + \dot{\alpha}'^*(t') \alpha'(t')) - \mathcal{H}_{field}(\alpha^*(t'), \alpha(t')) - \right. \right. \\ & \left. \left. - \mathcal{H}_{int}(x(t'), \alpha^*(t'), \alpha(t')) + \mathcal{H}_{field}(\alpha'^*(t'), \alpha'(t')) + \mathcal{H}_{int}(x'(t'), \alpha'^*(t'), \alpha'(t')) \right] dt' \right\} \end{aligned} \quad (11)$$

— функционал влияния электромагнитного поля на исследуемую квантовую систему.

Выражение (10) с учетом (11) описывает эволюцию статистической матрицы плотности исследуемой квантовой системы в координатном представлении.

В ряде задач удобно описывать динамику квантовой системы в энергетическом представлении. Статистическая матрица плотности квантовой системы в энергетическом представлении определяется формулой:

$$\rho_{syst}(m, m', t) = \int \varphi_m^*(x_f) \rho_{syst}(x_f, x'_f, t) \varphi_{m'}(x'_f) dx_f dx'_f. \quad (12)$$

Для случая, когда начальное состояние исследуемой квантовой системы — чистое квантовое состояние матрица плотности принимает вид:

$$\rho_{syst}(x_{in}, x'_{in}; t = 0) = \varphi_n^*(x_{in}) \varphi_{n'}(x'_{in}), \quad (13)$$

где в выражениях (12) и (13) $\varphi_{m'}(x'_f)$ — волновая функция квантовых состояний системы.

Учитывая (12) и (13), получаем уравнение эволюции для статистической матрицы плотности в энергетическом представлении:

$$\begin{aligned} \rho_{syst}(m, m', t) = & \\ = & \int \mathcal{D}p(t') \mathcal{D}x(t') \mathcal{D}p'(t') \mathcal{D}x'(t') dx_f dx'_f dx_{in} dx'_{in} \varphi_m^*(x_f) \varphi_{m'}(x'_f) F[x(t'), x'(t')] \times \\ \times & \exp \left\{ \int_0^t \left(\frac{i}{\hbar} (p(t') \dot{x}(t') - \mathcal{H}_{syst}(p(t'), x(t')) - p'(t') \dot{x}'(t') + \mathcal{H}_{syst}(p'(t'), x'(t'))) dt' \right) \right\} \times \\ & \times \varphi_n^*(x_{in}) \varphi_{n'}(x'_{in}). \quad (14) \end{aligned}$$

В выражении (14) диагональные элементы статистической матрицы плотности выражают вероятности соответствующих квантовых состояний, так что из уравнения (14) мы получаем выражения для вероятностей переходов системы $P(m, t|n, 0)$ из состояния n в состояние m :

$$\begin{aligned} P(m, t|n, 0) = & \\ = & \int \mathcal{D}p(t') \mathcal{D}x(t') \mathcal{D}p'(t') \mathcal{D}x'(t') dx_f dx'_f dx_{in} dx'_{in} \varphi_m^*(x_f) \varphi_n(x'_{in}) F[x(t'), x'(t')] \times \\ \times & \exp \left\{ \int_0^t \left(\frac{i}{\hbar} (p(t') \dot{x}(t') - \mathcal{H}_{syst}(p(t'), x(t')) - p'(t') \dot{x}'(t') + \mathcal{H}_{syst}(p'(t'), x'(t'))) dt' \right) \right\} \times \\ & \times \varphi_n^*(x_{in}) \varphi_{n'}(x'_{in}). \quad (15) \end{aligned}$$

Уравнения (10), (14), (15) описывают динамику квантовой системы под действием электромагнитного поля. Примечательно, что они получены вне рамок пертурбативных методов. Для вычисления статистической матрицы в определенный момент времени t и вероятностей переходов необходимо:

- конкретизация исследуемой квантовой подсистемы, а именно задание $\mathcal{H}_{syst}$ в координатном представлении и явного вида волновых функций $\varphi_n(x)$;
- вычисление явного вида функционала влияния F на исследуемую квантовую систему;
- вычисление соответствующих функциональных интегралов.

Заметим, что формулы (10), (14), (15) указывают, что процесс эволюции статистической матрицы плотности системы является процессом с памятью, то есть его принципиально нельзя представить марковским процессом.

4. Явный вид функционала влияния электромагнитного поля

Функционал влияния впервые ввел Фейнман в функциональном методе описания квантовых систем [11]. Фейнман высказал гипотезу, что для широкого класса физических воздействий на квантовую систему функционал влияния имеет квадратичную структуру и представляется выражением:

$$F[x, x'] = \exp \left[- \int_0^t \int_0^{t'} \left(\gamma(t', t'') x(t') x(t'') + \gamma^*(t', t'') x'(t') x'(t'') - \gamma^*(t', t'') x(t') x'(t'') - \gamma(t', t'') x'(t') x(t'') \right) dt' dt'' \right], \quad (16)$$

где функции $\gamma(t, t')$ конкретизируются в зависимости от исследуемой модели.

Вычисление явного вида функционала влияния гармонического осциллятора проводилось в координатном и энергетическом представлениях [11]. Авторами был проведен расчет функционала влияния одномодового электромагнитного поля частоты Ω , представленным выражением (11), в голоморфном представлении. Вычисления привели к квадратичному функционалу влияния (16), где функция $\gamma(t, t')$ имеет вид:

$$\gamma_{\Omega}(t', t'') = \frac{q^2 \Omega}{2\varepsilon_0 V \hbar} e^{-i\Omega(t'-t'')}. \quad (17)$$

В случае, когда электромагнитное поле многомодовое, функционал влияния сохраняет свою квадратичную структуру (11), преобразуется функция $\gamma(t, t')$. Она имеют вид:

$$\gamma_{field}(t', t'') = \sum_{k=0}^{\infty} \gamma_{\Omega_k}(t', t'') = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{q^2 \Omega_k}{2\varepsilon_0 V \hbar} e^{-i\Omega_k(t'-t'')}. \quad (18)$$

5. Приложения к описанию систем

Вычислим на основании формулы (15) зависимость вероятности пребывания квантовой системы на некоем квантовом уровне n от времени в отсутствии электромагнитного поля. Функционал влияния вакуума на систему имеет вид:

$$F_{vac}[x(t'), x'(t')] = \exp \left[- \int_0^t \int_0^{t'} (\gamma_{vac}(t', t'') x(t') x(t'') + \gamma_{vac}^*(t', t'') x'(t') x'(t'')) dt' dt'' \right], \quad (19)$$

где $\gamma_{vac}(t', t'') = \gamma_{field}(t', t'')$, то есть определяется формулой (18).

Подставляя функционал влияния вакуума (19) в выражение для вероятности квантового перехода (15) и проводя интегрирование по траекториям и переменным волновых функций состояния, получим:

$$P_{syst}(n, t) = \exp \left[- \int_0^t \int_0^{t'} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{q^2 \Omega_k}{2\varepsilon_0 V \hbar} |\varphi_{nm}|^2 e^{i(\omega_{nm} - \Omega_k)(t' - t'')} + \sum_{k'=0}^{\infty} \frac{q^2 \Omega_{k'}}{2\varepsilon_0 V \hbar} |\varphi_{nm}|^2 e^{-i(\omega_{nm} - \Omega_{k'})(t' - t'')} \right) dt' dt'' \right], \quad (20)$$

где были приняты обозначения:

$$\varphi_{mn} = \int \varphi_m^*(x) x \varphi_n(x) dx, \quad \omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar},$$

где $P_{syst}(n, t) = P_{syst}(n, t|n, 0)$ — вероятность пребывания системы в квантовом состоянии $\varphi_n(x)$ при условии, что в начальный момент времени квантовая система находилась в состоянии $\varphi_n(x)$ с вероятностью $P_{syst}(n, t=0) = 1$.

Используя приближение Вайскопфа—Вигнера [13] (при $\omega_{nm} = \Omega > 0$), получим:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{q^2 \Omega_k}{2\varepsilon_0 V \hbar} |\varphi_{nm}|^2 e^{i(\omega_{nm} - \Omega_k)(t' - t'')} = \frac{\Gamma}{2} \delta(t' - t''), \quad (21)$$

где

$$\Gamma = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{4\omega_{nm}^3 |\varphi_{mn}|^2}{3\hbar c^3}. \quad (22)$$

При использовании (21), выражение (20) принимает вид:

$$P_{syst}(n, t) = \exp \left[- \int_0^t \int_0^{t'} \left(\frac{\Gamma}{2} \delta(t' - t'') + \frac{\Gamma}{2} \delta(t' - t'') \right) dt' dt'' \right] = \exp[-\Gamma t]. \quad (23)$$

Полученная вероятность (23) обнаружения системы в возбужденном состоянии совпадает с известным выражением, полученным другими методами [13].

Формула (15) для вероятности квантовых переходов легко представляется в виде ряда теории возмущений. Для его построения функционал влияния (16) необходимо разложить в ряд:

$$F[x, x'] = 1 - \int_0^t \int_0^{t'} (x(t') - x'(t')) (\gamma(t', t'') x(t'') + \gamma^*(t', t'') x'(t'')) dt' dt'' + \\ + \frac{1}{2!} \left[- \int_0^t \int_0^{t'} (x(t') - x'(t')) (\gamma(t', t'') x(t'') + \gamma^*(t', t'') x'(t'')) dt' dt'' \right]^2 + \dots \quad (24)$$

Подставляя (24) в выражение (15) для вероятности квантового перехода исследуемой квантовой системы, получим:

$$P(m, t|n, 0) = P^0(m, t|n, 0) + P^I(m, t|n, 0) + P^{II}(m, t|n, 0) + P^{III}(m, t|n, 0) + \dots, \quad (25)$$

где

$$P^N(m, t|n, 0) = \int \varphi_m^*(x_f) \varphi_m(x'_f) \varphi_n(x_{in}) \varphi_n^*(x'_{in}) \times \\ \times \exp \left\{ \int_0^t \left(\frac{i}{\hbar} (p(t') \dot{x}(t') - \mathcal{H}_{syst}(p(t'), x(t')) - p'(t') \dot{x}'(t') + \mathcal{H}_{syst}(p'(t'), x'(t'))) dt' \right) \right\} \times \\ \times \frac{1}{N!} \left[- \int_0^t \int_0^{t'} (x(t') - x'(t')) (\gamma(t', t'') x(t'') + \gamma^*(t', t'') x'(t'')) dt' dt'' \right]^N \times \\ \times \mathcal{D}p(t') \mathcal{D}x(t') \mathcal{D}p'(t') \mathcal{D}x'(t') dx_f dx'_f dx_{in} dx'_{in}.$$

Оставляя первые два слагаемых в (25), получим, как это показано в работе [12] вероятность перехода в единицу времени, которая совпадает с известными правилами Э. Ферми.

Анализ полного ряда теории возмущений (25) показывает, что вероятность квантовых переходов, когда частота поля Ω совпадает с резонансной частотой перехода ω_{mn} , имеет вид:

$$P(m, t|n, 0) = \sin^2(\Omega_R t) + p(\Omega_R, \omega_{mn}, t), \quad (26)$$

где Ω_R — частота Раби.

Первое слагаемое в формуле (19) описывает известные осцилляции Раби [13], второе представляется хаотично осциллирующей функцией, которая возникает как следствие многоуровневости системы. Это слагаемое представляет флуктуации квантовых переходов.

Предложенные выражения для эволюции статистической матрицы плотности (7), (14) приемлемы для описания широкого круга физических процессов в атомах, молекулах и других наноструктурах.

Литература

- [1] Isenor N.R., Merchant V., Hallsworth R.S., Richardson M. C. *CO₂ Laser-Induced Dissociation of SiF₄ Molecules into Electronically Excited Fragments* // Can. J. Phys. — 1973. — 51. — P. 1281-1287.
- [2] Амбарцумян Р.В., Горохов Ю.А., Летохов В.С., Макаров Г.Н., Пурецкий А.А. Исследование механизма изотопически-селективной диссоциации молекул SF₆ излучением CO₂ лазера // ЖЭТФ. — 1976. — 71. — С. 440-453.
- [3] Апатин В.М., Лаптев В.Б., Рябов Е.А. ИК многофотонная диссоциация трихлорсилана под действием импульсного излучения CO₂- и NH₃-лазеров // Квант. электроника. — 2003. — 33(10). — С. 894-896.
- [4] Кошляков П.В., Чесноков Е.Н., Горелик С.Р., Киселев В.Г., Петров А.К. Инфракрасная многофотонная диссоциация метилтрифторсилана // Химическая физика. — 2006. — 25(5). — С. 12-22.
- [5] Карлов Н. В., Прохоров А. М. Лазерное разделение изотопов // УФН. — 1976. — 118. — С. 583-609.
- [6] Lyman J. L., Jensen R. J., Rink J., Robinson C.P., Rockwood S. D. Isotopic enrichment of SF₆ in ³⁴S by multiple absorption of CO₂ laser radiation // Appl. Phys. Lett. — 1975. — 27. — P. 87-89.
- [7] Карлов Н. В., Крынецкий Б. Б., Мишин В. А., Прохоров А. М. Селективная фотоионизация атомов и ее применение для разделения изотопов и спектроскопии // УФН. — 1979. — 127. — С. 593-620.
- [8] Баранов В.Ю., Дядькин А.П., Колесников Ю.А., Котов А.А., Новиков В.П., Пигульский С.В., Разумов А.С., Стародубцев А.И. Особенности диссоциации молекул UF₆ в поле излучения импульсно-периодического CF₄-лазера // Квантовая Электроника. — 1997. — 24(7). — С. 613-616.
- [9] Лоудон Р. Квантовая теория света. — М.: Мир, 1976. — 488 с.
- [10] Славнов А.А., Фаддеев Л.Д. Введение в квантовую теорию калибровочных полей. — М.: Наука, 1978. — 272 с.
- [11] Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. — М.: Мир, 1968. — 382 с.
- [12] Бирюков А.А., Шлеенков М.А. Квантовые переходы многоуровневой системы, взаимодействующей с электромагнитным полем, в представлении функционального интегрирования // Сб. т. VII Всероссийский молодежный Самарский конкурс-конференция научных работ по оптике и лазерной физике. Самара. — 2010.

- [13] Скали М.О., Зубайри М.С. Квантовая оптика. — М.: Физматлит, 2003. — 512 с.
- [14] Пескин М.Е., Шредер Д.В. Введение в квантовую теорию поля. — Ижевск: НИЦ „Регулярная и хаотическая динамика“, 2001. — 784 с.

UDC 538.9

INTERACTION OF TERAHERTZ RADIATION WITH DNA

A. N. Bugay¹

¹Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

bugay_aleksandr@mail.ru

PACS 62.25.Fg, 87.15.ht, 87.15.hp

A nonlinear model of DNA dynamics with coupling between conformational dynamics and proton tunneling is presented. It is demonstrated that terahertz radiation can influence both vibrational excitations and proton motion in DNA hydrogen bonds. The irradiation at the edge of far IR spectral range can promote proton tunneling. If the radiation frequency matches the vibrational mode, the generation of localized excitations in form of dissipative solitons is possible. These solitons decrease the probability of proton tunneling.

Keywords: DNA, terahertz radiation, proton tunneling, dissipative soliton.

1. Introduction

There has been renewed interest in understanding the dynamics and properties of DNA due to recent advances in both single-molecule experiment techniques [1], molecular dynamic simulations [2] and theoretical modeling for such nanosystems [3]. Such modeling played an important step towards nanobiotechnology [4, 5].

It is believed that many biological processes depend on the nonlinear properties of DNA. A number of theoretical studies of nonlinear physics of DNA were related to localized conformational excitations [3] and electronic conductivity [5]. The motion of protons in hydrogen bonds causes a great number of interesting physical effects. The importance of proton tunneling in chemical and biological systems is well known for the DNA base pairing and mutagenesis [6, 7]. The proton can tunnel into less energy favorable tautomer state of base pair, which may cause incorrect pairing during DNA replication. There are a lot of theoretical studies of proton tunneling in such systems [7–9]. An important conclusion from these studies is that the vibrational excitations in conformational subsystem can significantly influence the proton tunneling.

The frequencies of vibrationalrotational transitions of biological molecules and frequencies of intermolecular interactions as well as the frequencies of tunneling transitions fall into terahertz range (0.1-10 THz). It is demonstrated that terahertz radiation can induce conformational changes in proteins and nucleic acids [10], and also can influence the number of spontaneous and induced point mutations [11]. However, the underlying physical mechanisms of this interactions remain unclear. Some theoretical models suggest that collective nonlinear excitations can be responsible for such effects [12].

In the present paper a response of DNA to external terahertz electric field is studied on a basis of nonlinear model taking account of coupling between elastic vibrational dynamics and proton tunneling.

2. Theoretical model

Let us consider the self-consistent model of conformational and proton dynamics. A movement of the proton can be considered inside the asymmetric two-well potential per each hydrogen bond, as was initially proposed by Löwdin [6]. In conditions of terahertz excitation one can neglect the upper proton states considering only ground states in the right and left wells.

In this case it is useful to consider the tunneling dynamics within the framework of pseudospin formalism [13]. The corresponding proton Hamiltonian $\hat{H}_p$ can be represented as:

$$\hat{H}_p = -\Omega_0 \sum_{n,i} \hat{S}_{n,i}^x - \Delta \sum_{n,i} (-1)^{i+1} \hat{S}_{n,i}^z - \frac{1}{2} J_{\perp} \sum_{n,i \neq j} \hat{S}_{n,i}^z \hat{S}_{n,j}^z - \frac{1}{2} \sum_{n,i,j} J_{ij} (\hat{S}_{n+1,i}^z \hat{S}_{n,j}^z + \hat{S}_{n-1,i}^z \hat{S}_{n,j}^z), \quad (1)$$

where indexes 'n' correspond to n-th base pair and indexes i, j denote the number of hydrogen bonds in a base pair (from 2 in Adenine/Thymine to 3 in Guanine/Cytosine). Here pseudospin operators $\hat{S}^z$ and $\hat{S}^x$ have the sense of the electrical dipole moment operator and the tunneling operator, respectively, Ω_0 is the tunneling integral, $J_{\perp}$ and J_{ij} are the exchange integrals, and Δ is the asymmetry parameter of the potential well.

The conformational subsystem can be treated classically [3] since it corresponds to collective movements of large groups of atoms. The Hamiltonian is taken as in a well-known Peyrard-Bishop-Dauxois model (PBD) [14]

$$H_c = \sum_n \left[\frac{m}{2} \dot{r}_n^2 + \frac{K}{2} (r_{n+1} - r_n)^2 + D_n (e^{-\beta r_n} - 1)^2 \right], \quad (2)$$

where r_n is the relative displacement (stretching) of base pairs inside the nucleotide, m is the reduced mass of the nucleotide, coefficient K characterizes the stacking interaction, and parameters D and β define the potential depth and width.

The interaction of proton subsystem with vibrations and terahertz electric field E is taken into account by interaction operator

$$\hat{H}_{int} = -\mu E \sum_{n,i} \hat{S}_{n,i}^z - g \sum_{n,i} r_n (\hat{S}_{n,i}^z - \bar{S}_{n,i}^z) - \sum_{n,i} \Omega_1 (\hat{S}_{n,i}^x - \bar{S}_{n,i}^x), \quad (3)$$

where μ is the dipole moment, and g is proportional to the linear piezoeffect coefficient, $\bar{S}^z$ and $\bar{S}^x$ are the equilibrium mean values of the pseudospin operators. The last sum corresponds to modulation of tunneling integral and can be approximated as $\Omega_1 = \Omega_0 (\exp(-\sigma r_n^2/2) - 1)$, where σ is the material constant which is reversely proportional to the De Boer parameter of proton in DNA.

The Heisenberg equations of motion for the mean values of the pseudospin operators supplemented by phenomenological relaxation terms in the random-phase approximation have the form:

$$\hbar \frac{dS_{n,i}^x}{dt} = M_{n,i}^z S_{n,i}^y - (S_{n,i}^x - \bar{S}_{n,i}^x) \left(\frac{\cos \alpha}{T_1^*} + \frac{\sin \alpha}{T_2^*} \right), \quad (4)$$

$$\hbar \frac{dS_{n,i}^y}{dt} = -M_{n,i}^z S_{n,i}^x + M_{n,i}^x S_{n,i}^z - S_{n,i}^y / T_2^*, \quad (5)$$

$$\hbar \frac{dS_{n,i}^z}{dt} = -M_{n,i}^x S_{n,i}^y - (S_{n,i}^z - \bar{S}_{n,i}^z) \left(\frac{\cos \alpha}{T_2^*} + \frac{\sin \alpha}{T_1^*} \right), \quad (6)$$

where

$$M_{n,i}^{x,z} = -\frac{\partial(H_p + H_{int})}{\partial S_{n,i}^{x,z}}, \quad \tan \alpha = \bar{S}_{n,i}^z / \bar{S}_{n,i}^x,$$

T_1^*, T_2^* are the longitudinal and transverse relaxation times of pseudospins, and the equilibrium mean values of the pseudospin operators $\bar{S}^z$ and $\bar{S}^x$ are defined through the molecular field components:

$$\bar{S}_{n,i}^{x,z} = \frac{\bar{M}_{n,i}^{x,z}}{2M_{n,i}} \tanh \frac{M_{n,i}}{2k_b T}, \quad \bar{M}_{n,i}^{x,z} = -\frac{\partial H_p}{\partial S_{n,i}^{x,z}}, \quad M_{n,i} = \sqrt{(\bar{M}_{n,i}^x)^2 + (\bar{M}_{n,i}^z)^2}.$$

The equations for the conformational subsystem under conditions of low-amplitude vibrations have the following form:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 r_n}{dt^2} - \frac{K}{m}(r_{n+1} + r_{n-1} - 2r_n) + \omega_a^2 r_n - \frac{3}{2}\beta\omega_a^2 r_n^2 + \frac{7}{6}\beta^2\omega_a^2 r_n^3 = \\ = \frac{g}{m} \sum_i (S_{n,i}^z - \bar{S}_{n,i}^z) + \frac{2\sigma}{m} r_n \sum_i (S_{n,i}^x - \bar{S}_{n,i}^x) - \gamma_R \frac{dr_n}{dt} + \frac{\chi E^2}{8\pi m} r_n, \end{aligned} \quad (7)$$

Additionally the external damping term (with damping constant γ_R) and Maxwell-Helmholtz pressure term are taken into account. The last one arises from the uncompensated difference in dielectric permittivity between disturbance in DNA and surrounding medium (water). The equations (4)-(7) describe the self-consistent dynamics of proton and conformational systems under the action of external terahertz electric field.

3. Parametric excitation of conformational solitons and their influence on proton dynamics

The response of the system (4)-(7) posses high frequency modes, which correspond to tunneling transitions. Unlike the typical hydrogen-bonded crystals, in DNA the tunneling integral is much smaller than asymmetry parameter of potential. This gives relatively small probability for finding the proton in the tautomer positions $P_0^* \sim 10^{-4}$. The tunneling frequencies are determined mostly by the asymmetry parameter Δ , and their values are at the order of 10 – 20THz [9]. The slow conformational subsystem cannot follow such excitations, therefore the increase of tunneling probability into tautomer state occurs under irradiation. This simple conclusion is supported by experiments, where the increase of point mutations have been observed after irradiation in the far IR spectral range [11]. The exact expression for response of the system can be calculated in a usual form [13].

The excitation of conformational subsystem with low frequency (optical phonon mode) requires special consideration. Its characteristic frequency (taken at the center of Brillouin zone) is $\omega_a = \sqrt{2D\beta^2/m} \sim 2 - 3$ THz [8, 12].

Since the conformational system is much slower, the response of proton subsystem can be calculated using the approximation of adiabatic following [15, 16]. In general case we obtain an expansion

$$S_{n,i}^z = \bar{S}_{n,i}^z + (s_{n,i}^{(1)} + s_{n,i}^{(11)} r_n + s_{n,i}^{(12)} r_n^2 + \dots)E + (s_{n,i}^{(2)} + s_{n,i}^{(21)} r_n + s_{n,i}^{(22)} r_n^2 + \dots)E^2 + \dots \quad (8)$$

The calculation of probability for finding the proton in the tautomer state of base pair A-T or G-C in the leading order gives:

$$P^* = P_0^* - \chi_{i,n}^{(1)} r_n^2 + \chi_{i,n}^{(2)} E^2 + \chi_{i,n}^{(12)} r_n E + \dots \quad (9)$$

The second term is produced by the modulation of the tunneling integral, while the others result from the tunneling far from the resonant frequency. Thus, there are competing effects, which depend on conformational disturbance.

Let us consider small amplitude oscillations in conformational subsystem. The solution in a semidiscrete approximation can be cast as

$$r = r_{(0)}(\zeta - vt) \exp[i(\omega_a(q)t - qn)] + c.c. + r_{(1)}(\zeta - vt) + r_{(2)}(\zeta - vt) \exp[2i(\omega_a(q)t - qn)] + c.c. + \dots, \quad (10)$$

where $\vec{q}$ is the reciprocal lattice vector, ζ is the coordinate along the DNA axis. Since the characteristic size of DNA is much lower than terahertz wavelength, the expression for the external electric field with frequency ω takes form $E = E_0 \exp[i\omega t] + c.c.$. Therefore the resonance is possible for the nearly standing excitation ($q \approx 0$).

The resulting equation for the slowly varying amplitudes in the dimensionless form can be written as

$$2i\frac{\partial\psi}{\partial\tau} - \frac{\partial^2\psi}{\partial\xi^2} - |\psi|^2\psi = -i\gamma\psi + \varepsilon\psi^*e^{-2i\varepsilon\tau}, \quad (11)$$

where $\psi = (2\beta)^{-1}\beta_sr_{(0)}\exp(2i\varepsilon\tau)$, β_s -denotes the modulation of nonlinear coefficient by the proton response, $\tau = \omega_at$, $\xi = \zeta/L_0$, $L_0 = (\omega_a/a)\sqrt{2m/K}$ is the characteristic spatial scale, a is the base spacing in DNA, $\gamma = \gamma_R/\omega_a$. The main influence of external field is given by ponderomotive force, therefore $\varepsilon \approx a\chi E_0^2/(8\pi m\omega_a^2)$.

The approximate solution of (11) can be found in form of perturbed soliton of nonlinear Schrödinger equation locked to the external frequency [17]

$$\psi = 2\sqrt{2}i\eta \operatorname{sech}(\eta\xi)e^{-i\Phi}, \quad (12)$$

$$\Phi = 2\varepsilon\tau + \arccos\left(\frac{2\gamma}{\varepsilon}\right)/2 - \pi/2, \quad \eta^2 = 2\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2/4 - \gamma^2},$$

This solution has the only free parameter ε , which correspond to external parametric pumping by terahertz electric field. Therefore the solution (12) has a sense of dissipative soliton. We should note that parametrically driven solitons of equation (11) can form complexes [18] or transfer to periodic or quasiperiodic structures.

The structure of (12) requires $\varepsilon > 2\gamma$, that gives a threshold for excitation depending on the terahertz field intensity. Taking $\gamma \sim 10^9\text{s}^{-1}$, we can make an estimation of threshold intensity $I_{thr} \sim 10 - 100 \text{ mW/cm}^2$. This estimation agrees reasonably with experimentally observed effects of change in DNA conformation and function [10, 11, 19]. An experimental observation in the neuron system [20] gives even lower threshold values $\sim 1 \text{ mW/cm}^2$.

After substitution of characteristic values of induced deformation from (12) to (9) we obtain $(\tilde{\chi}_{i,n}^{(1)} - \chi_{i,n}^{(2)} - \tilde{\chi}_{i,n}^{(12)})E_0^2 > 0$, thus the localized deformation decreases the probability of tautomer shift. This is confirmed by the experimental observations [11].

4. Conclusion

On the basis on simple nonlinear model of DNA dynamics it is demonstrated that terahertz radiation can influence both vibrational excitations and proton motion in DNA hydrogen bonds. It is highlighted that irradiation at the edge of far IR spectral range can promote proton tunneling and thus make the tautomer states of DNA base pairs to be more probable. If the irradiation frequency matches the vibrational mode, the parametric generation of localized excitations is possible. These dissipative solitons decrease the probability of tautomer shift due to modulation of the tunneling integral.

This preliminary theoretical results can qualitatively explain the results of experimental observations of terahertz influence on the number of spontaneous and induced point mutations [11]. The low-amplitude DNA collective breathing modes can serve as precursors to generation of the transcription bubbles and other large-scale conformational changes such as B-Z transition. This may relate to experimental observations of DNA conformation change [10] and gene transcription [19] in the presence of terahertz field. However, the precise mechanisms of these effects are too complex and require further experimental and theoretical studies of such nanosystems.

The work was conducted under the financial support of the Russian Foundation for Basic Research (grant No.09-02-00503a) and the Dynasty Foundation.

References

- [1] Kumar S., Li M.S. Biomolecules under mechanical force // *Physics Reports*. — 2010. — 486. — 1-74.
- [2] Knotts T.A., Ratore N., Shwartz D.C., de Pable J.J. A coarse grain model for DNA // *The Journal of Chemical Physics*. — 2007. — 126. — 084901.
- [3] Yakushevich L.V. *Nonlinear Physics of DNA*. — Wiley-VCH, 2004.
- [4] Niemeyer C.M., Mirkin C.A. (Eds.). *Nanobiotechnology. Concepts, Applications and Perspectives*. — Wiley-VCH, 2004.
- [5] Wagenknecht H.-A. (Ed.) *Charge Transfer in DNA. From Mechanism to Application*. — Wiley-VCH, 2004.
- [6] Löwdin P.-O. Proton tunneling in DNA and its biological implications // *Reviews of Modern Physics*. — 1963. — 35(3). — 724-732.
- [7] Grebneva H.A. A Model for Targeted Substitution Mutagenesis During SOS Replication of Double-Stranded DNA Containing cis-syn Cyclobutane Thymine Dimers // *Environmental and Molecular Mutagenesis*. — 2006. — 47. — 733-745.
- [8] Tolpygo K.B., Grebneva H.A. Effect of the state of h-b-1 hydrogen bond of the character of some atom vibrations in guaninecytosine pair of the DNA molecule. // *Int J Quantum Chem*. — 1996. — 57. — 219-227.
- [9] Villani G. A time-dependent quantum dynamics investigation of the guanine-cytosine system: A six-dimensional model // *The Journal of Chemical Physics*. — 2008. — 128. — 114306.
- [10] Fedorov V.I. et al. Study of biological effects of electromagnetic radiation of submillimeter part of terahertz range. // *Biomeditsinskaya Radioelektronika*, 2011.
- [11] Fedorov V.I. et al. Comparative study of the effects of infrared, submillimeter, and millimeter EM radiation // *Biophysics*. — 2001. — 46(2). — 293-297.
- [12] Alexandrov B.S., et al. DNA breathing dynamics in the presence of a terahertz field // *Physics Letters A*, 2010. — 374(10). — 12141217.
- [13] R. Blinc and B. Zeks, *Soft Modes in Ferroelectrics and Antiferroelectrics*. — Amsterdam: North-Holland, 1975.
- [14] Dauxois T., Peyrard M., Bishop A.R. Entropy-driven DNA denaturation // *Phys. Rev. E*. — 1993. — 47. — R44.
- [15] Sazonov S.V., Electromagnetic videosolitons and breathers in the KDP-type ferroelectric // *Physics of the Solid State*. — 1995. — 37(6). — 1612-1622.
- [16] Belonenko M.B., Nazarenko S.V. Microscopic theory of the electro-acoustic echo in order-disorder antiferroelectrics // *Physics of the Solid State*. — 1998. — 40(1). — 105-108.
- [17] Gronbech-Jensen N., Kivshar Yu. S., Samuelsen M.R. Stabilization of breathers in parametrically driven sine-Gordon system// *Phys. Rev. B*. — 1991. — 43(7). — 5698.
- [18] Barashenkov I.V., Zemlyanaya E.V. Stable Complexes of Parametrically Driven, Damped Nonlinear Schrödinger Solitons// *Phys. Rev. Lett*. — 1999. — 83. — 25682571.
- [19] Bock J., et al. Mammalian stem cells reprogramming in response to Terahertz Radiation // *PLoS Biol*, 2010. — 5(12). — e15806.
- [20] Ratushnyak A.S. et al. Influence of submillimeter range electromagnetic radiation on neuron systems // *The Third International Symposium on Modern Problems of Laser Physics*, Novosibirsk, 2000. — 177.

ПЛОТНОСТЬ ФОТОННЫХ СОСТОЯНИЙ В ОПТИЧЕСКИХ НАНОМАТЕРИАЛАХ И УПРАВЛЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМИ УРОВНЯМИ АТОМОВ

Р. Х. Гайнутдинов¹, М. А. Хамадеев¹, Е. В. Зайцева¹, М. Х. Салахов¹

¹Казанский университет, Казань, Россия

Renat.Gainutdinov@ksu.ru

Обсуждается влияние среды оптических наноматериалов на характер взаимодействия атомов с собственным полем излучения на примере фотонных кристаллов. В работе показано, что такое влияние может приводить к изменению энергетических уровней атомов, помещенных в периодические диэлектрические среды нанометрового размера.

Ключевые слова: плотность состояний, фотонные кристаллы, сдвиг энергетических уровней.

1. Введение

Развитие современной физики уже кажется немислимым без прогресса в области создания наноматериалов. На сегодняшний день для изучения представлен огромный их класс. Принципиальной новизной является то, что создание структур в нанометровом масштабе позволило выйти за рамки привычной физики, которая до этого ограничивалась лишь объемными материалами. В данном контексте особый интерес представляет исследование фотонных кристаллов. Фотонные кристаллы — это материалы, структура которых характеризуется периодическим изменением показателя преломления (период составляет порядка нескольких сотен нанометров) в пространственных направлениях [1,2]. Их важной особенностью является то, что такая периодичность приводит к отличию дисперсионных соотношений для фотона от случая вакуума и, как следствие, к возникновению зонной структуры с фотонными запрещенными зонами. Под дисперсионными соотношениями понимается зависимость частоты фотона от его волнового вектора. Хорошо известно, что дисперсионные соотношения тесно связаны с функцией плотности электромагнитных состояний, и, благодаря наличию фотонных запрещенных зон, она имеет сложный вид и испытывает резкий скачок на границах запрещенных зон в фотонных кристаллах. Это открывает дорогу к исследованию таких новых оптических эффектов как фотон-атомное связанное состояние [2], спектральное расщепление линий [3] или когерентный контроль за спонтанным излучением [4]. В данной работе показано, что среда фотонных кристаллов существенно влияет на характер взаимодействия атомных электронов с собственным полем излучения, и это приводит к тому, что при таких условиях происходит дополнительный сдвиг энергетических уровней нового типа, который не сводится к обычному лэмбовскому сдвигу.

2. Плотность электромагнитных состояний

Важной характеристикой излучения является функция локальной плотности электромагнитных состояний (local density of states, LDOS), которая является главной величиной, определяющей динамику излучения в структурированной диэлектрической среде [5,6]. Понятие трехмерной функции локальной плотности состояний применимо к реальным излучателям, таким, как атомы и квантовые точки, в то время как двумерная функция

локальной плотности состояний применима к случаю линейного протяженного источника. Локальная плотность состояний определяется как [7]

$$N(\mathbf{r}, \omega) = \sum_n \int_{BZ} d^3k |E_{n,k}(\mathbf{r})|^2 \delta(\omega - \omega_n(\mathbf{k})), \quad (1)$$

где $E_{n,k}(\mathbf{r})$ — функция Блоха для волнового вектора Блоха $\mathbf{k}$ на n -ой зонной поверхности, нормированная на единичный объем, $E_{n,k}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} E_{n,k}(\mathbf{g}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{g})\cdot\mathbf{r}}$, $\mathbf{g}$ — вектора обратной решетки. Поведение фотонов в фотонном кристалле будет подчинено уравнениям для соответствующих квантовополевых операторов. Однако известно, что эти уравнения эквивалентны классическим уравнениям Максвелла. Поэтому можно использовать решение классической задачи, трактуя его как волновую функцию фотона в фотонном кристалле. Функция $N(\mathbf{r}, \omega)$ описывает модовый состав излучения в отдельной точке.

В физике твердого тела чаще используется пространственно независимая функция плотности состояний, в то время как по отношению к фотонным кристаллам она применима лишь при описании ограниченного числа экспериментов, в которых атомы, помещенные в фотонный кристалл, распределены равномерно по элементарной ячейке. Однако плотность состояний более тесно связана с зонной структурой периодической среды, чем локальная плотность состояний [8], поэтому она полезна при теоретическом описании процессов в фотонных кристаллах.

Функция плотности состояний определяется следующим образом:

$$N(\omega) = \sum_n \int_{BZ} d^3k \delta(\omega - \omega_n(\mathbf{k})) \quad (2)$$

Функция плотности состояний и функция локальной плотности состояний связаны между собой как

$$N(\omega) = \int_u d^3r n^2(\mathbf{r}) N(\mathbf{r}, \omega) \quad (3)$$

Из формулы (2) видно, что в зависимости от изменения $\omega(\mathbf{k})$ функция $N(\omega)$ также будет сильно меняться при различных значениях частоты. А это значит, что управляя параметрами фотонного кристалла, можно изменять и формировать плотность состояний. Стоит отметить, что $N(\mathbf{r}, \omega)$ и $N(\omega)$, как правило, задаются для каждой из двух возможных поляризаций (обычно рассматривают ТЕ и ТМ поляризации) отдельно.

Понятие плотности состояний играет важнейшую роль в описании свойств излучения в фотонном кристалле. С провалами в плотности состояний связаны такие интересные эффекты как подавление спонтанного излучения, сильная локализация фотона, немарковость в фотон-атомном взаимодействии и разнообразные коллективные эффекты. Спектры пропускания и поглощения света через фотонные кристаллы не могут дать нам детальную информацию о дисперсионных соотношениях. Однако они имеют тесную связь с числом состояний, для которых разрешено распространение в выбранном направлении. Интегрирование этого числа по всем направлениям для выбранного образца даст нам полную плотность состояний. Когда же речь заходит об экспериментах, связанных с квантовой электродинамикой (КЭД) в фотонных кристаллах, таких, например, как измерение спонтанного излучения или лэмбовского сдвига, нам необходимо учитывать месторасположение излучателя в ячейке. От выбора того, в каком именно месте ячейки следует поместить атом, молекулу или квантовую точку, может зависеть успех эксперимента. Специфика такой пространственной зависимости взаимодействия отражается в локальной плотности состояний.

В общем случае функция плотности состояний может выглядеть достаточно сложно. Однако всегда, когда фотонный кристалл обладает запрещенной зоной, соответствующая

плотность состояний будет иметь провал. Наиболее простой моделью функции плотности состояний, используемой в литературе, является изотропная модель [1, 2, 3, 9]. Ее суть состоит в том, что в дисперсионных соотношениях фотона пренебрегается зависимостью от углов. В результате задача из трехмерной становится одномерной. В случае изотропной модели дисперсионные соотношения фотона выбираются следующим образом [1]:

$$4n \cos(kL) = (1+n)^2 \cos((2na+b)\omega_k) - (1-n)^2 \cos((2na-b)\omega_k) \quad (4)$$

где n — показатель преломления одного из слоев фотонного кристалла с толщиной $2a$, в качестве второго слоя выбирается воздух с $n_{air} = 1$, $L = 2a + b$ — постоянная решетки. Здесь и далее используется естественная система единиц, в которой $\hbar = c = 1$. Выражение для плотности состояний в изотропном случае будет выглядеть следующим образом

$$N(\omega) = 2 \sum_n \int k^2 dk \delta(\omega - \omega_{kn}) = \frac{2\omega^2}{d\omega/dk} \quad (5)$$

Зная состояния фотонов в фотонном кристалле, можно описывать процессы взаимодействия связанных и свободных электронов с собственным полем излучения. Дело в том, что при описании спектров излучения атомов в фотонных кристаллах это играет существенную роль. Такие процессы, которые, в частности, приводят к лэмбовскому сдвигу спектральных линий атомов, должны быть очень существенными при частотах виртуальных фотонов в области запрещенной зоны из-за пленения излучения соответствующей частоты. Однако при описании процессов взаимодействия атомов с собственным полем излучения необходимо учитывать вклады всех виртуальных фотонов. При этом мы сталкиваемся с обычной проблемой КЭД: мы не можем ограничиться конечной областью частот и, более того, вклад от процессов с участием виртуальных фотонов с произвольно большими частотами является бесконечным. Это так называемые ультрафиолетовые расходимости. В КЭД эта проблема решается с помощью перенормировки, в результате которой интегралы по импульсам становятся конечными. Это означает, что перенормировка подавляет вклады от виртуальных фотонов с энергиями ω больше некоторой характерной энергии. Физически это соответствует тому, что бесконечные величины включаются в перенормировку массы и прибавляются к затравочной массе m_0 , а наблюдению подлежит только сумма этих двух вкладов.

3. Квантовая электродинамика связанных состояний

Проиллюстрируем принцип перенормировки на задаче о лэмбовском сдвиге. В лидирующем порядке теории возмущения сдвиг энергии атома в вакууме будет определяться вкладом от диаграммы, на которой электрон испускает и поглощает виртуальный фотон. Однако выражение, соответствующее данной диаграмме, расходится. Чтобы обойти эту трудность, принято разделять его на две части

$$\Delta E_n = \Delta E_n^< + \Delta E_n^> \quad (6)$$

где $\Delta E_n^>$ и $\Delta E_n^<$ — высоко- и низкоэнергетические части лэмбовского сдвига. Параметр разделения должен удовлетворять следующим условиям $(Z\alpha)^2 m_e \ll k_{\min} \ll (Z\alpha) m_e$. Согласно второму порядку теории возмущений низкоэнергетическая часть сдвига энергии, обусловленная тем, что электрон в состоянии n испустит и вновь поглотит фотон, равна

$$\Delta E_n^< = e^2 \int_0^{k_{\min}} \frac{d^3 k}{2k(2\pi)^3} \sum_{m,\epsilon} \frac{\langle n | \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\epsilon} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | m \rangle \langle m | \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\epsilon} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} | n \rangle}{E_n - k - E_m} \quad (7)$$

где суммирование проводится по поперечным поляризациям фотона и по всем электронным состояниям. Воспользуемся далее дипольным приближением. Электронные состояния являются нерелятивистскими, поэтому α можно заменить на $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$. Тогда, можно провести интегрирование по $\mathbf{k}$, которое дает

$$\Delta E_n^< = \frac{2\alpha}{3} \left[-k_{\min} \langle n | \mathbf{v}^2 | n \rangle + \sum_m \frac{E_m - E_n}{m^2} \ln \frac{|E_m - E_n + k_{\min}|}{|E_m - E_n|} |\langle n | \mathbf{p}^2 | m \rangle|^2 \right] \quad (8)$$

Теперь для этой части вычислений необходимо провести перенормировку массы. Поскольку электромагнитная масса электрона δm уже содержится в его экспериментальной массе m , в гамильтониане появится массовый контрчлен вида

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2(m - \delta m)} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \approx \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{p}}{m} \right)^2 \delta m \quad (9)$$

Он приводит к сдвигу энергии

$$\delta E_n = \frac{1}{2} \delta m \langle n | \mathbf{v}^2 | n \rangle \quad (10)$$

который имеет ту же структуру, что и первый член в (8). Поэтому последний включается в перенормировку массы. Учитывая, что $k_{\min} \gg E_n - E_m$, для нерелятивистской части лэмбовского сдвига получаем

$$\Delta E_n^< = \frac{2\alpha}{3m_e^2} \sum_m (E_m - E_n) \ln \frac{k_{\min}}{|E_m - E_n|} |\langle n | \mathbf{p}^2 | m \rangle|^2 \quad (11)$$

Зависимость от $k_{\min}$ компенсируется аналогичной зависимостью в высокоэнергетической части $\Delta E_n^>$. В результате лэмбовский сдвиг определяется формулой

$$\Delta E_n = \frac{4\alpha(Z\alpha)^4}{3\pi n^3} \left(\ln \frac{m_e}{2\bar{E}} + \frac{11}{24} - \frac{1}{5} \right) m_e \quad (12)$$

где $\bar{E}$ — константа, впервые вычисленная Бете [10]. С большой точностью данный результат совпадает с лэмбовским сдвигом, полученным Бете подстановкой $k_{\min} = m_e$ в качестве параметра обрезания в выражение для низкоэнергетической части $\Delta E_n^<$.

Точно такой же прием используется для расчетов лэмбовского сдвига в случае атомов, помещенных в фотонный кристалл [1,2,5,11]. В качестве обоснования авторы всех работ ссылаются на аргументы Бете о том, что при энергиях фотона больших, чем масса электрона, он перестает взаимодействовать с релятивистской структурой электронного волнового пакета. Это подстановка является формальным приемом и не имеет физического смысла. Использование этого приема в фотонных кристаллах приводит к неправильным результатам. При вычислении лэмбовского сдвига логарифмическая расходимость в низкоэнергетической части не полностью компенсируется соответствующей расходимостью в высокоэнергетической части. Кроме того, массовый контрчлен в стандартном гамильтониане, который в случае атомов в вакууме компенсирует часть лэмбовского сдвига, описывающую вклад в массу электрона, не делает этого в случае атомов в фотонном кристалле. Поэтому остается член, который имеет ту же структуру, что и собственно-энергетический вклад

$$\delta E_{pc} = -\frac{\alpha}{6\pi^2} \int_0^\infty d^3k \left(\frac{1}{\omega^2(\mathbf{k})} - \frac{1}{k^2} \right) \langle n | \mathbf{v}^2 | n \rangle \quad (13)$$

4. Собственно-энергетический сдвиг энергетических уровней атомов, помещенных в фотонные кристаллы

Поправка к сдвигу энергетических уровней, вносимая фотоннокристаллическим окружением атома благодаря нетривиальным дисперсионным соотношениям, описывается выражением (13). Однако следует помнить, что дисперсионные соотношения являются сложной многолистной функцией комплексной переменной. Именно мнимая компонента волнового вектора подавляет распространение света и формирует связанное состояние фотона с излучающим атомом. Кроме того, необходимо помнить, что в периодических диэлектрических средах волновые функции фотонов имеют блоховскую структуру, что не учитывается в (13). Чтобы исправить этот недостаток, необходимо описать собственную энергию электрона в фотонном кристалле на языке блоховских функций. Используя их, для электрона с импульсом $\mathbf{p}$ можно записать

$$\Delta E_{pc} = \langle \mathbf{p} | H_I G_0 H_I | \mathbf{p} \rangle = \sum_{\mathbf{g}} \sum_{kn} \frac{\langle \mathbf{p} | H_I | \mathbf{p} - \mathbf{k} - \mathbf{g}, kn \rangle \langle \mathbf{p} - \mathbf{k} - \mathbf{g}, kn | H_I | \mathbf{p} \rangle}{\mathbf{p}^2/2m - \{(\mathbf{p} - \mathbf{k} - \mathbf{g})^2/2m + \omega_n(\mathbf{k})\}} \quad (14)$$

Здесь H_I — оператор взаимодействия в базисе блоховских состояний [9]

$$H_I = -\frac{e}{m} \sum_{kn} \sqrt{\frac{1}{2V\omega_n(\mathbf{k})}} \{a_{kn} E_{kn}(\mathbf{r}_e) + a_{kn}^+ E_{kn}^*(\mathbf{r}_e)\} \cdot \mathbf{p} \quad (15)$$

где V — объем образца. Следует отметить, что благодаря периодичности фотонного кристалла, оператор H_I обладает ненулевыми матричными элементами при всех $\mathbf{g}$. Однако, при увеличении $\mathbf{g}$ матричные элементы убывают очень быстро [9]. В связи с этим, для грубой оценки эффекта возможно пренебречь членами с $\mathbf{g} \neq 0$. В нерелятивистском пределе справедливо

$$\Delta E_{pc} \approx -\frac{\alpha^2}{2m^2V} \sum_{kn} \frac{|\overline{E_{kn}(\mathbf{r}_e) \cdot \mathbf{p}}|^2}{\omega_n^2(\mathbf{k})} \quad (16)$$

где надчеркивание обозначает матричный элемент от соответствующих состояний. Используя выражение (1) и учитывая, что импульс электрона ориентирован в пространстве случайным образом, мы можем в формуле (16) перейти к локальной плотности состояний, а затем провести усреднение по положению атома в ячейке Вигнера-Зейца, и вместо функции локальной плотности состояний можно использовать плотность состояний $N(\omega)$. Разумеется, это усреднение не точное, но оно позволяет оценить порядок исследуемого эффекта. Тогда выражения (16) может быть переписано в виде

$$\Delta E_{pc} \approx -\frac{p^2 \alpha^2}{6m^2} \int d\omega \frac{N(\omega)}{\omega^2} \quad (17)$$

Вычитая из (17) аналогичный вклад в собственную энергию электрона в вакууме, мы получим поправку к энергетическим уровням нового типа, которая не сводится к обычному лэмбовскому сдвигу.

$$\delta E_{pc} = \Delta E_{pc} - \Delta E_{vac}. \quad (18)$$

Для того чтобы оценить предсказываемый эффект, рассмотрим простую модель фотонного кристалла с изотропными дисперсионными соотношениями (4) и соответствующей плотностью состояний (5). Несмотря на простоту такой модели, она позволяет легко понять суть эффекта. При интегрировании в (18) мы сталкиваемся с линейной расходимостью. Это легко проследить с помощью выражения (13). Интеграл в этом выражении линейно расходится, так как второй член в (13) расходится как $k \cdot 2\alpha^3/3\pi$, а первый как $kn_{eff}^2 \cdot 2\alpha^3/3\pi$, где n_{eff} — это показатель преломления эффективной однородной среды, соответствующей

фотонному кристаллу. Однако если учесть, что при больших энергиях фотона n_{eff} будет близок к единице, это приведет к сходимости в выражении (18).

Зависимость показателя преломления от энергии фотона называется дисперсией. В литературе принято учитывать этот факт простым обрезанием дисперсионной зависимости при определенных энергиях фотона [8,11]. В качестве обоснования авторы всех работ констатируют тот факт, что мы должны ограничиться только оптическим диапазоном. Разумеется, точной границы не существует, поэтому принято выбирать некий характерный параметр обрезания, служащий такой условной границей. Однако разные авторы выбирают этот параметр по-разному. Так, например, авторы работы [8] выбрали его равным $2\pi/L$, в то время как в работе [11] он равен $3.5 \cdot 2\pi/L$. Чтобы быть более последовательными в рассуждениях обратим внимание на дисперсию реальных материалов. Закон дисперсии для каждого вещества уникален и, как правило, выглядит достаточно сложно, рисунок 1а.

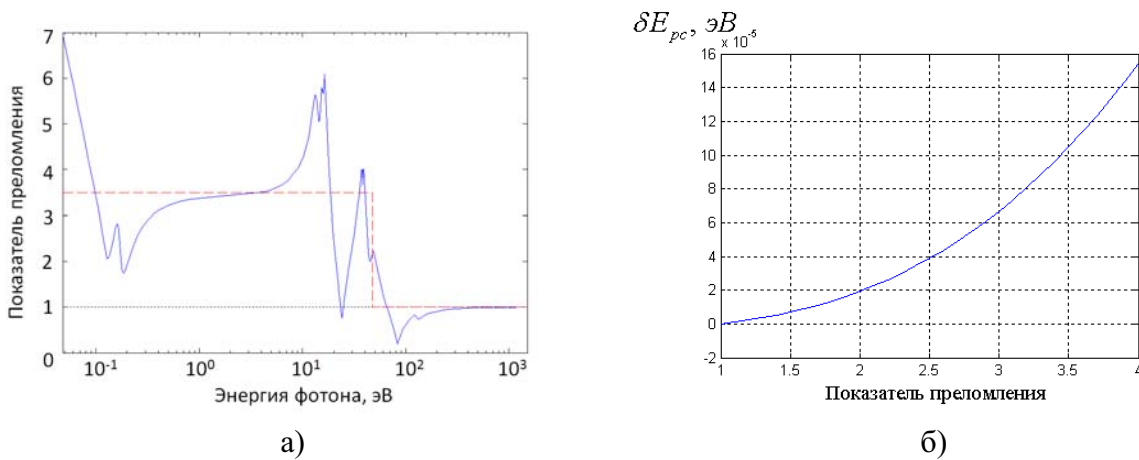


РИС. 1. а) Зависимость показателя преломления арсенида галлия от энергии фотона. Пунктиром показана ступенчатая функция (19); б) Зависимость рассчитанной поправки к энергии уровня $1S$ атома водорода от показателя преломления материала, из которого изготовлен фотонный кристалл (второй средой является воздух).

Для того чтобы оценить исследуемый эффект, мы также ограничимся грубым приближением, при котором дисперсия среды моделируется ступенчатой функцией,

$$n(\omega) = \begin{cases} n_0, & \omega < \Lambda \\ 1, & \omega \geq \Lambda \end{cases} \quad (19)$$

где n_0 — это характерный показатель преломления материала в оптической области, Λ — это параметр обрезания, определяющий ту энергетическую границу, за которой взаимодействием фотонов со средой можно пренебречь. Очевидно, что собственно-энергетические поправки к энергиям уровней будут тем больше, чем больше будет оптический контраст фотонного кристалла, то есть отношение большего показателя преломления к меньшему. Самым оптимальным в данном случае будет оставлять полости фотонного кристалла пустыми, а материал выбирать с наибольшей оптической плотностью. Поэтому расчеты были проведены нами для фотонного кристалла на основе арсенида галлия (GaAs). Этот материал известен тем, что имеет относительно большой показатель преломления в оптическом диапазоне ($n_0 = 3.5$). Параметр Λ для GaAs исходя из графиков на рисунке 1а равен 47.8 эВ.

Для фотонного кристалла с параметрами ячейки $L = 2a + b = 100$ нм и $a = 46$ нм была получена новая поправка к энергетическим уровням атомов, которая не имеет место

в атомах в свободном пространстве. Для атома водорода в состоянии $1S$, помещенного в фотонный кристалл, она составила $1.05 \cdot 10^{-4}$ эВ.

Обнаруженный эффект может иметь большое практическое применение в свете прогресса в области управления свойствами материалов, достигнутого в последнее время, с помощью разнообразных воздействий. Особый интерес представляет управление с помощью оптического излучения, основанное, например, на оптическом эффекте Керра. В связи с этим активно обсуждаются нелинейные свойства фотонных кристаллов и возможность контроля таких их параметров, как, например, ширина и положение запрещенной зоны [12-14]. Во всех исследованиях, посвященных данной тематике, внимание акцентировалось на том факте, что под воздействием внешних полей существенно будут изменяться свойства лишь фотонного кристалла, но не атомов, помещенных в него. Однако, как показано выше, в условиях фотонных кристаллов в спектрах атомов может быть обнаружен эффект, обусловленный изменением свойств электромагнитного вакуума. Оказалось, что этот эффект чувствителен к изменению параметров фотонного кристалла. В частности, обнаруженный эффект очень существенно зависит от показателя преломления материала, из которого изготовлен фотонный кристалл, рисунок 1б. Таким образом, спектральные линии атомов, помещенных в фотонный кристалл, оказываются чувствительными к показателю преломления.

5. Заключение

Мы рассмотрели проблему взаимодействия атомов, помещенных в фотонные кристаллы, с собственным полем излучения. Нами показано, что среда фотонных кристаллов существенно влияет на характер взаимодействия атомных электронов с собственным полем излучения и это приводит к тому, что при таких условиях происходит дополнительный сдвиг энергетических уровней нового типа, который не сводится к обычному лэмбовскому сдвигу. Предсказанный сдвиг рассчитан для атома водорода, помещенного в пустоты фотонного кристалла на основе арсенида галлия. Важным является то, что при определенных условиях, рассматриваемая поправка к энергии уровней атома в фотонном кристалле может быть гораздо больше лэмбовского сдвига. При этом изменение спектра атома будет зависеть исключительно от структуры фотонного кристалла, что открывает дорогу к массе практических приложений, основанных на управлении спектром атомов, помещенных в фотонные кристаллы, путем изменения его показателя преломления, например, с помощью эффекта Керра. Кроме того, подобное явление может быть обнаружено и в других наноматериалах, которые способны влиять на изменение функции плотности фотонных состояний.

Литература

- [1] John S., Wang J. Quantum optics of localized light in a photonic band gap // *Phys. Rev. B.* — 1991. — 43. — P. 12772-12789.
- [2] John S., Wang J. Quantum electrodynamics near a photonic band gap: photon bound states and dresses atoms // *Phys. Rev. Lett.* — 1990. — 64. — P. 2418-2421.
- [3] John, S., Quang T. Spontaneous emission near the edge of a photonic band gap // *Phys. Rev. A.* — 1994. — 50. — P. 1764-1769.
- [4] Quang T., Woldeyohannes M., John S., Agarwal G.S. Coherent control of spontaneous emission near a photonic band edge: a single-atom optical memory device // *Phys. Rev. Lett.* — 1997. — 79. — P. 5238-5241.
- [5] Vats N., John S., Busch K. Theory of fluorescence in photonic crystals // *Phys. Rev. A.* — 2002. — 65. — 043808.
- [6] Lambropoulos P., Nikolopoulos G.M., Nielsen T.R., Bay S. Fundamental quantum optics in structured reservoirs // *Rep. Prog. Phys.* — 2000. — 63. — P. 455-603.
- [7] Busch K., John S. Photonic band gap formation in certain self-organizing systems // *Phys. Rev. E.* — 1998. — 58. — 3896-3908.

- [8] Fussell D.P., McPhedran R.C., Martijn de Sterke C. Two-dimensional treatment of the level shift and decay rate in photonic crystals // *Phys. Rev. E.* — 2005. — 72. — 046605 (1-14).
- [9] Sakoda K. *Optical Properties of Photonic Crystals*. — Springer, Berlin, 2001.
- [10] Bethe H.A. The electromagnetic of energy levels // *Phys. Rev.* — 1947. — 72. — P. 339-341.
- [11] Wang X.-H., Kivshar Y.S., Gu B.-Y. Giant Lamb shift in photonic crystals // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — 93. — 073901 (1-4).
- [12] Tan H. W., Driel H.M., Schweizer S.L., Wehrspohn R.B., Gosele U. Nonlinear optical tuning of a two-dimensional silicon photonic // *Phys. Rev. B.* — 2004. — 70. — 205110 (1-5).
- [13] Kuang S.-Q., Wan R.-G., Kou J., Jiang Y., Gao J.-Y. Tunable double photonic bandgaps in a homogeneous atomic medium // *J. Opt. Soc. Am. B.* — 2010. — 27. — P. 1518-1522.
- [14] Манцызов Б. И. Когерентная и нелинейная оптика фотонных кристаллов. — Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2009. — 208 с.

ГЕНЕРАЦИЯ ВЫСШИХ ГАРМОНИК В СВЕРХРЕШЕТКЕ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА В ПРИСУТСТВИИ ПОСТОЯННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

С. Ю. Глазов¹, Н. Е. Мещерякова²

¹Волгоградский государственный социально-педагогический университет,
Волгоград, Россия

²Волгоградский Институт Бизнеса, Волгоград, Россия

¹ser-glazov@yandex.ru., ²dandelion1@yandex.ru

Рассмотрена генерация высших гармоник плотности тока сверхрешеткой на основе графена на полосчатой подложке под влиянием постоянного и переменного электрических полей, поляризованных вдоль оси сверхрешетки. Электронная система описана с помощью кинетического уравнения Больцмана в приближении постоянного времени релаксации. Исследована зависимость амплитуды высших гармоник от характеристик приложенных полей. Показана возможность усиления и подавления гармоник плотности тока.

Ключевые слова: сверхрешетка, графен.

1. Введение

В последнее время активно изучаются сверхрешетки (СР) на основе графена [1] – [9], которые могут быть сформированы путем создания в образце дополнительного периодического потенциала. Например, в работе [8] предложена модель СР на основе графена, образующаяся за счет периодической модуляции запрещенной зоны. Такая модуляция возможна в графене, осажденном на подложку из периодически чередующихся полосок, например, SiO_2 и SiC . Материал SiO_2 не влияет на зонную структуру графена, в то время как SiC способствует возникновению запрещенной зоны в спектре графена, т.е. образованию щелевой модификации графена. Слои SiC расположены таким образом, что его гексагональная кристаллическая решетка располагается под гексагональной решеткой графена. При этом в областях графенового слоя над слоями SiC образуется энергетическая щель в зонной структуре графена, равная 0,26 эВ.

Возможность проявления ряда нелинейных физических эффектов в графене и структурах на его основе связана с непараболичностью и неаддитивностью его энергетического спектра. Например, нелинейный электромагнитный отклик в графене изучен в [10]. Генерация второй гармоники в графене исследована экспериментально [11], [12] и теоретически [13]. В [14],[15] рассмотрена генерация высших гармоник углеродными нанотрубками полупроводникового типа. Генерация второй гармоники в полупроводниковых СР при совместном влиянии постоянного и переменного электрических полей изучена в [16].

Внимание к подобным нелинейным электромагнитным процессам вызвано возможностью их использования при исследовании физических свойств наноструктур, для управления характеристиками электромагнитного излучения, что находит свое применение в оптике и наноэлектронике.

В этой связи представляется актуальным исследовать генерацию высших гармоник сверхрешеткой на основе графена, взаимодействующей с переменным электрическим полем в присутствии постоянного электрического поля. Предполагается, что электрические поля поляризованы вдоль оси графеновой СР.

2. Основные уравнения

Рассмотрим отклик СР на основе графена, образующейся за счет периодической модуляции запрещенной зоны [8], на действие постоянного и переменного электрических полей, приложенных вдоль оси СР. Геометрия задачи приведена на рис. 1.

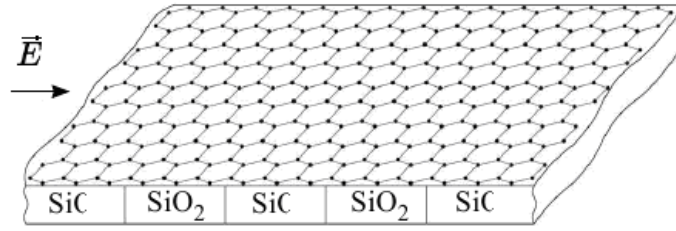


РИС. 1. Геометрия задачи

Закон дисперсии носителей заряда в СР на основе графена на полосчатой подложке в одноминизонном приближении хорошо описывается следующим выражением [9]:

$$\varepsilon(\vec{p}) = \Delta \left(f_1 + \sqrt{f_2^2 + f_3^2 (p_y d / \hbar)^2 + f_4^2 (1 - \cos(p_x d / \hbar))} \right), \quad (1)$$

где Δ — полуширина запрещенной зоны щелевой модификации графена, p_x , p_y — компоненты квазиимпульса электрона, $d = d_1 + d_2$ — период СР, d_1 и d_2 — ширины полосок бесщелевого и щелевого графена, а коэффициенты f_i подбираются численно на основе непосредственного решения дисперсионного соотношения из [8]. Спектр (1) периодичен по p_x и сохраняет неаддитивность, присущую спектру графена.

Плотность тока j_x , текущего вдоль оси СР определяется по формуле

$$j_x = \frac{2e}{(2\pi\hbar)^2} \int v_x(\vec{p}) f(\vec{p}) d^2\vec{p}, \quad (2)$$

где e — заряд электрона, $f(\vec{p})$ — неравновесная функция распределения носителей, v_x — скорость движения электронов вдоль оси СР. Для нахождения функции распределения носителей рассмотрим классическое уравнение Больцмана в приближении постоянного времени релаксации

$$\frac{\partial f(\vec{p}, t)}{\partial t} + e\vec{E} \frac{\partial f(\vec{p}, t)}{\partial \vec{p}} = -\nu (f(\vec{p}, t) - f_0(\vec{p})), \quad (3)$$

где $\vec{E} = (E_1 + E_0 \cos \omega t, 0)$ — суммарная напряженность электрического поля, E_1 — модуль напряженности постоянного электрического поля, E_0 и ω — амплитуда и частота переменного электрического поля, ν — обратное время релаксации, определяемое всеми процессами, $f_0(\vec{p})$ — фермиевская равновесная функция распределения

$$f_0(\vec{p}) = C [1 + \exp(\varepsilon(\vec{p})/k_b T)]^{-1}, \quad (4)$$

где k_b — постоянная Больцмана, T — температура, C — нормировочная константа.

Разложим скорость носителей $v_x(\vec{p})$ в ряд Фурье. Решая (3) методом характеристик, подставляя результат и $v_x(\vec{p})$ в (2), после преобразований, получим выражение для плотности тока

$$j_x = j_0 \sum_l B_l \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sin \varphi_n J_n \left(l \frac{eE_0 d}{\hbar \omega} \right) \cos \left(l \frac{eE_0 d}{\hbar \omega} \sin \omega t - n \omega t - \varphi_n \right), \quad (5)$$

где $j_0 = en\Delta f_4^2 / \pi \hbar$, n — концентрация электронов в зоне проводимости, $J_n(x)$ — функция Бесселя 1-го рода n -го порядка

$$B_l = \frac{1}{A} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(z) \sin(lz) dz}{\sqrt{f_2^2 + f_3^2 y^2 + f_4^2 (1 - \cos(z))}} \times \\ \times \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos(lx) dx dy}{1 + \exp \left(\delta \left\{ f_1 + \sqrt{f_2^2 + f_3^2 y^2 + f_4^2 [1 - \cos(x)]} \right\} \right)},$$

$$A = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[1 + \exp(\delta \{ f_1 + \sqrt{f_2^2 + f_3^2 y^2 + f_4^2 [1 - \cos(x)]} \}) \right]^{-1} dx dy,$$

$$\delta = \Delta / k_b T, \quad \Omega = eE_1 d / \hbar, \quad \sin \varphi_n = 1 / \sqrt{1 + (l\Omega / \nu + nw)^2},$$

$$\cos \varphi_n = (l\Omega / \nu + nw) / \sqrt{1 + (l\Omega / \nu + nw)^2}, \quad w = \omega / \nu.$$

Разложим функцию плотности тока (5) в ряд Фурье:

$$j(t) = a_0 + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos k\omega t + b_k \sin k\omega t), \quad (6)$$

где

$$a_0 = j_0 \sum_l B_l \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n^2 \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar \omega} \right) \sin \varphi_n \cos \varphi_n, \quad (7)$$

$$a_k = j_0 \sum_l B_l \left\{ J_0 \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar \omega} \right) J_k \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar \omega} \right) (\sin \varphi_k \cos \varphi_k + (-1)^k \sin \varphi_{-k} \cos \varphi_{-k}) + \right. \\ + \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar \omega} \right) \left[J_{k-2n} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar \omega} \right) (\sin^2 \varphi_{k-2n} - (-1)^{k-2n} \sin^2 \varphi_{-(k-2n)}) - J_{k+2n} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar \omega} \right) \times \right. \\ \times (\sin^2 \varphi_{k+2n} - (-1)^{k+2n} \sin^2 \varphi_{-(k+2n)}) \left. \right] + J_{2n-1} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar \omega} \right) \left[J_{k+2n-1} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar \omega} \right) \times \right. \\ \times (\sin \varphi_{k+2n-1} \cos \varphi_{k+2n-1} - (-1)^{k+2n-1} \sin \varphi_{-(k+2n-1)} \cos \varphi_{-(k+2n-1)}) - J_{k-2n+1} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar \omega} \right) \times \\ \left. \left. \times (\sin \varphi_{k-2n+1} \cos \varphi_{k-2n+1} - (-1)^{k-2n+1} \sin \varphi_{-(k-2n+1)} \cos \varphi_{-(k-2n+1)}) \right] \right\}, \quad (8)$$

$$\begin{aligned}
b_k = j_0 \sum_l B_l \left\{ -J_0 \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar\omega} \right) J_k \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar\omega} \right) (\sin^2 \varphi_k - (-1)^k \sin^2 \varphi_{-k}) + \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar\omega} \right) \times \right. \\
\times \left[J_{k-2n} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar\omega} \right) (\sin \varphi_{k-2n} \cos \varphi_{k-2n} + (-1)^{k-2n} \sin \varphi_{-(k-2n)} \cos \varphi_{-(k-2n)}) - J_{k+2n} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar\omega} \right) \times \right. \\
\times (\sin \varphi_{k+2n} \cos \varphi_{k+2n} + (-1)^{k+2n} \sin \varphi_{-(k+2n)} \cos \varphi_{-(k+2n)}) \left. \right] + J_{2n-1} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar\omega} \right) \times \\
\times \left[J_{k-2n+1} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar\omega} \right) (\sin^2 \varphi_{k-2n+1} + (-1)^{k-2n+1} \sin^2 \varphi_{-(k-2n)}) - J_{k+2n-1} \left(\frac{eE_0 dl}{\hbar\omega} \right) \times \right. \\
\times (\sin^2 \varphi_{k+2n-1} + (-1)^{k+2n-1} \sin^2 \varphi_{-(k+2n-1)}) \left. \right] \left. \right\}. \quad (9)
\end{aligned}$$

Непосредственно из анализа формул (8) и (9) следует, что амплитуды четных гармоник тока $\sqrt{a_k^2 + b_k^2}$, при $k = 2, 4, \dots$ в случае отсутствия постоянного поля $E_1 \neq 0$ равны нулю, поскольку при этом $\sin \varphi_k = \nu / \sqrt{\nu^2 + k^2 \omega^2}$, $\cos \varphi_k = k\omega / \sqrt{\nu^2 + k^2 \omega^2}$, и выполняются равенства вида: $\sin \varphi_k \cos \varphi_k + \sin \varphi_{-k} \cos \varphi_{-k} \equiv 0$ и $\sin^2 \varphi_k - \sin^2 \varphi_{-k} \equiv 0$. При этом нечетные гармоники тока присутствуют. Аналогичный вывод о генерации нечетных гармоник в углеродных нанотрубках под воздействием переменного электрического поля приведен в работе [15].

Дальнейший анализ формул (8), (9) в силу их сложности производился численно.

3. Основные результаты численного анализа

При условии равенства ширин полос щелевой и бесщелевой модификаций графена ($d_1 = d_2$), а также в отсутствие сдвига между серединой запрещенной зоны щелевой модификации и дираковской точкой бесщелевой модификации были подобраны коэффициенты для закона дисперсии (1): $f_1 = -0.007479$, $f_2 = 0.428302$, $f_3 = 0.251077$, $f_4 = 0.327737$. Относительная ошибка в расчете спектра (1) составляет не более 1%. Одноминизонным приближением можно пользоваться при выполнении условия $4\hbar v_f \leq \Delta d$, где $v_f \approx 10^8$ см/с- скорость Ферми в графене. Оно накладывает ограничения на температуру T , частоту переменного и напряженность постоянного электрического поля: $k_b T \ll \varepsilon_g$, $\hbar\omega \ll \varepsilon_g$, $eE_1 d \ll \varepsilon_g$. Ширина запрещенной зоны между первой и второй минизонами $\varepsilon_g \approx 0.6\Delta$. Энергетическая щель между самой нижней минизонной для электронов и самой верхней минизонной для дырок равна $\varepsilon_{g0} \approx 0.9\Delta$. С учетом этого были выбраны следующие параметры: $T \sim 70^\circ K$, $n \sim 10^{10}$ см $^{-2}$, $\nu \sim 10^{11}$ с $^{-1}$, $d \sim 10^{-6}$ см, $2\Delta \approx 0.26$ eV (SiC), $j_0 \approx 40$ МА/см. Численный анализ показал, что коэффициенты B_l быстро убывают с ростом номера l .

На рис. 2 представлены графики зависимости амплитуды первой гармоники тока $\sqrt{a_1^2 + b_1^2}$ от безразмерной величины амплитуды переменного поля $eE_0 d / \hbar\nu$ для разных значений постоянного поля E_1 . Из графиков видно, что амплитуда первой гармоники тока с ростом амплитуды переменного поля испытывает сложные убывающие осцилляции. Это дает возможность в широком интервале значений управлять амплитудой данной гармоники с помощью переменного электрического поля. Особенно перспективным в плане практического приложения представляется начальная область полей, поскольку именно здесь амплитуда осцилляций максимальна. С увеличением напряженности постоянного поля хорошо виден сдвиг главного максимума амплитуды в сторону больших значений амплитуды

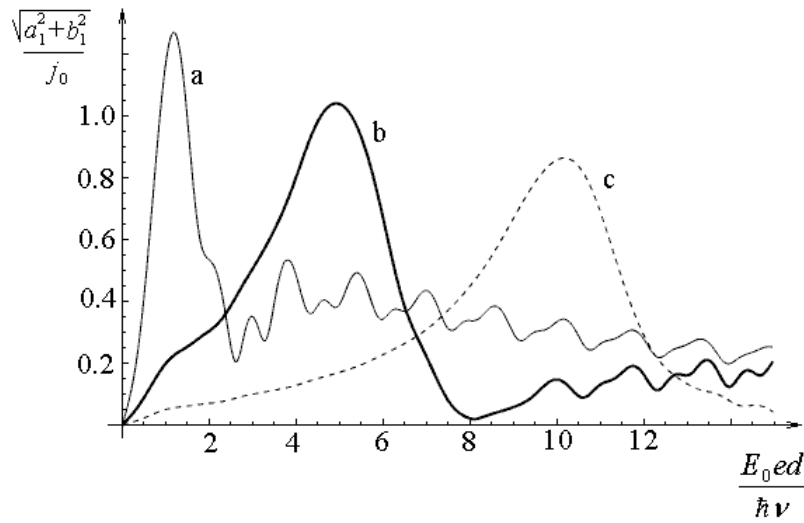


РИС. 2. Зависимость первой гармоники плотности тока от амплитуды переменного электрического поля: а) $eE_1 d / \hbar \nu = 1$, б) $eE_1 d / \hbar \nu = 5$, в) $eE_1 d / \hbar \nu = 10$; $\omega / \nu = 0.5$

переменного электрического поля. Увеличение частоты приложенного поля ω также приводит к растяжению графика вдоль оси X, и как следствие, смещению максимумов амплитуды гармоники в сторону больших амплитуд напряженности приложенного поля.

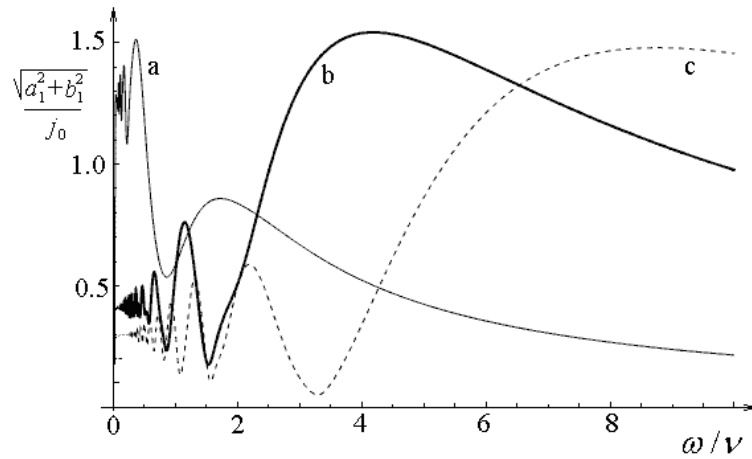


РИС. 3. Зависимость первой гармоники плотности тока от частоты переменного электрического поля: $eE_1 d / \hbar \nu = 1$; а) $eE_0 d / \hbar \nu = 1$, б) $eE_0 d / \hbar \nu = 5$, в) $aeE_0 d / \hbar \nu = 10$

Амплитуда первой гармоники тока от величины обезразмеренной напряженности постоянного поля также испытывает сложные убывающие осцилляции. Несмотря на сложный, осциллирующий характер зависимостей можно отметить, что наложение на систему постоянного и переменного электрического поля приводит к ослаблению первой гармоники.

Зависимость амплитуды первой гармоники тока от частоты переменного электрического поля для разных значений амплитуды переменного поля $eE_0 d / \hbar \nu$ приведена на рис. 3.

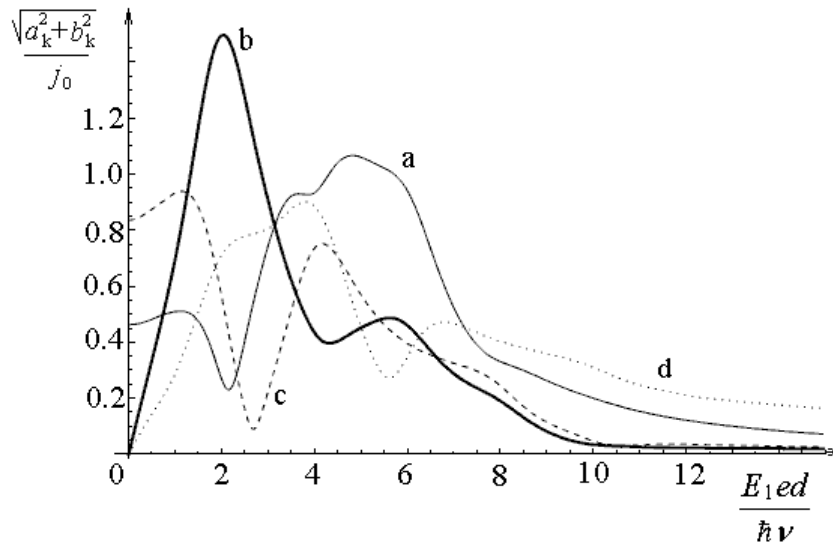


РИС. 4. Зависимость амплитуды первой (a), второй (b), третьей (c) и четвертой (d) гармоник от постоянного электрического поля: $eE_0d/\hbar\nu = 5$, $\omega/\nu = 2$

Из графиков видно, что амплитуда первой гармоники тока с ростом частоты переменного поля испытывает сложные осцилляции.

Меняя характеристики приложенных полей E_1 , E_0 и ω , можно добиться существенного подавления или усиления соответствующей гармоники. На рис. 4 хорошо видно усиление второй гармоники (кривая b) при подавлении остальных при $eE_1d/\hbar\nu = 2.5$ и небольшое преобладание четвертой гармоники (кривая d) при $eE_1d/\hbar\nu > 8$.

В отличие от полупроводниковых СР [16], в СР на основе графена описанные выше осцилляции гармоник плотности тока должны наблюдаться при значительно меньших электрических полях.

4. Заключение

В заключении сформулируем основные выводы из данной работы:

- (1) Получено и численно проанализировано выражение для амплитуд высших гармоник плотности тока в СР на основе графена под воздействием постоянного и переменного электрических полей, поляризованных вдоль ее оси.
- (2) Наложение на систему постоянного поля приводит к возникновению четных гармоник плотности тока, в то время как первая гармоника ослабляется.
- (3) Зависимости амплитуд высших гармоник плотности тока от характеристик приложенных к системе полей имеет немонотонный, осциллирующий характер. Это дает возможность в широком интервале значений управлять амплитудой гармоники.
- (4) При определенных соотношениях величин E_1 , E_0 , ω и ν возможно усиление одних гармоник и подавление других.

Работа поддержана грантом РФФИ №10-02-97001-р_поволжье_a.

Литература

- [1] Чернозатонский Л.А., Сорокин П.Б., Белова Е.Э. и др. Сверхрешетки металл – полупроводник (полуметалл) на графитовом листе с вакансиями // Письма в ЖЭТФ. — 2006. — 84(3). — С. 141-145.
- [2] Чернозатонский Л.А., Сорокин П.Б., Белова Е.Э. и др. Сверхрешетки, состоящие из “линий” адсорбированных пар атомов водорода на графене // Письма в ЖЭТФ. — 2007. — 85(1). — С. 84-89.

- [3] Sevincli H., Topsakal M., Ciraci S. Superlattice structures of graphene-based nanoribbons // *Phys. Rev. B.* — 2008. — 78. — P. 245402-245409.
- [4] Isacsson A., Jonsson L.M., Kinaret J.M. et al. Electronic superlattices in corrugated graphene // *Phys. Rev. B.* — 2008. — 77. — P. 035423-135428.
- [5] Крючков С.В., Кухарь Е.И., Яковенко В.А. Взаимное выпрямление двух синусоидальных волн с ортогональными плоскостями поляризации в сверхрешетке на основе графена // *Известия РАН. Серия физическая.* — 2010. — 74(12). — С. 1749-1751.
- [6] Barbier M., Vasilopoulos P., Peeters F.M. Single-layer and bilayer graphene superlattices: collimation, additional Dirac points and Dirac lines // *Phil. Trans. R. Soc. A.* — 2010. — 368. — P. 5499-5524.
- [7] Bolmatov D., Chung-Yu Mou Graphene-based modulation-doped superlattice structures // *ЖЭТФ.* — 2011. — 139(1). — P. 119-125.
- [8] Ратников П. В. Сверхрешетка на основе графена на полосчатой подложке // *Письма в ЖЭТФ.* — 2009. — 90(6). — С. 515-520.
- [9] Завьялов Д.В., Конченков В.И., Крючков С.В. Выпрямление поперечного тока в сверхрешетке на основе графена // *ФТП.* — 2012. — 46(1). — С. 113-120.
- [10] Mikhailov S.A. Non-linear electromagnetic response of graphene // *Europhys. Lett.* — 2007. — 79. — P. 27002-27008.
- [11] Dean J.J., van Driel H.M. Second harmonic generation from graphene and graphitic films // *Appl. Phys. Lett.* — 2009. — 95. — P. 261910-261912.
- [12] Dean J.J., van Driel H.M. Graphene and few-layer graphite probed by second-harmonic generation: Theory and experiment // *Phys. Rev. B.* — 2010. — 82. — P. 125411-125421.
- [13] Glazov M.M. Second harmonic generation in graphene // *Письма в ЖЭТФ.* — 2011. — 93(7). — С. 403-413.
- [14] Белonenко М.Б., Глазов С.Ю., Мещерякова Н.Е. Нелинейная проводимость однослойных углеродных нанотрубок типа “зигзаг” // *Известия РАН. Серия физическая.* — 2009. — 73(12). — С. 1709-1712.
- [15] Белonenко М.Б., Глазов С.Ю., Мещерякова Н.Е. Влияние постоянного электрического поля на процесс генерации высших гармоник в углеродных нанотрубках полупроводникового типа // *Оптика и спектроскопия.* — 2010. — 108(5). — С. 818-823.
- [16] Shmelev G.M., Valgutskova E.N., Epshtein E.M. On the second harmonic generation in superlattices // *arXiv:cond-mat/0410246.* — 2004.

УПРАВЛЕНИЕ ВО ВРЕМЕННОМ НАНОДИАПАЗОНЕ ПОЯВЛЕНИЕМ ШТАРКОВСКОГО ЭХА ПУТЕМ ВАРЬИРОВАНИЯ ВЗАИМНОЙ ОРИЕНТАЦИИ ГРАДИЕНТОВ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ

Г. И. Гарнаева, Л. А. Нефедьев, Е. Н. Ахмедшина

Казанский (Приволжский) Федеральный университет, Институт физики,
Казань, Россия

guzka-1@yandex.ru, nefediev@yandex.ru, vesnuschka-88@yandex.ru

PACS 42.25.Kb, 42.65.-k

Показана возможность управления временем появления отклика Штарковского эха формируемого в системе наночастиц при изменении взаимной ориентации градиентов внешних электрических полей. Найдено, что при различных углах между градиентами внешних неоднородных электрических полей наблюдается сдвиг в нановременном диапазоне появления Штарковского эха.

Ключевые слова: фотонное эхо, запираение информации, Штарковское эхо, неоднородные электрические поля, оптические наночастицы.

В работах [1, 2, 3] был рассмотрен эффект «запирания» сигналов фотонного эха при различной ориентации градиентов внешних неоднородных электрических полей. Из развитой теории следует, что при взаимной ориентации градиентов под углом 180° возможно возникновение отклика типа эха при одноимпульсном лазерном воздействии. Такой тип эха экспериментально был обнаружен в системе наночастиц, в качестве которых взяты оптические центры ^{151}Eu в кристалле $\text{Eu}^{3+} : \text{Y}_2\text{SiO}_5$, в [4] на переходе $^7F_0 - ^5D_0$ в кристалле $\text{Eu} : \text{Y}_2\text{SiO}_5$. В данной работе принципиальным является то, что возбуждение неоднородной уширенной линии происходит в достаточно узком интервале частот по сравнению с ее шириной, которая в условиях эксперимента была порядка 3 ГГц, а область возбуждения порядка 50 МГц. Что необходимо для создания искусственного неоднородного уширения неоднородным электрическим полем, в этом случае уменьшается затухание за счет обратимой релаксации и становится возможным наблюдение Штарковского (градиентного) эха.

Оптический переход в используемых оптических наночастицах в ^{151}Eu , использованный в этом эксперименте $^7F_0 - ^5D_0$ на длине волны 579,879 нм (при содержании 0,1% ^{151}Eu) в $\text{Eu}^{3+} : \text{Y}_2\text{SiO}_5$. Переход возбуждался линейно поляризованным светом, распространяющимся вдоль оси кристалла с поляризацией, выбранной для максимизации поглощения. Толщина кристалла в направлении распространения была 4 мм. Кристалл охлаждался до 4°K в жидком гелии. Квадрупольное электрическое поле было приложено к образцу, используя четыре 10-ти мм, по диаметру 2 мм прутка в квадрупольном распределении. Два генератора с основной частотой 1 МГц прикладывали напряжение к электродам. Эти генераторы имели по две противоположные полярности, с напряжением ± 35 В. Такая конфигурация обеспечивала электрическое поле, которое линейно изменялось внутри образца в направлении распространения света с максимальным градиентом поля приблизительно $300 \text{ В} \cdot \text{см}^{-2}$. Полярность неоднородного электрического поля изменялось через время t

(составляющая десятки наносекунд) и дальше через время τ наблюдалось эхо. Преимуществом такой схемы возбуждения откликов является отсутствие оптических линий задержки, что упрощает постановку соответствующих экспериментов.

В данной работе исследовано формирование отклика Штарковского эха при различных градиентах внешних электрических полей и различной геометрии эксперимента.

Рассмотрим схему возбуждения Штарковского эха (рис. 1) при различных величинах неколлинеарных градиентов внешних электрических полей. Время воздействия первого градиента будем считать равным τ (нс), а время второго — до момента появления Штарковского эха. Для уменьшения затухания из-за обратимой релаксации T_2^* будем полагать область возбуждения неоднородно уширенной линии равной $k\%$ от ее полуширины. Уравнение для одночастичной матрицы плотности во вращающейся системе координат запишем в виде

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [B, \tilde{\rho}], \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} B &= \tilde{H}_{0m} + \tilde{U} - \hbar A, \\ \tilde{H}_{0m} &= e^{iAt} H_{0m} e^{-iAt}, \\ \tilde{U} &= e^{iAt} U e^{-iAt}, \end{aligned}$$

A — матрица перехода во вращающуюся систему координат, U — оператор взаимодействия резонансной системы с возбуждающим лазерным импульсом, H_{0m} — гамильтониан оптического центра во внешнем пространственно неоднородном нерезонансном электромагнитном поле на τ_m^* -ом временном интервале, $\mathbf{r}$ — радиус-вектор местоположения оптического центра. В случае двухуровневой системы

$$\begin{aligned} e^{\pm iAt} &= P_{11} + P_{22} e^{\pm i\omega t}, \\ \tilde{H}_{0m} &= \hbar (\Delta + \varepsilon(\tau_m, \mathbf{r})), \\ \tilde{U} &= \frac{1}{2} d E_0 (P_{12} e^{-ikr} + P_{21} e^{ikr}), \end{aligned}$$

где P_{ij} — проективные матрицы (их ij -й элемент равен единице, а остальные элементы равны нулю), d — дипольный момент резонансного перехода, E_0 — напряженность электрического поля лазерного импульса, $\mathbf{k}_m$ — волновой вектор лазерного импульса, $\varepsilon(\tau_m, \mathbf{r})$ — дополнительный частотный сдвиг оптического центра на временном интервале τ_m за счет внешнего неоднородного электрического поля.

Решение уравнения 1 для двухуровневой системы было получено в [1]. В этом случае напряженность электрического поля отклика Штарковского эха определим как: $I = E \cdot E^*$, где

$$E_m \sim \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{\infty} \int_V \exp \{i [\pm \tau_m f(\tau_m, \Delta, \mathbf{r}) - \tau_\zeta f(\tau_\zeta, \Delta, \mathbf{r})]\} g_1(\mathbf{r}) g(\Delta) dV d\Delta, \quad (2)$$

где Δ — сдвиг отдельной монокроматы, $f(\tau_m, \Delta, \mathbf{r}) = \Delta + \varepsilon(\tau_m, \Delta, \mathbf{r})$ — полные частотные сдвиги уровней оптических центров [1, 3], V — объем возбуждаемой части образца, $g_1(\mathbf{r})$ — равномерная функция распределения оптических центров в образце, $g(\Delta)$ — Гауссова функция распределения оптических наноцентров по частотам с шириной соответствующей ширине лазерного возбуждения неоднородно уширенной линии резонансного перехода.

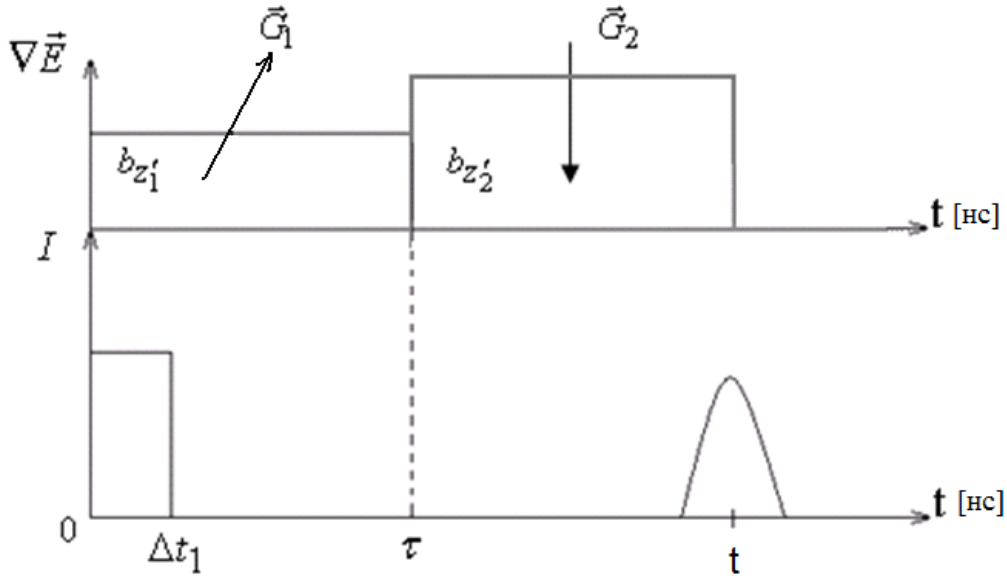


РИС. 1. Схема возбуждения градиентного (Штарковского) эха. P — возбуждающий лазерный импульс, $G_1 = \nabla E_1$, $G_2 = \nabla E_2$ — градиенты внешних неоднородных электрических полей

В случае если градиенты внешних электрических полей не коллинеарны, то $f(\tau_m, \Delta, \mathbf{r})$ и $f(\tau_\zeta, \Delta, \mathbf{r})$ зависят от взаимной ориентации этих градиентов. Свяжем систему координат (x, y, z) с первым градиентом, а (x', y', z') — со вторым градиентом:

$$(\nabla E)_{\Delta\tau_i} = b_{x_1}i + b_{y_1}j + b_{z_1}k, \quad (3)$$

$$(\nabla E)_{\Delta\tau_k} = b_{x'_2}i' + b_{y'_2}j' + b_{z'_2}k', \quad (4)$$

где b — проекции вектора градиента на соответствующие оси координат, i, j, k — орты систем координат. Тогда в системе (x, y, z) второй градиент будет иметь компоненты

$$\begin{pmatrix} B_{x_2} \\ B_{y_2} \\ B_{z_2} \end{pmatrix} = D(\alpha, \beta, \gamma) \begin{pmatrix} B_{x'_2} \\ B_{y'_2} \\ B_{z'_2} \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где $D(\alpha, \beta, \gamma)$ — матрица вращений, α, β, γ — углы Эйлера взаимной ориентации градиентов. Для простоты выберем направления градиентов вдоль осей z и z' соответственно.

Тогда

$$\varepsilon_{\Delta\tau}(z) = C_{\text{ш}} b_{z_m} z_m, \quad (z_m = 1, 2),$$

где $C_{\text{ш}}$ — штарковский коэффициент.

В общем случае $b_{z'_1} \neq b_{z'_2}$, тогда

$$E \sim \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{\infty} \int_V \exp(i\Delta t) \exp(ic_m b_{z'_1} \tau z - iC_{\text{ш}} b_{z'_2} \cos \beta (t - \tau) z) g(\Delta) g_1(\mathbf{r}) d\Delta d\mathbf{r}. \quad (6)$$

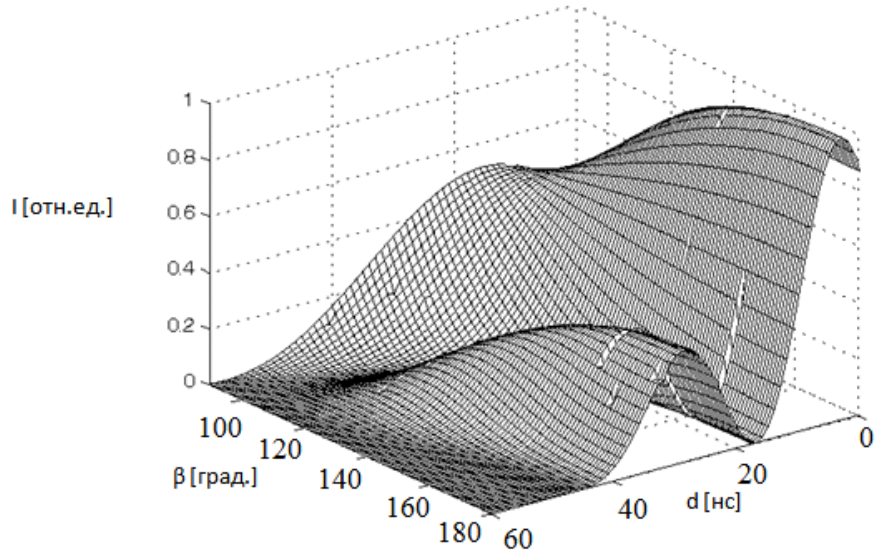


РИС. 2. Угловая зависимость интенсивности Штарковского эха. $\tau = 50$ нс — длительность воздействия градиентов; $C_{\text{ш}} = 35$ кГц/В·см⁻¹ — Штарковский коэффициент; d — сдвиг времени в наносекундном диапазоне появления Штарковского эха, $\nabla E_1 = \nabla E_2 = 100$ В·см⁻² — градиенты внешних неоднородных электрических полей

В случае, когда величины и направления градиентов одинаковы, время появления Штарковского эха $t = 2\tau$. Если же величины градиентов разные, то время появления отклика будет наблюдаться при $t \approx \tau \left(1 + \frac{b_{z'_1}}{b_{z'_2} \cos \beta} \right)$. Это означает, что путём изменения соотношения между величинами линейных градиентов электрических полей можно управлять временем появления отклика градиентного (штарковского) эха в наносекундном диапазоне.

При сравнении частотных сдвигов оптических центров на разных временных интервалах τ_m за счет взаимодействия с различно пространственно ориентированными градиентами внешних электрических полей, удобно задать вектора градиентов электрических полей $(\nabla E)_{\Delta\tau_i}$ и $(\nabla E)_{\Delta\tau_k}$ с линейными градиентами в системах координат (x, y, z) и (x', y', z') аналогично (3) и (5).

В этом случае

$$\varepsilon_{\Delta\tau}(z) = C_{\text{ш}} b_{z_m}, \quad (z_m = 1, 2),$$

где $C_{\text{ш}}$ — штарковский коэффициент.

Из выражения (6) следует, что угловая зависимость в данном случае будет

$$E \sim \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{\infty} \int_V \exp(i\Delta t) \exp(ic_m b_{z_2} \tau z - iC_{\text{ш}} b_{z'_2} \cos \beta (t - \tau) z) g(\Delta) g_1(\mathbf{r}) d\Delta d\mathbf{r}, \quad (7)$$

где β — угол между направлениями градиентов внешних неоднородных электрических полей.

Численный расчет выражения (2) дает угловую зависимость времени появления отклика Штарковского эха, показанную на рис. 2.

Из рис. 2 следует, что время появления и интенсивность отклика Штарковского эха зависит от взаимной ориентации градиентов внешних электрических полей, что позволяет управлять данными характеристиками путем варьирования угла β .

Выводы:

- (1) При изменении взаимной ориентации градиентов внешних электрических полей происходит изменение интенсивности отклика Штарковского эха.
- (2) Максимальное значение интенсивности в данном случае наблюдается при угле 180 градусов.
- (3) При различных углах между градиентами внешних неоднородных электрических полей наблюдается сдвиг времени появления Штарковского эха в наносекундном диапазоне.
- (4) Изменение взаимной ориентации градиентов внешних электрических полей позволяет управлять временем появления отклика Штарковского эха в наносекундном диапазоне.

Литература

- [1] Нефедьев Л.А., Гарнаева (Хакимзянова) Г.И. Эффект «запирания» сигналов фотонного эха при многоканальной записи информации // Оптика и спектроскопия. — 2008. — 105(6). — С. 1007-1012.
- [2] Нефедьев Л.А., Гарнаева Г.И., Усманов Р.Г. Многоканальная запись информации на основе эффекта «запирания» сигналов фотонного эха // Оптический журнал. — 2010. — 77(2). — С. 27-29.
- [3] Nefed'ev L.A., Samartsev V.V., Zuikov V.A., Kalachev A.A. Information locking in optical memory devices based on the long-lived photon echo // Optical Memory and Neural Net-works. — 1997. — 6(2). — P. 129-132.
- [4] Alexander A.L., Longdell J.J., Sellars M.J. and Manson N.B. Photon echoes produced by switching electric fields // arXiv: quant-ph/0506232. — 2005. — 5. — P. 1-5.

УДК 539.186.3

УНИВЕРСАЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ ЧИСТЫХ МЕТАЛЛОВ

В. Е. Зализняк¹, О. А. Золотов¹

¹Сибирский Федеральный Университет, Красноярск, Россия

vzalizniak@sfu-kras.ru, ozolot_@mail.ru

PACS 34.20.Cf

Предлагается новый подход к построению потенциала взаимодействия для металлов на основе метода вложенного атома. Из основных принципов квантовой механики задаётся аппроксимация распределения электронной плотности атомов, из которой следует не только парный потенциал взаимодействия, но и конкретный вид функции вложенной энергии. Для описания свойств конкретного металла требуется подобрать только два параметра распределения электронной плотности. Подбор этих параметров осуществляется из условия устойчивости равновесной решётки для экспериментальных значений параметров решётки и с использованием экспериментальных значений энергии связи, энергии образования вакансии и упругих постоянных. Приводятся потенциалы взаимодействия для трёх металлов с различными кристаллическими структурами: Al(ГЦК), Fe(ОЦК) и Mg(ГПУ). Общий вид потенциала имеет простую аналитическую форму и может использоваться для моделирования больших атомных систем в рамках метода молекулярной динамики.

Ключевые слова: потенциал межатомного взаимодействия, метод вложенного атома.

Обозначения

a , c — параметры равновесной кристаллической решётки,
 E_c , E_{vf} — экспериментальные значения энергии связи и энергии образования вакансии,
 c_{11} , c_{12} , c_{44} , B — экспериментальные значения упругих постоянных,
 $E_c^{(a)}$, $E_{vf}^{(a)}$ — вычисленные значения энергии связи и энергии образования вакансии,
 $c_{11}^{(a)}$, $c_{12}^{(a)}$, $c_{44}^{(a)}$, $B^{(a)}$ — вычисленные значения упругих постоянных,
 Q — заряд ядра,
 E_s — поверхностная энергия.

1. Введение

В последние годы компьютерное моделирование приобретает всё большее значение для исследования свойств и поведения различных материалов, в частности, металлов. Наиболее точные результаты даёт моделирование, основанное на принципах квантовой механики. Однако методы, основанные на этих принципах, требуют значительных вычислительных ресурсов для моделирования систем состоящих из большого числа атомов. Для моделирования больших систем часто используются эмпирические потенциалы взаимодействия. Можно выделить следующие основные подходы: метод вложенного атома (ЕАМ) [1, 2], метод, основанный на аппроксимации модели тесной связи [3, 4], потенциал предложенный Эрколеси [5, 6]. С математической точки зрения все эти методы можно представить в единой форме и далее будет использоваться терминология, принятая в методе вложенного атома.

В методе вложенного атома энергия набора атомов есть сумма энергии парных взаимодействий и энергии необходимой для внедрения каждого атома в электронную плотность,

которая создаётся всеми другими атомами. Такое приближение математически формулируется следующим образом

$$E_{\text{tot}} = \sum_{n=1}^N E_n, \quad E_n = F(\rho_n) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^N \varphi(r_{nm}), \quad \rho_n = \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^N \rho(r_{nm}), \quad (1)$$

где E_{tot} — энергия системы из N атомов, ρ_n — электронная плотность в точке положения атома n в которую вносят вклад все окружающие атомы, $\rho(r_{nm})$ — вклад электронной плотности от атома m в точку положения атома n , $F(\rho_n)$ — энергия необходимая для того чтобы поместить атом в электронную плотность ρ_n , $\varphi(r_{nm})$ — парный потенциал взаимодействия между атомами n и m , находящимися на расстоянии r_{nm} .

В настоящее время имеется ряд потенциалов взаимодействия, в которых задаются различные функциональные зависимости $\varphi(r)$ и $\rho(r)$ и эти зависимости непосредственно не связаны друг с другом. Такой подход не является физически обоснованным, так как взаимодействие в металлах обуславливается распределением электронной плотности атомов. В данной работе предлагается некоторая аппроксимация распределения электронной плотности атомов $\rho(r)$, из которой следует не только парный потенциал взаимодействия $\varphi(r)$ но и, в основном, вид функции вложенной энергии $F(\rho)$. Приведённые в литературе потенциалы не являются универсальными: каждый конкретный потенциал используется для описания свойств металлов только с определённой кристаллической структурой (например, [7,8] для металлов с ГЦК решёткой, [9-11] для металлов с ГЦК и ОЦК решётками, [12] для металлов с ГЦК и ГПУ решётками, [13] для металлов с ГПУ решёткой). В настоящей работе предлагается подход, который возможно позволит описывать основные свойства большинства металлов.

2. Построение потенциала

Как известно [14], в нерелятивистском приближении волновая функция Ψ многоэлектронного атома удовлетворяет уравнению Шредингера:

$$\frac{h^2}{4\pi^2m} \Delta \Psi - U \Psi = E \Psi,$$

где потенциальная энергия U есть сумма потенциальных энергий взаимодействия каждого электрона с ядром и их попарного взаимодействия друг с другом, а оператор Лапласа Δ действует в многомерном пространстве координат электронов. Точное решение такой задачи весьма затруднительно, поэтому прибегают к различным приближенным методам [15,16]. Для рассмотрения электростатического взаимодействия атомов используют квазиклассическую модель, где заряд электронов считается «размазанным» вокруг ядра, и подбирают параметры плотности распределения заряда из сравнения с экспериментальными данными. Что же касается выбора вида функции распределения заряда, то здесь обычно авторы руководствуются скорее соображениями удобства аналитической интегрируемости, нежели физическими соображениями (например, [17]). Тем не менее, физические соображения самого общего характера позволяют сделать достаточно хорошие предположения о виде искомой функции.

Рассмотрим атом, в котором в связанном состоянии находится N электронов. Обозначим их полный заряд Q . Тогда функция плотности зарядов электронного облака:

$$\rho(r) = Q \left\langle \int \Psi^2(r_1, \dots, r_{i-1}, r, r_{i+1}, \dots, r_N) dV_1 \dots dV_{i-1} dV_{i+1} \dots dV_N \right\rangle,$$

где угловые скобки означают усреднение по всем возможным перестановкам $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}_i$ и интегрирование проводится по $3(N-1)$ координатам. В силу полноты одночастичных решений уравнения Шредингера, для связанных состояний многочастичное решение можно представить как сумму произведений различных ортогональных одночастичных решений с соответствующими статистике коэффициентами:

$$\Psi = \sum_i \alpha_i \prod_j \sum_k a_{ijk} \psi_k(r_j),$$

$$\int \left(\sum_k a_{ijk} \psi_k(r_j) \right)^2 dV_j = 1.$$

Тогда для плотности зарядов электронного облака получается выражение вида

$$\rho(r) = Q \sum_i a_i^2 \psi_i^2(r). \quad (2)$$

Самый простой вид функции распределения зарядов — сферически симметричный. Как известно [14], решение уравнение Шредингера для водородоподобного атома в сферических координатах имеет вид

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = D_n^{(l)}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) e^{-\gamma_n r}, \quad (3)$$

где $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ — сферические гармоники, $D_n^{(l)}(r)$ — полиномы, которые выражаются через обобщённые полиномы Лаггера, n, l, m — квантовые числа и постоянные γ_n находятся из условия существования нетривиальных решений при заданных граничных условиях. Подставляя волновые функции (3) в (2) и усредняя полученное выражение по углам, в силу ортонормированности сферических гармоник получим:

$$\rho(r) = Q \sum_i a_i^2 P_i^2(r) e^{-\alpha_i r}.$$

Здесь учтено, что сумма квадратов полиномов $D_n^{(l)}(r)$ с положительными коэффициентами будет неотрицательным полиномом, который приближаем в виде квадрата некоего полинома $P_i(r)$.

При расчете энергии взаимодействия двух атомов физически интересны достаточно большие расстояния между ними, где основной вклад дают члены с малыми α_i , то есть внешние оболочки атома. Поскольку в дальнейшем мы намерены находить коэффициенты из сравнения расчетных данных и результатов эксперимента, полином следует брать достаточно небольшой степени, чтобы ограничиться разумным количеством подгоночных параметров. Тем более, что степень полинома определяет число его нулей, а после сложения квадратов полиномов $D_n^{(l)}(r)$ различных степеней результирующий полином не будет иметь действительных корней при $r > 0$. Тогда в интересующей нас весьма ограниченной области положительных действительных r , искомый полином может быть с достаточной точностью приближен полиномом много меньшей степени.

Таким образом, вышеизложенное дает основания полагать, что уже функция вида

$$\rho(r) \approx (1 + \beta r)^2 e^{-\alpha r}$$

может быть неплохой аппроксимацией плотности заряда электронного облака. С учетом нормировки, плотность зарядов электронного облака будет иметь вид

$$\rho(r) = \frac{Q \alpha^5}{8\pi (6\alpha\beta + 12\beta^2 + \alpha^2)} (1 + \beta r)^2 e^{-\alpha r}.$$

После интегрирования уравнения Пуассона получим создаваемый такой плотностью потенциал:

$$\Phi(r) = \frac{Q}{8\pi\varepsilon_0} \left(\frac{2}{r} - \left(\frac{\alpha\beta^2(r^2\alpha^2 + 2r\alpha + 2)}{(6\alpha\beta + 12\beta^2 + \alpha^2)} - \frac{2\alpha\beta(\alpha + 2\beta)(r\alpha + 1)}{(6\alpha\beta + 12\beta^2 + \alpha^2)} + \alpha + \frac{2}{r} \right) e^{-\alpha r} \right),$$

где ε_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума.

Рассмотрим электростатическую энергию взаимодействия двух атомов. Она состоит из энергии взаимодействия двух ядер W_{nn} , энергии взаимодействия их электронных оболочек W_{ss} и энергии взаимодействия ядер с электронными оболочками другого атома W_{ns} :

$$\varphi(r) = W_{nn} + W_{ss} + W_{ns}, \quad (4)$$

$$W_{nn}(r) = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\varepsilon_0 r}, \quad W_{ns}(r) = Q_1 \Phi_2(r) + Q_2 \Phi_1(r),$$

$$W_{ss}(r) = 2\pi \int_0^\infty \left(\int_0^\pi \left(\Phi_1(r') \rho_2 \left(\sqrt{r^2 + (r')^2 - 2r(r') \cos(\theta)} \right) \right) \sin(\theta) d\theta \right) (r')^2 dr' + \\ 2\pi \int_0^\infty \left(\int_0^\pi \left(\Phi_2(r') \rho_1 \left(\sqrt{r^2 + (r')^2 - 2r(r') \cos(\theta)} \right) \right) \sin(\theta) d\theta \right) (r')^2 dr'.$$

Здесь r — расстояние между центрами электронных оболочек атомов, где находятся ядра с зарядами Q_1 и Q_2 . Отметим, что в общем случае разных атомов мы имеем две пары подгоночных параметров α_1, β_1 и α_2, β_2 . С помощью интегрирования можно получить аналитическое выражение для W_{ss} , но оно получается очень громоздким даже для одинаковых атомов и поэтому здесь не приводится.

Очевидно, что при перекрытии электронных облаков квантово-механические эффекты обменного взаимодействия играют существенную роль. Как было уже указано выше, точное аналитическое или полуаналитическое решение такой квантово-механической задачи для общего случая не представляется возможным. Поэтому будем учитывать эти эффекты с помощью подгоночного параметра γ и тогда потенциал парного взаимодействия примет вид

$$\varphi(r) = \gamma (W_{nn} + W_{ss} + W_{ns}).$$

Подставляя аналитическое выражение для W_{ss} в (4) и преобразуя получающееся выражение, потенциал парного взаимодействия для одинаковых атомов можно записать в виде

$$\varphi(r) = \varepsilon \cdot \exp(-\alpha r) \sum_{n=-1}^6 a_n (\alpha r)^n, \\ \varepsilon = \frac{\gamma \alpha Q^2}{4\pi\varepsilon_0},$$

где параметры a_n зависят от α и β :

$$a_{-1} = 1, \\ a_n(\alpha, \beta) = \frac{p_{n+1}(\alpha, \beta)}{p_0(\alpha, \beta)}, n = 0, \dots, 6.$$

Функции p_n , возникающие после преобразования выражения (4), имеют следующий вид:

$$p_0(\alpha, \beta) = (\alpha^2 + 6\alpha\beta + 12\beta^2)^2, \\ p_1(\alpha, \beta) = 0.3125\alpha^4 + 5.125\alpha^3\beta + 31.5\alpha^2\beta^2 + 88.875\alpha\beta^3 + 98.1562\beta^4, \\ p_2(\alpha, \beta) = -0.1875\alpha^4 - 0.875\alpha^3\beta + 1.5\alpha^2\beta^2 + 16.845\alpha\beta^3 + 72\beta^4, \\ p_3(\alpha, \beta) = -0.02\alpha^4 - 0.5\alpha^3\beta - 2.44\alpha^2\beta^2 - 3.875\alpha\beta^3 + 2.125\beta^4, \\ p_4(\alpha, \beta) = -0.04\alpha^3\beta - 0.4375\alpha^2\beta^2 - 1.5\alpha\beta^3 - 1.875\beta^4, \\ p_5(\alpha, \beta) = -0.15\alpha\beta^3 - 0.029\alpha^2\beta^2 - 0.225\beta^4,$$

$$p_6(\alpha, \beta) = -0.008\alpha\beta^3 - 0.01875\beta^4,$$

$$p_7(\alpha, \beta) = -0.00089\beta^4.$$

Из квантово-механических расчётов [7] следует, что функция $F(\rho)$, описывающая энергию вложенного атома, должна удовлетворять следующим свойствам:

- (1) стремиться к нулю, когда электронная плотность стремится к нулю:

$$F(0) = 0, \quad (5)$$

- (2) иметь отрицательное значение, так как она описывает притяжение атомов:

$$F(\rho) < 0, \quad (6)$$

- (3) иметь отрицательный наклон:

$$\frac{\partial F}{\partial \rho}(\rho) < 0, \quad (7)$$

- (4) иметь положительную кривизну:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2}(\rho) > 0, \quad (8)$$

для характерных электронных плотностей ρ , наблюдаемых в металлах. Функция $F(\rho)$ задавалась в следующем виде

$$F(\rho) = \sum_{n=0}^4 c_n \left(\frac{\rho}{\rho_e} - 1 \right)^n, \quad (9)$$

где ρ_e — равновесная электронная плотность, а способ определения коэффициентов c_n будет представлен ниже.

3. Параметризация

Таким образом необходимо подобрать только два параметра α и β для того чтобы определить потенциал взаимодействия между атомами металла одного сорта. Рассмотрим идеальный, однородный кристалл при нулевой температуре, тогда все атомы будут эквивалентны. Поэтому мы можем связать начало координат с одним из атомов и переписать (1) в виде

$$E_n = F(\rho_e) + \frac{1}{2} \sum_m \varphi(r_m), \quad (10)$$

$$\rho_e = \sum_m \rho(r_m),$$

где суммирование производится по всем окружающим атомам, которые находятся на расстояниях r_m от начала координат. Эти расстояния определяются типом и параметрами решётки для каждого конкретного металла. Основные свойства твёрдого тела могут быть вычислены из уравнения (10). Условие равновесия решётки имеет вид

$$\frac{1}{2} \sum_m r_m \frac{d\varphi}{dr}(r_m) + \frac{\partial F}{\partial \rho}(\rho_e) \sum_m r_m \frac{d\rho}{dr}(r_m) = 0, \quad (11)$$

Энергия связи на атом определяется выражением

$$-E_c^{(a)} = \frac{1}{2} \sum_m \varphi(r_m) + F(\rho_e).$$

Энергия образования вакансии приближённо может быть вычислена следующим образом:

$$-E_{vf}^{(a)} = \frac{1}{2} \sum_m \varphi(r_m) - \sum_m [F(\rho_e - \rho(r_m)) - F(\rho_e)] \simeq$$

$$\frac{1}{2} \sum_m \varphi(r_m) + \frac{\partial F}{\partial \rho}(\rho_e) \sum_m \rho(r_m) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2}(\rho_e) \sum_m \rho^2(r_m).$$

Также можно вычислить упругие постоянные твёрдого тела. Приближённые значения трёх независимых упругих постоянных вычисляются следующим образом:

$$c_{11}^{(a)} = \frac{1}{V_a} \left\{ \frac{1}{2} \sum_m \frac{x_m^4}{r_m^2} \left(\frac{d^2 \varphi}{dr^2}(r_m) - \frac{1}{r_m} \frac{d\varphi}{dr}(r_m) \right) + \right.$$

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \rho}(\rho_e) \sum_m \frac{x_m^4}{r_m^2} \left(\frac{d^2 \rho}{dr^2}(r_m) - \frac{1}{r_m} \frac{d\rho}{dr}(r_m) \right) + \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2}(\rho_e) \left(\sum_m \frac{x_m^2}{r_m} \frac{d\rho}{dr}(r_m) \right)^2 \right\},$$

$$c_{12}^{(a)} = \frac{1}{V_a} \left\{ \frac{1}{2} \sum_m \frac{x_m^2 y_m^2}{r_m^2} \left(\frac{d^2 \varphi}{dr^2}(r_m) - \frac{1}{r_m} \frac{d\varphi}{dr}(r_m) \right) + \right.$$

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \rho}(\rho_e) \sum_m \frac{x_m^2 y_m^2}{r_m^2} \left(\frac{d^2 \rho}{dr^2}(r_m) - \frac{1}{r_m} \frac{d\rho}{dr}(r_m) \right) + \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2}(\rho_e) \left(\sum_m \frac{x_m^2}{r_m} \frac{d\rho}{dr}(r_m) \right) \left(\sum_m \frac{y_m^2}{r_m} \frac{d\rho}{dr}(r_m) \right) \right\},$$

$$c_{44}^{(a)} = \frac{1}{V_a} \left\{ \frac{1}{2} \sum_m \frac{x_m^2 y_m^2}{r_m^2} \left(\frac{d^2 \varphi}{dr^2}(r_m) - \frac{1}{r_m} \frac{d\varphi}{dr}(r_m) \right) + \right.$$

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \rho}(\rho_e) \sum_m \frac{x_m^2 y_m^2}{r_m^2} \left(\frac{d^2 \rho}{dr^2}(r_m) - \frac{1}{r_m} \frac{d\rho}{dr}(r_m) \right) + \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2}(\rho_e) \left(\sum_m \frac{x_m y_m}{r_m} \frac{d\rho}{dr}(r_m) \right)^2 \right\},$$

где V_a — атомный объём. Тогда приближённое значение модуля всестороннего сжатия равно

$$B^{(a)} = \frac{1}{9V_a} \left\{ \frac{1}{2} \sum_m \left(r_m^2 \frac{d^2 \varphi}{dr^2}(r_m) - r_m \frac{d\varphi}{dr}(r_m) \right) + \right.$$

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \rho}(\rho_e) \sum_m \left(r_m^2 \frac{d^2 \rho}{dr^2}(r_m) - r_m \frac{d\rho}{dr}(r_m) \right) + \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2}(\rho_e) \left(\sum_m r_m \frac{d\rho}{dr}(r_m) \right)^2 \right\}.$$

Процедура параметризации состоит из трёх частей:

- (1) для различных пар значений (α, β) вычисляются значения $\gamma, \rho_e, F(\rho_e), F'(\rho_e), F''(\rho_e)$ при которых выполняется условие (11) и

$$(E_c - E_c^{(a)})^2 + (E_{vf} - E_{vf}^{(a)})^2 + (B - B^{(a)})^2 = 0,$$

- (2) определяется множество пар значений (α, β) при которых выполняется условие $\gamma > 0$ и условия (6)-(8) для $\rho = \rho_e$,
- (3) из полученного множества выбирается пара оптимальных значений (α, β) при которых величина

$$(c_{11} - c_{11}^{(a)})^2 + (c_{12} - c_{12}^{(a)})^2 + (c_{44} - c_{44}^{(a)})^2$$

принимает минимальное значение.

Коэффициенты c_n функции вложенной энергии (9) определяются из условия (5), вычисленных значений ρ_e , $F(\rho_e)$, $F'(\rho_e)$, $F''(\rho_e)$ и условия $F'''(2\rho_e) = \delta$. Величина δ подбирается так, чтобы зависимость энергии кристалла E от параметра решётки a^* наилучшим образом приближала уравнение состояния Rose *et al* [18] при $0.8a < a^* < 1.6a$.

При параметризации учитывалось влияние только ближайших атомов, при этом радиус усечения задавался равным $2a$ для ГЦК и ОЦК металлов, и $2c$ для ГПУ металлов. Далее приводятся результаты параметризации для трёх металлов с различными кристаллическими структурами. Значения физических величин, используемых для нахождения параметров α и β для этих металлов, приведены в Таблице 1.

ТАБЛИЦА 1

Величина	Al(ГЦК)	Fe(ОЦК)	Mg(ГПУ)
a , Å	4,05 [19]	2,87 [19]	3,176 [19]
c , Å	-	-	5,145 [19]
E_c , эВ	3,34 [19]	4,28 [19]	1,519 [19]
E_{vf} , эВ	0,64 [20]	1,6 [21]	0,58 [22]
B , эВ/Å ³	0,451 [23]	1,052 [23]	0,2306 [23]
c_{11} , эВ/Å ³	0.6688 [23]	1.4766 [23]	0.3969 [23]
c_{12} , эВ/Å ³	0.3813 [23]	0.8486 [23]	0.1644 [23]
c_{44} , эВ/Å ³	0.1813 [23]	0.7545 [23]	0.1150 [23]
Q , e	13	26	12

Вычисленные параметры парного потенциала взаимодействия приведены в Таблице 2. Распределение электронной плотности для рассмотренных атомов показано на рис. 1. Зависимость энергии парного взаимодействия двух атомов от расстояния показана на рис. 2. Вычисленные коэффициенты функций $F(\rho)$ приведены в Таблице 3. Зависимость энергии F от безразмерной плотности $\rho^* = \rho/\rho_e$ показана на рис. 3.

ТАБЛИЦА 2. Параметры парного потенциала взаимодействия

Параметр	Al(ГЦК)	Fe(ОЦК)	Mg(ГПУ)
α , 1/Å	1.8206	2.1025	1.4798
β , 1/Å	-2.452	-2.7959	-3.1749
ε , эВ	4.59254	13.21523	4.77938
a_{-1}	1	1	1
a_0	0.725	0.72551	0.71066
a_1	0.9248	0.93268	0.72737
a_2	0.05880	0.05959	0.03888
a_3	-0.01504	-0.01506	-0.01427
a_4	-1.977305E-03	-1.982755E-03	-1.818449E-03
a_5	-1.954224E-04	-1.963332E-04	-1.692550E-04
a_6	-1.357733E-05	-1.372200E-05	-1.002825E-05

Поверхностная энергия является одним из основных свойств поверхностей металлов. Она может быть вычислена следующим образом:

$$E_s = \frac{1}{S} (E_l(N) - E_b(N)),$$

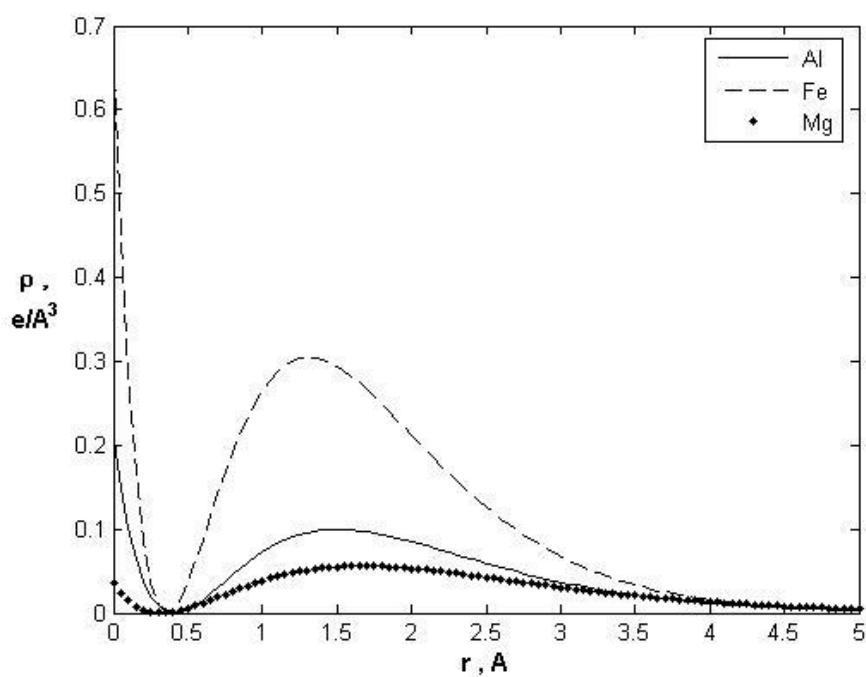


РИС. 1. Распределение электронной плотности атома

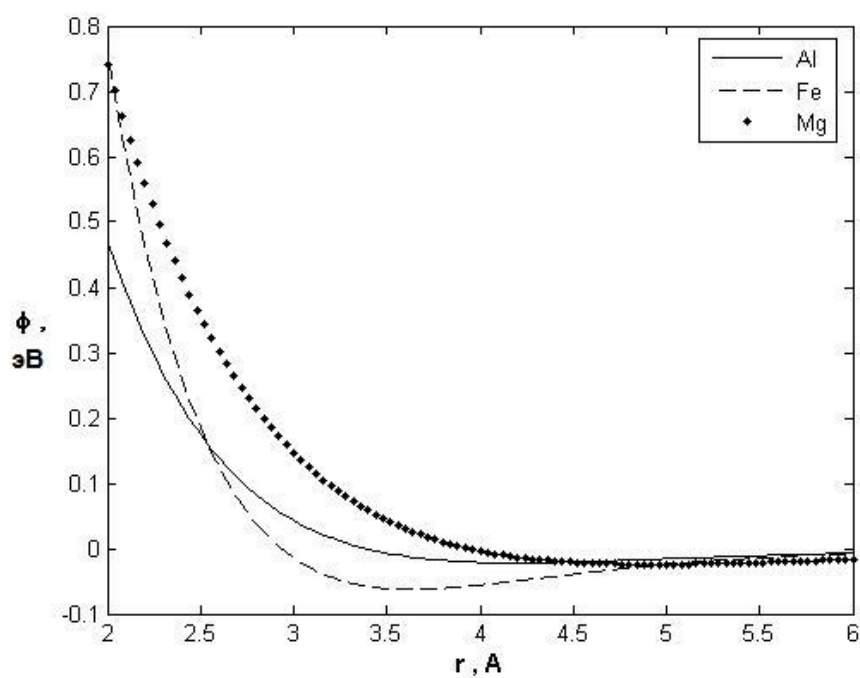
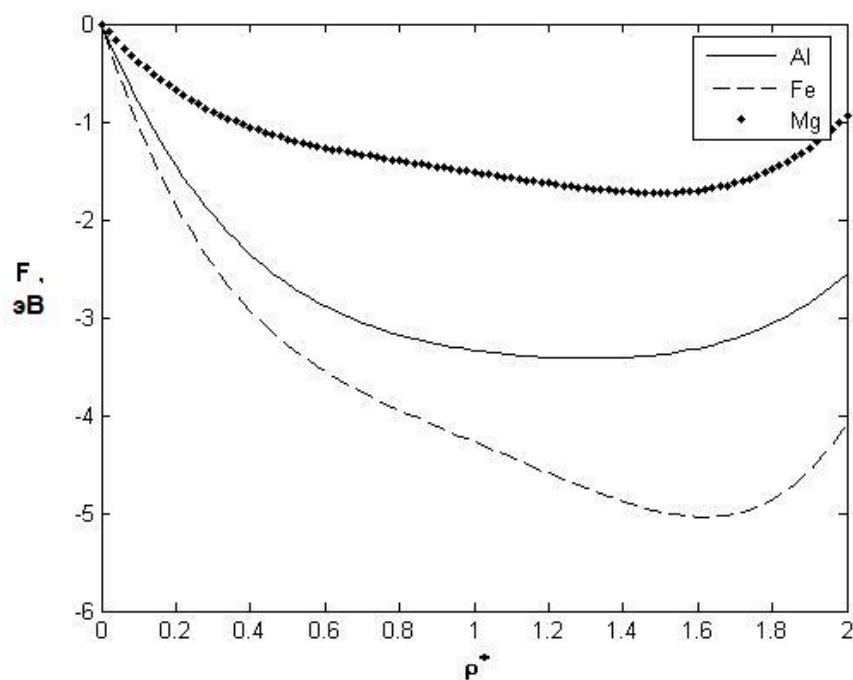


РИС. 2. Зависимость энергии парного взаимодействия от расстояния

РИС. 3. Зависимость энергии F от безразмерной электронной плотностиТАБЛИЦА 3. Параметры функции $F(\rho)$

Параметр	Al(ГЦК)	Fe(ОЦК)	Mg(ГПУ)
$\rho_e, \text{e}/\text{\AA}^3$	0.67022	1.81908	0.40755
$c_0, \text{эВ}$	-3.337719	-4.27535	-1.51658
$c_1, \text{эВ}$	-0.53775	-1.59524	-0.57753
$c_2, \text{эВ}$	1.01860	1.075809E-03	5.626435E-04
$c_3, \text{эВ}$	-0.73678	-0.44412	1.115650E-01
$c_4, \text{эВ}$	1.04460	2.23491	1.05005

где $E_b(N)$ — энергия N атомов в неограниченном теле, $E_l(N)$ — энергия N атомов в бесконечном слое и S — площадь поверхности слоя содержащего N атомов. Толщина слоя задавалась равной $7a$ для Al и Fe, и $7c$ для Mg.

В Таблице 4 приведено сравнение экспериментальных и вычисленных значений основных параметров металлов. Первая строка соответствует экспериментальным значениям, вторая — вычисленным значениям. Число в круглых скобках означает индекс Миллера поверхности, а символ «*» означает поликристаллическую поверхность.

4. Заключение

В работе предложен потенциал межатомного взаимодействия для чистых металлов. Для определения параметров взаимодействия в конкретном металле требуется подобрать всего два параметра распределения электронной плотности. Это значительно облегчает обобщение предложенного потенциала на случай взаимодействия между атомами различных металлов. В качестве примера приводятся параметры потенциала взаимодействия для

ТАБЛИЦА 4. Вычисленные значения физических параметров

Величина	Al(ГЦК)	Fe(ОЦК)	Mg(ГПУ)
E_c , эВ	3,34 3,34	4,28 4,28	1,519 1,519
E_v^f , эВ	0,64 0,64	1,6 1,6	0,58 0,58
B , эВ/Å ³	0,451 0,451	1,052 1,052	0,2306 0,2306
c_{11} , эВ/Å ³	0.6688 0.6688	1.4766 1.5542	0.3969 0.4000
c_{12} , эВ/Å ³	0.3421 0.3421	0.8486 0.8009	0.1644 0.1624
c_{44} эВ/Å ³	0.1813 0.1816	0.7545 0.6036	0.1150 0.0940
E_s , Дж/м ²	1.28(100)[24], 1.16(*)[20] 1.24(100)	2.48(*) [20] 3.05(100)	0.785(0001) [25] 0.929(0001)

Al, Fe и Mg, которые представляют три основные кристаллические структуры, наблюдаемые в металлах. Наблюдается хорошее соответствие между вычисленными и экспериментальными значениями различных физических параметров металлов. Из процедуры параметризации следует, что вычисленные значения энергии связи, энергии образования вакансии и модуля объёмного сжатия равны экспериментальным значениям этих параметров. Вычисленные значения упругих постоянных c_{11} и c_{12} незначительно отличаются от их экспериментальных значений. Менее точно вычисляются значения упругой постоянной c_{44} для Fe и Mg. Для выбранных металлов предложенный потенциал взаимодействия позволяет довольно точно оценить поверхностную энергию.

Точность описания свойств металлов с помощью предложенного потенциала ограничивается погрешностями самого метода вложенного атома и также зависит от того насколько точно предложенное распределение электронной плотности описывает распределение электронной плотности реального атома.

Приведённая процедура параметризации позволяет определить параметры потенциала, которые дают достаточно точные результаты при моделировании явлений, когда средняя электронная плотность системы атомов близка к равновесной. Применение потенциала с этими параметрами для моделирования явлений, когда ρ/ρ_e мало (например, малые кластеры, процессы напыления) даёт менее точные результаты. В этом случае для определения параметров потенциала следует применять процедуру параметризации, основанную на других условиях (например, имеются обширные данные по длине и энергии связи димеров металлов).

Литература

- [1] Daw M.S. and Baskes M.I. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals // Phys. Rev. Letters. — 1983. — 50(17). — 1285.
- [2] Daw M.S. and Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Phys. Rev. B. — 1983. — 29. — 6443.
- [3] Finnis M. W. and Sinclair J. E. A simple empirical N-body potential for transition metals // Phil. Mag. A. — 1984. — 50(1). — 45.
- [4] Sutton A. P. and Chen J. Long-range Finnis–Sinclair potentials // Phil. Mag. Letters. — 1990. — 61(3). — 139.

- [5] Ercolessi F., Tosatti E. and Parrinelo M. Au (100) surface reconstruction // *Phys. Rev. Letters*. — 1986. — 57(6). — 719.
- [6] Ercolessi F., Parrinelo M. and Tosatti E. Simulation of gold in the glue model // *Phil. Mag. A*. — 1988. — 58(1). — 213.
- [7] Foiles S.M., Baskes M.I. and Daw M.S. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // *Phys Rev B*. — 1986. — 33(12). — 7983.
- [8] Johnson R.A. Analytic nearest-neighbor model for fcc metals // *Phys Rev B*. — 1988. — 37(8). — 3924.
- [9] Doyama M., Kogure Y., Embedded atom potentials in fcc and bcc metals // *Comput. Mater. Science*. — 1999. — 14(1–4), 80.
- [10] Dai X.D., Kong Y., Li L.H. and Lin B.X. Extended Finnis-Sinclair potential for bcc and fcc metals and alloys // *J. Phys.: Condensed Matter*. — 2006. — 18. — 4527.
- [11] Karolewski M.A. Tight-binding potentials for sputtering simulations with fcc and bcc metals // *Radiation Effects and Defects in Solids*. — 2001. — 153(3). — 239.
- [12] Cleri F. and Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // *Phys. Rev. B*. — 1993. — 48(1). — 22.
- [13] Shunling Chen, Jincheng Xu, Hongsheng Zhang, A new scheme of many-body potentials for hcp metals // *Comput. Mater. Science*. — 2004. — 29. — 428.
- [14] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. — М.: Наука, 1989.
- [15] Фок В.А., Начала квантовой механики. — М.: Наука, 1976.
- [16] Jones R.O. and Gunnarsson O. The density functional formalism, its application and prospects // *Rev. Mod. Phys.* — 1989. — 61(3). — 689-746.
- [17] Баранов М.А., Дятлова И.В., Бумажникова К.Н., Бразовский В.Е., Электростатическое приближение и его применение к описанию устойчивости многокомпонентных металлических соединений // *Горизонты Образования. Научно-Образовательный Журнал АлтГТУ*. — 2003. — 5. — 26-44.
- [18] Rose J.H., Smith J.R., Guinea F., Ferrante J. Universal features of the equation of state of metals // *Phys. Rev. B*. — 1984. — 29. — 2963–2969.
- [19] Kittel C. Introduction to solid state physics. — New York : Wiley, 1996.
- [20] de Boer F.R., Boom R., Mattens W.C.M., Miedema A.R., Niessen A.K. Cohesion in metals. — Amsterdam: North Holland, 1988.
- [21] Puska M. and Nieminen R.M. In: Density functional methods in chemistry and materials science. — New York: Wiley, 1997.
- [22] Doyama M. and Koehler J.S. The relation between the formation energy of a vacancy and the nearest neighbor interactions in pure and liquid metals // *Acta Metall.* — 1976. — 24(9). — 871-879.
- [23] Simmons R.O. and Wang H. Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties: A Handbook. — Cambridge MA: MIT Press, 1977.
- [24] Jacobs P.W.M., Zhukovskii Yu.F., Mastrikov Yu., Shunin Yu.N. Bulk and surface properties of metallic aluminium: DFT simulations // *Computer Modelling & New Technologies*. — 2002. — 6(1). — 7-28.
- [25] Tyson W.R. and Miller W.A. Surface free energies of solid metals: Estimation from liquid surface tension measurements // *Surface Science*. — 1977. — 62(1). — 267.

ПОГРЕШНОСТИ В «ПРОСЕЯННОМ» КВАНТОВОМ КЛЮЧЕ ПРИ ЕГО ПЕРЕДАЧЕ ПО ОДНОМОДОВОМУ СТОХАСТИЧЕСКОМУ АНИЗОТРОПНОМУ НЕОДНОРОДНОМУ ОПТОВОЛОКНУ

Г. П. Мирошниченко¹, А. А. Сотникова

Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики

¹gpmirosh@gmail.com

Рассмотрена динамика во времени полевой матрицы плотности в базисе состояний вакуума и двух ортогональных поляризаций фотонов. В качестве анализатора использован прибор с пассивной модуляцией состояний распределяемых фотонов и с невозбужденными вспомогательными модами. Ошибки в просеянном ключе могут возникать из-за поглощения и деполяризации фотонов и разброса параметров оптического волокна (ОВ). Найдена средняя по разбросу параметров ОВ относительная ошибка (QBER) в просеянном квантовом ключе, распределенном по протоколу BB84 с поляризационным кодированием информации. Показано, что QBER можно существенно уменьшить, даже при больших дисперсиях случайных параметров ОВ. Найдены условия работы протокола на больших расстояниях, для этого используется эффект поляризационного биеения, который явно выражен, когда среднее значение параметров ОВ превосходит их разброс. Сделан вывод о том, что правильный выбор технологии изготовления ОВ позволит снизить QBER до критического уровня, равного 0.11, ниже которого распределенный ключ можно использовать для целей криптографии.

Ключевые слова: квантовая криптография, шумы в квантовом канале, QBER, оптическое волокно, фотоны, ошибка в квантовом ключе, поляризационное кодирование информации.

1. Введение

Новым направлением современной информатики (науки о методах передачи, хранения и обработки информации) являются оптические квантовые информационные технологии. Квантовая информатика ставит перед теорией передачи информации по квантовому каналу новые задачи. Оптическое волокно (ОВ) используется как информационный канал для передачи классической информации, закодированной с помощью модуляции физических характеристик электромагнитной волны, таких как амплитуда, частота, фаза, поляризация. Теория распределения квантовой информации по ОВ должна быть основана на законах квантовой механики и квантовой оптики. В шредингеровском представлении для описания развития во времени матрицы плотности фотонов $\rho(t)$ необходим гамильтониан оптических мод (фотонов) в одномодовом ОВ, в котором могут распространяться две, перпендикулярно поляризованные волны, фазовый фронт которых близок к плоскому (мода HE_{11}). Для электромагнитной волны ОВ представляет собой неоднородную стохастическую анизотропную среду. Стохастичность среды и квантовые шумы в канале приводят к декогеренции (деполяризации) квантовых состояний фотонов и поглощению фотонов. Просеянный квантовый ключ, переданный по ОВ, содержит ошибки. В литературе степень секретности характеризуют синтетическим параметром — скоростью появления ошибок в квантовых битах (английская аббревиатура QBER) [1], [2], [3]. QBER зависит от различных физических свойств квантового канала, передатчика, приемника, стратегии перехвата

и других характеристик. В частности, QBER зависит от относительной ошибки в квантовом ключе, оставшейся после этапа просеивания. Ошибки в квантовом ключе могут быть обнаружены в процессе процедуры исправления ошибок и усиления секретности. Эти процедуры занимают время, и приводят к потере части переданного ключа. Правильный выбор технологии изготовления оптоволоконного квантового канала позволит снизить ошибки при распределении квантового ключа.

2. Преобразование матрицы плотности фотонов в анизотропном неоднородном одномодовом ОВ

Гамильтониан взаимодействия мод (обобщение классического метода связанных волн) имеет вид

$$\hat{V} = \sum_{\mathbf{k}, \mu, \mu' = H, V} \frac{1}{2} (\xi, \sigma)_{\mu, \mu'} \cdot \hat{b}_{\mathbf{k}\mu}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}\mu'}. \quad (1)$$

Здесь ξ — вещественный вектор, характеризующий взаимодействие ортогонально поляризованных мод с волновым вектором k . Изучим преобразование состояния поля при распространении фотона в ОВ. В качестве базисных состояний выберем три вектора $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle$ (здесь $|0\rangle$ — вакуумное состояние моды, которое необходимо включать в рассмотрение для учета поглощения)

$$|1\rangle = |H\rangle = \hat{b}_{\mathbf{k}\mu=H}^\dagger |0\rangle, \quad |2\rangle = |V\rangle = \hat{b}_{\mathbf{k}\mu=V}^\dagger |0\rangle.$$

С течением времени полевое состояние изменяется согласно квантовому уравнению Лиувилля для шредингеровской матрицы плотности фотонов

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = -i [\hat{V}, \rho(t)] + \hat{\Gamma} \rho(t), \quad \rho(0) = \rho_0. \quad (2)$$

Здесь $\hat{\Gamma}$ — супероператор релаксации, а $\rho(t)$ — матрица плотности фотона в момент времени t . Матрица плотности определяется четырьмя вещественными и двумя комплексными функциями $P(t), \rho_{01}(t), \rho_{02}(t), \mathbf{p}(t)$:

$$\begin{aligned} \rho(t) = & (1 - P(t)) |0\rangle\langle 0| + (\rho_{01}(t) \cdot |0\rangle\langle 1| + \rho_{02}(t) \cdot |0\rangle\langle 2| + \{H.C\}) + \\ & + \frac{1}{2} (P(t) (|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|) + (\mathbf{p}(t), \sigma)) \end{aligned}$$

Предполагается, что характер релаксации изотропный, учитывается поглощение фотонов, может стремиться к нулю степень поляризации поля (длина вектора $\mathbf{p}(t)$). Система уравнений для функций $P(t), \rho_{01}(t), \rho_{02}(t), \mathbf{p}(t)$ имеет вид

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} P(t) = -\delta \cdot P(t), \\ \frac{d}{dt} \rho_{01}(t) = -\left(\frac{i}{2} \xi_z + \gamma_{01}\right) \rho_{01}(t) + \frac{i}{2} (\xi_x + i \xi_y) \rho_{02}(t), \\ \frac{d}{dt} \rho_{02}(t) = -\left(\frac{i}{2} \xi_z + \gamma_{02}\right) \rho_{02}(t) + \frac{i}{2} (\xi_x - i \xi_y) \rho_{01}(t), \\ \frac{d}{dt} \mathbf{p}(t) = [\xi \times \mathbf{p}(t)] - \hat{\gamma} \cdot \mathbf{p}(t). \end{cases}$$

Здесь введены феномологические скорости поглощения и деполяризации. Естественно предположить изотропный механизм деполяризации

$$\hat{\gamma}_{\alpha, \beta} = (\delta + \gamma) \delta_{\alpha, \beta}, \quad \delta + \gamma \geq \delta \geq 0,$$

$\delta + \gamma$ — скорость деполяризации, δ — скорость поглощения фотонов, γ_{01}, γ_{02} — скорости разрушения корреляций с вакуумом. Решение системы уравнений имеет вид

$$\begin{aligned} P(t) &= \exp(-\delta t) P(0), \\ \rho_{01}(t) &= c_1 \exp\left(-\frac{2\gamma_{01} + \sqrt{i(\xi_z^2 - \xi_x^2 - \xi_y^2)}}{2}t\right) + c_2 \exp\left(-\frac{2\gamma_{01} - \sqrt{i(\xi_z^2 - \xi_x^2 - \xi_y^2)}}{2}t\right), \\ \rho_{02}(t) &= \frac{1}{\xi_x + i\xi_y} \left(i\xi_z \rho_{01}(t) + 2\gamma_{01} \rho_{01}(t) + 2\overline{\rho_{01}(t)} \right), \\ \mathbf{p}(t) &= \exp(-(\delta + \gamma)t) W(\xi, t) \mathbf{p}(0). \end{aligned}$$

Здесь $W(\xi, t)$ — матрица преобразования вектора при повороте системы координат на угол $\omega = \xi t$ вокруг оси $\mathbf{n}$, где $\xi = \xi \mathbf{n}$. В качестве анализатора используем прибор с пассивной модуляцией с вакуумными вспомогательными модами, изображенный на рис. 1. Расчет показывает, что вероятности P_1, P_2, P_3, P_4 срабатывания детекторов D_1, D_2, D_3, D_4 записываются через найденные решения

$$P_1 = \frac{P(t) + \mathbf{p}_z(t)}{4}, \quad P_2 = \frac{P(t) + \mathbf{p}_x(t)}{4}, \quad P_3 = \frac{P(t) - \mathbf{p}_z(t)}{4}, \quad P_4 = \frac{P(t) - \mathbf{p}_x(t)}{4}.$$

Будем считать, что Алиса с равной вероятностью $1/4$ генерирует одно из четырех состояний и посылает их Бобу на анализатор через шумящий канал (учитываем возможный вклад вакуумного состояния):

$$\begin{aligned} |\Psi^{(1)}\rangle &= \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad |\Psi^{(2)}\rangle = \alpha|0\rangle + \frac{\beta}{\sqrt{2}}(|2\rangle + |1\rangle), \\ |\Psi^{(3)}\rangle &= \alpha|0\rangle + \beta|2\rangle, \quad |\Psi^{(4)}\rangle = \alpha|0\rangle + \frac{\beta}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |1\rangle). \end{aligned}$$

Для этих состояний начальные данные имеют вид

$$\begin{aligned} P(0) &= |\beta|^2, \quad \mathbf{p}^{(1)}(0) = |\beta|^2 \mathbf{e}_z, \quad \mathbf{p}^{(4)}(0) = -\mathbf{p}^{(2)}(0), \\ \mathbf{p}^{(2)}(0) &= |\beta|^2 \mathbf{e}_x, \quad \mathbf{p}^{(3)}(0) = -\mathbf{p}^{(1)}(0). \end{aligned}$$

Расчет показывает, что полная вероятность ошибки при передаче одного (любого) кубита равна

$$\begin{aligned} P_{err} &= \frac{1}{4} \left(P(t) - \frac{\mathbf{p}_z^{(1)}(t) + p_x^{(2)}(t)}{2} \right) = \\ &= \exp(-\delta t) \frac{|\beta|^2}{4} \left(1 - \frac{W_{x,x}(\xi, t) + W_{z,z}(\xi, t)}{2} \exp(-\gamma t) \right). \end{aligned}$$

Средняя длина просеянного ключа N_{sift} , выраженная через N — полное число посылок.

$$N_{sift} = \frac{N}{2} P_{det} = \frac{N}{2} |\beta|^2 \exp(-\delta t).$$

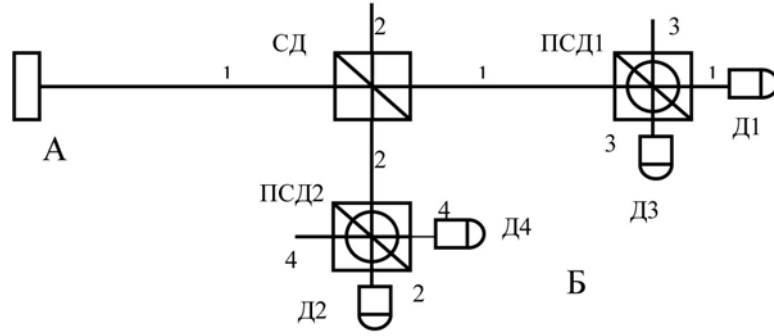


Рис. 1. Схема установки распределения квантового ключа по протоколу BB84. А – передатчик Алисы, Б – анализатор Боба, СД – светоделитель, ПСД1 – поляризационный светоделитель (пропускается состояние $|H\rangle$, отражается состояние $|V\rangle$), ПСД2 – поляризационный светоделитель (пропускается состояние $\frac{|H\rangle+|V\rangle}{\sqrt{2}}$, отражается состояние $\frac{|H\rangle-|V\rangle}{\sqrt{2}}$), Д1, Д2, Д3, Д4 – фотодетекторы. Цифрами пронумерованы входы и выходы светоделителей

3. Учет стохастичности параметров ОВ

Будем полагать, что плотность вероятности компонент случайного вектора параметров оптоволокна ξ имеет вид

$$\Omega(\xi) = \frac{1}{\sigma^3 (2\pi)^{3/2}} \exp\left(-\frac{|\xi - \bar{\xi}|^2}{2\sigma^2}\right).$$

Средний вектор Блоха-Стокса имеет вид

$$\bar{\mathbf{p}}(t) = \exp(-(\delta + \gamma)t) \bar{W}(\xi, t) \mathbf{p}(0), \quad \bar{W}(\xi, t) = \iiint \Omega(\xi) W(\xi, t) dV_\xi.$$

Упрощенное выражение для матрицы $W(t)$ получим в двух случаях. Первый случай – $\bar{\xi} > \sigma$ – сильное взаимодействие мод, малый разброс параметров ОВ. Тогда, в старшем порядке по параметру $\sigma/\bar{\xi}$

$$\bar{W}(t)_{x,x} \approx \cos(\bar{\xi}t) \exp\left(-\frac{(\sigma t)^2}{2}\right), \quad \bar{W}(t)_{z,z} \approx 1. \quad (3)$$

Второй случай – $\bar{\xi} < \sigma$ – малое взаимодействие мод по отношению к разбросу параметров ОВ. Тогда, в старшем порядке по параметру $\bar{\xi}/\sigma$

$$\bar{W}(t)_{x,x} \approx \bar{W}(t)_{z,z} \approx \frac{1}{3} \left(1 + 2(1 - (\sigma t)^2) \exp\left(-\frac{(\sigma t)^2}{2}\right) \right). \quad (4)$$

Оценим зависимость средней по ансамблю отрезков ОВ вероятности ошибки в передаче кубита информации по протоколу BB84 от параметров.

4. Обсуждение результатов и заключение

Используем правило подсчета вероятности Бернулли, получим соотношение для средней относительной ошибки (QBER) в переданном квантовом ключе (среднее число

ошибок в просеянном ключе длиной $N/2$ по отношению к длине просеянного ключа): $QBER = \frac{N \cdot P_{err}}{N_{sift}}$.

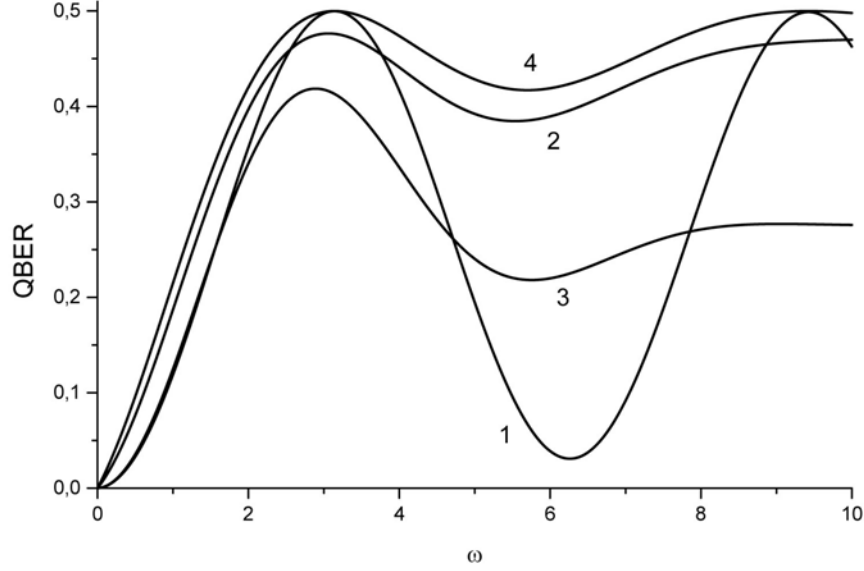


Рис. 2. Зависимость средней относительной ошибки в просеянном квантовом ключе QBER при условии $\sigma/\bar{\xi} \ll 1$ в зависимости от угла $\omega = \bar{\xi}t$, здесь σ — среднее квадратичное отклонение параметров оптоволокну, t — время задержки сигнала в квантовом канале, $\bar{\xi}$ — среднее значение модуля векторного параметра оптоволокну, γ — скорость деполаризации излучения. Кривая 1 — $\sigma/\bar{\xi} = 0.01$, $\gamma/\bar{\xi} = 0.01$; кривая 2 — $\sigma/\bar{\xi} = 0.2$, $\gamma/\bar{\xi} = 0.2$; кривая 3 — $\sigma/\bar{\xi} = 0.3$, $\gamma/\bar{\xi} = 0.01$; кривая 4 — $\sigma/\bar{\xi} = 0.01$, $\gamma/\bar{\xi} = 0.3$

На рис.2 зависимость средней относительной ошибки от угла рассчитана по формуле

$$QBER = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{2} \left(1 + \cos(\omega) \cdot \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{\sigma}{\bar{\xi}} \omega \right)^2 \right) \right) \exp \left(-\frac{\gamma}{\bar{\xi}} \omega \right) \right). \quad (5)$$

Как известно, QBER не должен превышать 0.11, в противном случае секретность квантового ключа не гарантируется. Как следует из рис. 2, при условии $\sigma \ll \bar{\xi}$ такое значение QBER достигается при малых значениях $\omega = \bar{\xi}t \ll 1$ и при больших значениях $\omega = \bar{\xi}t \approx 2\pi$, при условии $\gamma/\bar{\xi} < 0.04$.

На рис. 3 зависимость средней относительной ошибки от угла рассчитана по формуле

$$QBER = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{3} \left(1 + 2(1 - \omega^2) \exp \left(-\frac{\omega^2}{2} \right) \right) \exp \left(-\frac{\gamma}{\sigma} \omega \right) \right). \quad (6)$$

5. Выводы

В работе рассмотрена динамика во времени однофотонной матрицы плотности в базисе состояний с ортогональными поляризациями.

Найдена средняя по разбросу параметров ОВ относительная ошибка (QBER) в просеянном квантовом ключе, распределенном по протоколу BB84 с поляризационным кодированием информации.

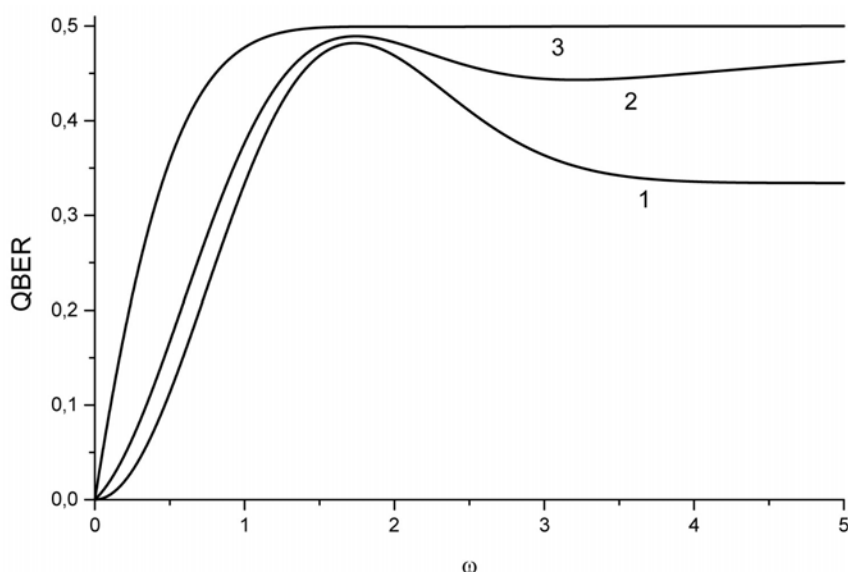


РИС. 3. Зависимость средней относительной ошибки в просеянном квантовом ключе QBER при условии $\bar{\xi}/\sigma \ll 1$ в зависимости от угла $\omega = \sigma t$, здесь σ — среднее квадратичное отклонение параметров оптоволокна, t — время задержки сигнала в квантовом канале, $\bar{\xi}$ — среднее значение модуля векторного параметра оптоволокна, γ — скорость деполяризации излучения. Кривая 1 — $\gamma/\sigma = 0.001$; кривая 2 — $\gamma/\sigma = 0.3$; кривая 3 — $\gamma/\sigma = 2$. QBER не превышает 0.11 при условии $\omega = \sigma t \ll 0.5$

В работе сделан вывод о том, что правильный выбор технологии изготовления ОВ квантового канала позволит снизить QBER до критического уровня, равного 0.11, ниже которого распределенный ключ можно использовать для целей криптографии.

Работа поддержана АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2011 годы)» (проект № 2.1.1/9425), ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы» (контракты НК-526Р, 14.740.11.0879, 16.740.11.0030), грантом 11-08-00267 РФФИ.

Литература

- [1] Castelletto S., Degiovanni I. P., Rastello M. L. Quantum and classical noise in practical quantum-cryptography systems based on polarization-entangled photons // Phys. Rev. A. — 2003. — 67. — P. 022305.
- [2] Gisin N., Ribordy G., Tittel W., Zbinden H. Quantum cryptography // Rev. Mod. Phys. — 2002. — 74. — P. 145–195.
- [3] Scarani V., Bechmann-Pasquinucci H., Cerf N.J., Dusek M., Lutkenhaus N., Peev M. The security of practical quantum key distribution // Rev. Mod. Phys. — 2009. — 81. — P. 1301–1350.

МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ДИСКРЕТНАЯ МОДЕЛЬ НЕИДЕАЛЬНОГО ФОТОДЕТЕКТОРА

Г. П. Мирошниченко¹, А. И. Трифанов²

Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики

¹ gpmirosh@gmail.com, ² alextrifanov@gmail.com

Исследован процесс дискретного фотодетектирования в предположении о неидеальности детектора атомов-зондов. Предложена неортогональная система операторозначных мер, описывающая процесс измерения и построены трансформеры атомных и полевых состояний.

Ключевые слова: фотодетектирование, ионизационная камера, резонаторное взаимодействие, редукция состояния, разложение Крауса.

1. Введение

Проблема измерения [1, 2] является фундаментальной в квантовой физике и играет важную роль в различных ее приложениях. В настоящее время широко исследуются возможности томографии квантовых процессов [3, 4] и состояний [5, 6] а также варианты реконструкции операторных мер детектора [7]. Измерительное устройство является обязательным атрибутом квантового компьютера и систем квантовых коммуникаций [8, 9].

Для передачи квантовой информации наиболее перспективными выглядят оптические информационные технологии [10]. В них для получения информации о состоянии канала передачи используется фотодетектирование. Фундамент теории измерения квантового электромагнитного поля составляют работы [11–13]. Дальнейшее развитие данной теории можно найти в работах [14–16]. Изучены модели внутреннего [17] и внешнего [18] (по расположению детектора) фотодетектирования для дискретных [19, 20] и непрерывных [21–24] процессов. В работах [23] и [24] исследуются операторы квантовых скачков, связанных с поглощением фотона в результате измерения и учитывается влияние неидеальности детектирующего устройства [25] («темновые» срабатывания) на статистику фотоотсчетов.

В дискретной модели (см. также работы посвященные одноатомному мазеру [26, 27]) развиты методы исследования статистических характеристик ЭМ поля [28], а также их приложения к некоторым протоколам квантовых коммуникаций [29]. В данном методе измерения состояние моды резонатора тестируется при помощи двухуровневых атомов-зондов. Данные атомы, приготовленные в некотором состоянии, пролетают через резонатор, «собирая» информацию о квантовой моде. На выходе происходит их измерение в селективном детекторе (ионизационной камере). В зависимости от состояния, влетающего в резонатор атома (основное или возбужденное) различают два режима работы измерительного устройства — фотонный и квантовый счетчик. Фотонный счетчик реализуется, когда атом приготавливается в основном состоянии, квантовый счетчик — в случае изначально возбужденного состояния атома. Информативность, качество (fidelity) и обратимость данных двух режимов детектирования изучены в работе [30].

Здесь мы исследуем неидеальность детектирующего устройства в дискретной модели, реализующей фотонный счетчик. Несовершенство измерения предполагает возможности пропустить атом, а также получить неверную информацию о его состоянии. Вероятности такого рода ошибок легко получить из эксперимента. Например, приготавливая атом в основном состоянии, вычислить частоту срабатываний камеры, детектирующих возбужденное состояние и наоборот. Природа таких ошибок может быть следующей. После попадания атома в ионизационную камеру, происходит фотоионизация его уровней в результате их взаимодействия с классическими полями детекторов. Возникающий фототок провоцирует щелчок соответствующего детектора, который говорит о том, в каком состоянии найден атом. Наличие двух полей, взаимодействующих с атомом, может приводить к тому, что под действием одного из них произойдет изменение заселенности уровней атома, которое приведет к ошибочной статистике отсчетов.

Структура работы организована следующим образом. В разделе 2 строятся вероятностные меры для устройства детектирования состояния атома. Получены соответствующие этим мерам супероператоры и их разложения Крауса. Предложены трансформеры состояний, соответствующие неидеальному устройству детектирования. В разделе 3 вводится вероятностная мера в пространстве состояний поля резонатора и производится построение соответствующих операторов. Раздел 4 содержит описание детектирования однофотонной моды резонатора. На основе теоремы Байеса производится переоценка вероятностей гипотез относительно исходного состояния поля. В разделе 5 в заключении обсуждаются полученные результаты.

2. Параметризация неидеального детектора

Рассмотрим процесс измерения на примере детектирования двухуровневого атома, попадающего в ионизационную камеру. Наблюдаемой величиной в эксперименте является его состояние: основное $|g\rangle$ или возбужденное $|e\rangle$. Оператору соответствующей наблюдаемой сопоставляется полный набор спектральных проекторов P_j^A , $j \in \{e, g\}$:

$$P_g^A + P_e^A = I_A, \quad (1)$$

где I_A — оператор тождественного преобразования, а проекторы P_j^A , $j \in \{e, g\}$ определяются следующим образом:

$$P_g^A = |g\rangle \langle g|, P_e^A = |e\rangle \langle e|. \quad (2)$$

Результат измерения данной наблюдаемой можно описывать при помощи случайной величины ξ принимающей три возможных значения: $\xi = 1$ соответствует тому, что атом обнаружен первым детектором, настроенным на измерение состояния $|g\rangle$; $\xi = 2$ — атом обнаружен вторым детектором, настроенным на измерение возбужденного состояния $|e\rangle$; $\xi = 0$ — атом пропущен из-за несовершенства измерительного устройства. Данной случайной величине, характеризующей процесс измерения, сопоставим полный набор неортогональных операторных мер Π_ξ , $\xi = 0, 1, 2$, таких что:

$$\Pi_0 + \Pi_1 + \Pi_2 = I_A. \quad (3)$$

При этом:

$$\Pi_1 + \Pi_2 = \varepsilon_g |g\rangle \langle g| + \varepsilon_e |e\rangle \langle e|, \quad (4)$$

$$\Pi_0 = (1 - \varepsilon_g) |g\rangle \langle g| + (1 - \varepsilon_e) |e\rangle \langle e|. \quad (5)$$

Величины ε_g и ε_e определяют квантовые эффективности детекторов и являются вероятностями обнаружить атом первым или вторым детектором соответственно. Припишем атому

в момент измерения состояние ρ_A . Тогда вероятность исхода эксперимента, описываемого случайной величиной ξ будет равна:

$$P(\xi) = \text{Tr}_A [\rho_A \Pi_\xi]. \quad (6)$$

Здесь Tr_A обозначает операцию взятия следа в пространстве атомных состояний. Квантовая операция Λ_ξ , соответствующая измерению с исходом ξ вводится следующим образом:

$$\text{Tr}_A [\Lambda_\xi \rho_A] = \text{Tr}_A [\rho_A \Pi_\xi], \quad (7)$$

$$\Lambda_\xi \rho_A = \sum_k M_{\xi,k} \rho_A M_{\xi,k}^\dagger, \quad (8)$$

где $M_{\xi,k}$ — набор ограниченных операторов (трансформеров состояний):

$$\sum_k M_{\xi,k}^\dagger M_{\xi,k} = \Lambda_\xi^* I = \Pi_\xi. \quad (9)$$

Здесь Λ_ξ^* — супероператор, сопряженный Λ_ξ . Теперь учтем возможность того, что атом, приготовленный в состоянии $|e\rangle$ попав в камеру, вызывает событие, описываемое случайной величиной $\xi = 1$. И наоборот, когда атом, приготовленный в состоянии $|g\rangle$ вызывает событие описываемое случайной величиной $\xi = 2$. Для этого введем соответствующие условные вероятности $P(\xi = 1|e) = |\alpha_{1,e}|^2$, $P(\xi = 2|g) = |\alpha_{2,g}|^2$, которые определяются из эксперимента. Далее запишем формулу полной вероятности для случайной величины ξ :

$$P(\xi) = P(\xi|g)P(g) + P(\xi|e)P(e), \quad (10)$$

где $P(g) = \text{Tr}_A [\rho_A P_g^A]$, $P(e) = \text{Tr}_A [\rho_A P_e^A]$. Пользуясь (4), (6) и (10) выберем в качестве выражений для операторных мер следующие:

$$\Pi_1 = |\alpha_{1,g}|^2 |g\rangle\langle g| + |\alpha_{1,e}|^2 |e\rangle\langle e|, \quad (11)$$

$$\Pi_2 = |\alpha_{2,e}|^2 |e\rangle\langle e| + |\alpha_{2,g}|^2 |g\rangle\langle g|, \quad (12)$$

где $|\alpha_{1,g}|^2 + |\alpha_{2,g}|^2 = \varepsilon_g$, $|\alpha_{1,e}|^2 + |\alpha_{2,e}|^2 = \varepsilon_e$. Для случая $\xi = 0$ в дальнейшем удобно определить $|\alpha_{0,g}|^2 = 1 - \varepsilon_g$ и $|\alpha_{0,e}|^2 = 1 - \varepsilon_e$. Далее, используя операторы Крауса, операторные меры Π_ξ можно записать в виде:

$$\Pi_\xi = \sum_{\mu, \nu \in \{g, e\}} M_{\xi, \mu\nu}^\dagger M_{\xi, \mu\nu}. \quad (13)$$

Каждый из операторов $M_{\xi, \mu\nu}$ в разложении (13) описывает определенный процесс внутри ионизационной камеры: $M_{\xi, gg} = \alpha_{\xi, gg} |g\rangle\langle g|$ соответствует детектированию атома, находящегося в состоянии $|g\rangle$ детектором с номером ξ ($\xi = 1, 2$); аналогично $M_{\xi, ee} = \alpha_{\xi, ee} |e\rangle\langle e|$ соответствует детектированию атома, находящегося в состоянии $|e\rangle$ детектором с номером ξ ; $M_{\xi, ge} = \alpha_{\xi, ge} |e\rangle\langle g|$ описывает скачок $|g\rangle \rightarrow |e\rangle$ под действием классического поля детектора ξ , а $M_{\xi, eg} = \alpha_{\xi, eg} |g\rangle\langle e|$ — скачок $|e\rangle \rightarrow |g\rangle$ под действием классического поля детектора ξ . Физический смысл операторов $M_{\xi, \mu\nu}$ в случае $\xi = 0$ заключается в следующем: $M_{0, gg}$ атом в основном состоянии пропущен, $M_{0, ee}$ — атом в возбужденном состоянии пропущен, $M_{0, eg}$ и $M_{0, ge}$ — атом не детектируется но под действием классических полей детекторов происходит скачок $|g\rangle \rightarrow |e\rangle$ или $|e\rangle \rightarrow |g\rangle$. Из (11) и (12) получим:

$$|\alpha_{\xi, gg}|^2 + |\alpha_{\xi, ge}|^2 = |\alpha_{\xi, g}|^2, \quad |\alpha_{\xi, ee}|^2 + |\alpha_{\xi, eg}|^2 = |\alpha_{\xi, e}|^2. \quad (14)$$

Выражение для $P(\xi)$ в форме (6) можно записать тогда следующим образом:

$$P(\xi) = \text{Tr}_A [\rho_A \Pi_\xi] = \text{Tr}_A \left[\sum_{\mu, \nu \in \{g, e\}} M_{\xi, \mu \nu} \rho_A M_{\xi, \mu \nu}^\dagger \right] \quad (15)$$

Заметим, что в выражении (13) могут быть учтены и процессы вида $|e\rangle |g\rangle \langle e| \langle g|$ но их вероятности малы по сравнению с вероятностями описанных выше процессов.

3. Процесс фотодетектирования

Теперь рассмотрим процесс фотодетектирования электромагнитного поля в резонаторе с использованием двухуровневого атома-зонда. Пусть состояние атомно-полевой системы в момент, когда атом попадает в резонатор и подвергается измерению, описывается совместной матрицей плотности ρ_{AF} . В результате измерения атома, согласно проекционному постулату фон Неймана, происходит коллапс его состояния и система описывается следующей матрицей плотности:

$$\tilde{\rho}_{AF} = \sum_{\xi=0}^2 (\Lambda_\xi \otimes I_F) \rho_{AF} = \sum_{\xi=0}^2 \sum_{\mu, \nu \in \{g, e\}} M_{\xi, \mu \nu} \rho_{AF} M_{\xi, \mu \nu}^\dagger \quad (16)$$

Игнорируя показания детектора, можно получить редуцированную матрицу плотности моды полного ансамбля, взяв след в пространстве атомных состояний:

$$\rho_F = \text{Tr}_A [\tilde{\rho}_{AF}]. \quad (17)$$

Дополнительная информация о состоянии вылетевшего из резонатора атома может быть использована для расщепления полного ансамбля на подансамбли, каждый из которых соответствует одному из результатов измерения ξ :

$$\tilde{\rho}_F^{[\xi]} = \text{Tr}_A \left[\sum_{\mu, \nu \in \{g, e\}} M_{\xi, \mu \nu} \rho_{AF} M_{\xi, \mu \nu}^\dagger \right]. \quad (18)$$

Соответствующая вероятность получения данного подансамбля равна:

$$P(\xi) = \text{Tr}_F [\tilde{\rho}_F^{[\xi]}] = \text{Tr}_F [\tilde{\rho}_F^{[\xi]} I_F]. \quad (19)$$

Используя разложение, аналогичное приведенному в (3), можно произвести разбиение единицы в пространстве полевых состояний, тем самым определив вероятностную операторнозначную меру и супероператоры Ξ_ξ . Для определенности положим, что атом до взаимодействия с электромагнитным полем резонатора был приготовлен в основном состоянии $\rho_A = |g\rangle \langle g|$. Начальное состояние резонаторной моды пусть описывается произвольным оператором плотности ρ_F . Пренебрежем релаксационными процессами, и будем рассматривать унитарную эволюцию системы. Тогда состояние ρ_{AF} сразу после взаимодействия и непосредственно перед измерением можно записать в следующем виде:

$$\rho_{AF} = U_\tau \rho_A \otimes \rho_F U_\tau^\dagger. \quad (20)$$

где U_τ оператор эволюции системы «атом—поле», а τ — время взаимодействия. Разбиение единицы в пространстве полевых состояний произведем следующим образом. Введем супероператоры Ξ_ξ :

$$\text{Tr}_F [\Xi_\xi \rho_F] = \text{Tr}_F [\tilde{\rho}_F^{[\xi]} I_F] = \text{Tr}_{AF} \left[\sum_{\mu, \nu \in \{g, e\}} M_{\xi, \mu \nu} \rho_{AF} M_{\xi, \mu \nu}^\dagger \right]. \quad (21)$$

Далее, используя (20) определим трансформеры полевых состояний K :

$$K_{\xi,\mu\nu} = \sum_{\eta \in \{g,e\}} \langle \eta | M_{\xi,\mu\nu} U_\tau | g \rangle. \quad (22)$$

С учетом выражений приведенных для $M_{\xi,\mu\nu}$ операторы $K_{\xi,\mu\nu}$ можно записать следующим образом:

$$K_{\xi,\mu\nu} = \sum_{\eta \in \{g,e\}} \alpha_{\xi,\mu\nu} \langle \eta | \nu \rangle \langle \mu | U_\tau | g \rangle = \sum_{\eta \in \{g,e\}} \alpha_{\xi,\mu\nu} \delta_{\nu\eta} U_{\mu g}. \quad (23)$$

Здесь $\delta_{\nu\eta}$ — дельта Кронекера, $U_{gg} = \langle g | U_\tau | g \rangle$ и $U_{eg} = \langle e | U_\tau | g \rangle$. Из (23) легко получаются выражения для супероператоров Ξ_ξ :

$$\Xi_\xi = \sum_{\mu,\nu \in \{g,e\}} K_{\xi,\mu\nu} K_{\xi,\mu\nu}^\dagger = |\alpha_{\xi,g}|^2 U_{gg} U_{gg}^\dagger + |\alpha_{\xi,e}|^2 U_{eg} U_{eg}^\dagger. \quad (24)$$

Отсюда можно сделать заключение о том, что скачки, происходящие в ионизационной камере во время измерения атома не сказываются на состоянии поля резонатора после измерения (это отмечалось в работе [27] в связи с изучением одноатомного мазера). Поэтому, при расчете поправок на неидеальность их можно опускать. Данные величины могут быть полезны при вычислении коэффициентов α (введенных здесь феноменологически) из первых принципов.

4. Теорема Байеса и переоценка гипотез

В качестве примера использования данной модели при описании процесса фотодетектирования, вычислим апостериорные вероятности гипотез относительно состояния поля в резонаторе. Предположим, что начальное однофотонное состояние поля является чистым $\rho_F = |\psi\rangle \langle \psi|$ и параметризуем его следующим образом:

$$|\psi\rangle = |\psi(\theta)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle, \theta \in [0, \pi]. \quad (25)$$

Воспользуемся выражениями (19), (21) и запишем формулу полной вероятности случайной величины $\xi = 1, 2$. Данная вероятность является условной и зависит от состояния поля внутри резонатора $\rho_F = \rho_F(\theta)$:

$$P(\xi|\theta) = \text{Tr}_F [\Xi_\xi \rho_F] = P(\xi|g) P(g|\theta) + P(\xi|e) P(e|\theta) \quad (26)$$

где $P(\xi|g)$ и $P(\xi|e)$ определялись выше, а

$$P(g|\theta) = \text{Tr}_F [\rho_F P_g^F], \quad P(e|\theta) = \text{Tr}_F [\rho_F P_e^F]. \quad (27)$$

Здесь P_g^F и P_e^F — операторозначные меры в пространстве полевых состояний, соответствующие мерам P_g^A и P_e^A в пространстве атомных состояний. После измерения и получения некоторого значения случайной величины ξ , вероятности гипотез $P(\theta)$ относительно начального распределения поля резонатора могут быть пересчитаны по следующей формуле (теорема Байеса):

$$P(\theta|\xi) = \frac{P(\xi|\theta) P(\theta)}{\sum_{\theta} P(\xi|\theta) P(\theta)}. \quad (28)$$

Для определенности предположим, что θ — равномерно распределена на промежутке $[0, \pi]$, и в результате измерения была получена случайная величина ξ . Вычислим апостериорную

вероятность гипотезы $P(\theta|\xi)$:

$$P(\theta|\xi) = \frac{\{|\alpha_{\xi,g}|^2 \text{Tr}_F[U_{gg}\rho_F U_{gg}^\dagger] + |\alpha_{\xi,e}|^2 \text{Tr}_F[U_{eg}\rho_F U_{eg}^\dagger]\} P(\theta)}{\sum_{\theta} \{|\alpha_{\xi,g}|^2 \text{Tr}_F[U_{gg}\rho_F U_{gg}^\dagger] + |\alpha_{\xi,e}|^2 \text{Tr}_F[U_{eg}\rho_F U_{eg}^\dagger]\} P(\theta)}. \quad (29)$$

Используя явные выражения для операторов U_{gg} и U_{eg} :

$$U_{gg} = \cos(\Omega\tau\sqrt{a^\dagger a}), \quad U_{eg} = -\frac{i}{\sqrt{aa^\dagger}} \sin(\Omega\tau\sqrt{aa^\dagger}) a, \quad (30)$$

где Ω — однофотонная частота Раби, получим:

$$P(\theta|\xi) = \frac{1}{\pi} \left[1 + \frac{(|\alpha_{\xi,g}|^2 - |\alpha_{\xi,e}|^2) \sin^2(\Omega\tau) \cos(\theta)}{2|\alpha_{\xi,g}|^2 + (|\alpha_{\xi,e}|^2 - |\alpha_{\xi,g}|^2) \sin^2(\Omega\tau)} \right]. \quad (31)$$

В частности, для $\xi = 0$ будем иметь:

$$P(\theta|0) = \frac{1}{\pi} \left[1 + \frac{(\varepsilon_e - \varepsilon_g) \sin^2(\Omega\tau) \cos(\theta)}{2(1 - \varepsilon_g) + (\varepsilon_g - \varepsilon_e) \sin^2(\Omega\tau)} \right]. \quad (32)$$

На рис. 1а изображены зависимости плотностей вероятностей $P(\theta|\xi)$ пересчитанных гипотез для случаев $\xi = 0$ и $\xi = 1$ при $\Omega\tau = \pi/2$, $|\alpha_{1,g}|^2 = 0.8$, $\varepsilon_g = 0.9$, $\varepsilon_e = 0.8$. Для $\theta = 0$ и $\Omega\tau = \pi/2$ на рис. 1б построена плотность вероятности $P(0|0)$ как функция ε_g эффективности первого детектора при фиксированной эффективности второго $\varepsilon_e = 0.8$.

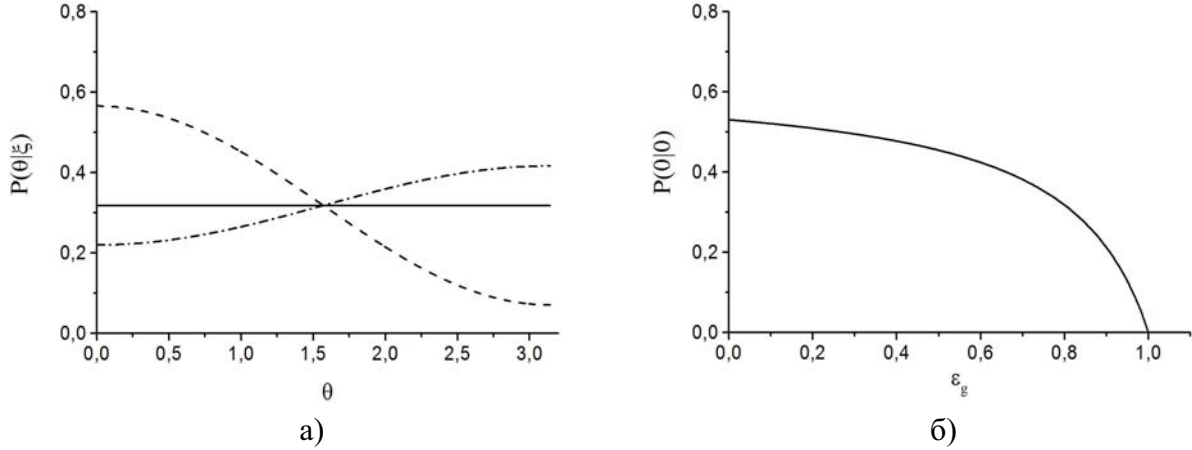


РИС. 1. а) Пересчитанные оценки для вероятности гипотез $P(\theta|1)$ (штриховая линия) и $P(\theta|0)$ (штрих-пунктирная линия), а также априорная плотность вероятности гипотез (сплошная); б) Зависимость $P(0|0)$ от величины ε_g квантовой эффективности первого детектора при фиксированной величине $\varepsilon_e = 0.8$, $\theta = 0$

5. Заключение

Рассмотрена модель неидеального детектора, включающая возможность пропуска атома и ошибок детектирования возникающих за счет процессов, протекающих в измерительном устройстве. Предложена система операторозначных мер детектора, учитывающая

все введенные типы неидеальности. С их использованием построены атомные супероператоры, отвечающие каждому исходу детектирования и получены их представления Крауса (трансформеры атомных состояний). Затем данная модель детектора была использована для тестирования поля резонатора. Предполагалось, что время взаимодействия атома с модой много меньше времени жизни его возбужденного состояния, а также времени жизни поля в резонаторе. То есть рассматривалась эволюция атомно-полевой системы, в результате которой чистые состояния сохраняются. При данных допущениях получены соответствующие трансформеры состояний поля. Данные выражения затем использовались для переоценки гипотез о состоянии поля (теорема Байеса) для известного исхода детектирования.

Помимо рассмотренного приложения данной модели, интерес представляет также влияние неидеальности на оценку статистических характеристик квантовой моды и обратимость измерительного процесса. Статистика фотоэлектронного счета для различных режимов детектирования в случае неидеальности, связанной с пропуском атома при наличии релаксационных процессов была изучена в [28]. В [30] было показано, что измерение проведенное при помощи фотонного счетчика в случае идеального детектора является необратимым. Наличие ошибочных отсчетов может повлиять на возможность восстановления состояний квантового поля до измерения.

Работа поддержана в рамках Аналитической ведомственной целевой программы «Развитие научного потенциала высшей школы» No.2.1.1/9425, Федеральной целевой программой «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» 2009-2013 годы. Государственный контракт No.П689. Проект НК-526П/24 и НИОКР РК10186.

Литература

- [1] Kraus K. States, Effects and Operations. Fundamental notions of quantum theory. — Berlin, Heldeiberg: Springer-Verlag, 1983. — 152 p.
- [2] Peres A. Quantum Theory: Concepts and Methods. — Kluwer Academic Publishers, 2002. — 449 p.
- [3] Poyatos J. F., Cirac I.J. Complete Characterization of a Quantum Process: The Two-Bit Quantum Gate // Phys. Rev. Lett. — 1997. — 78(2). — P. 390-393.
- [4] Lobino M., Korystov D., Kupchak C., Figueroa E., Sanders B.C., Lvovsky A.I. Complete Characterization of Quantum-Optical Processes // Nature, — 2008. — 322. — P. 563-566.
- [5] Hradil Z. Quantum state estimation // Phys. Rev. A. — 1997. — 55(3). — P. 1561-1564.
- [6] Teo Y. S., Zhu H., Englert B.-G., Rehacek J., Hradil Z. Quantum-State Reconstruction by Maximizing Likelihood and Entropy // Phys. Rev. Lett. — 2011. — 107(2). — P. 020404(4).
- [7] Amri T. Quantum Behavior of Measurement Apparatus // arXiv:1001.3032v2 [quant-ph] — 2010.
- [8] DiVincenzo D. p. The physical implementation of quantum computation // Fortschr. Phys. — 2000. — 48. — P. 771-783.
- [9] Perez-Delgado C. A., Kok p. Quantum computers: Definition and implementations // Phys. Rev. Lett. — 2011. — 83(1). — P.012303(15).
- [10] O'Brien J. L., Furusawa A., Vuckovich J. Photonic quantum technologies // Nature Photonics. — 2009. — 3. — P. 687-695.
- [11] Mandel L. Fluctuations of Photon Beams and their Correlations // Proc. Phys. Soc. — 1958. — 72. — P. 1037-1048.
- [12] Mandel L. Progress in Optics (edited by E. Wolf) // — 1963. — 2. Amsterdam : North-Holland.
- [13] Kelley p.L., Kleiner W.H. Theory of electromagnetic field measurement and photoelectron counting // Phys. Rev. A. — 1964. — 136(2). — P. 316-334.
- [14] Srinivas M. D., Davies E.B. Photon counting probabilities in quantum optics // Opt. Act. — 1981. — 28(7). — P. 981-976.
- [15] Carmichael H. An Open system approach to quantum optics. — Berlin: Springer-Verlag, 1993.
- [16] Gardiner C.W. Quantum noise. — Berlin: Springer-Verlag, 1991.
- [17] Walls D. F., Milburn G.J. Quantum optics. — New York: Springer-Verlag, 1995.
- [18] Мандель Л., Вольф Э. Оптическая когерентность и квантовая оптика. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2000. — 896 с.
- [19] Mollow B.R. Quantum theory of field attenuation // Phys. Rev. — 1968. — 168. — P. 1896-1919.

- [20] Zoller p., Marte M., Walls D.F. Quantum jumps in atomic systems // *Phys. Rev. A.* — 1987. — 35. — P. 198-207.
- [21] Ueda M., Imoto N., Ogawa T. Microscopic theory of the continuous measurement of photon number // *Phys. Rev. A.* — 1990. — 41. — P. 4127-4130.
- [22] Dodonov A.V., Mizrahi S.S., Dodonov V.V. Quantum photodetection distributions with “nonlinear” quantum jump superoperator // *J. Opt. B: Quant. Semicl. Opt.* — 2005. — 7. — P. 99-108.
- [23] Dodonov A. V., Mizrahi S.S., Dodonov V.V. Microscopic models of quantum-jump superoperators // *Phys. Rev. A.* — 2005. — 72(2). — P. 023816(8).
- [24] Dodonov A. V., Mizrahi S.S., Dodonov V.V. Engineering quantum jump superoperators for single-photon detectors // *Phys. Rev. A.* — 2006. — 74(3). — P. 033823(7).
- [25] Dodonov A. V., Mizrahi S.S., Dodonov V.V. Inclusion of nonidealities in the continuous photodetection model // *Phys. Rev. A.* — 2007. — 75(1). — P. 013806(8).
- [26] Wagner C., Brecha R.J., Schenzle A., Walther H. Phase diffusion, entangled states, and quantum measurements in the micromaser // *Phys. Rev. A.* — 1993. — 47. — P. 5068-5079.
- [27] Briegel H-J., Englert B-G., Sterpi N., Walther H. One-atom maser: Statistics of detector clicks // *Phys. Rev. A.* — 1994. — 49(4). — P. 2962-2985.
- [28] Мирошниченко Г.П. Измерение статистических характеристик квантованной моды в различных режимах фотодетектирования // *ЖЭТФ.* — 2007. — 131(5). — С. 829-841.
- [29] Мирошниченко Г.П. Дискретное фотодетектирование для протоколов линейных оптических квантовых вычислений и коммуникаций // *ЖЭТФ.* — 2011. — 139(5). — С. 1-11.
- [30] Terashima H. Information, fidelity, and reversibility in photodetection processes // *Phys. Rev. A.* — 2011. — 83(3). — P. 032111(13).

ВЛИЯНИЕ НЕКОРРЕЛИРОВАННОСТИ НЕОДНОРОДНОГО УШИРЕНИЯ НА ФОРМИРОВАНИЕ ПЕРЕХОДНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В СИСТЕМЕ ТРЕХУРОВНЕВЫХ НАНО-ГЕЙТОВ

Л. А. Нефедьев, Э. И. Низамова, С. В. Тактаева

Татарский государственный гуманитарно-педагогический университет,
Казань, Россия

nefediev@yandex.ru, enizamova@yandex.ru, Sofiya-Taktaeva@yandex.ru

Исследована корреляция неоднородного уширения на различных частотных переходах в системе трехуровневых нано-гейтов и ее влияние на интенсивность отклика стимулированного фотонного эха. Показано, что коэффициент корреляции неоднородного уширения на двух различных переходах и интенсивность отклика стимулированного фотонного эха зависят от параметра случайного взаимодействия оптического электрона с локальным полем и от ширины распределения дополнительных частотных сдвигов из-за частичной взаимной фиксации энергий переходов. Причем незначительное изменение коэффициента корреляции приводит к значительному спаду интенсивности отклика.

Ключевые слова: стимулированное фотонное эхо, нано-гейты, коэффициент корреляции, оптический наносердечник.

1. Введение

Резонансное взаимодействие лазерного излучения с веществом является одной из фундаментальных проблем современной физики. Когерентные поля могут вызывать интерференцию двух и более квантовых состояний. Эта интерференция может проявляться как в когерентном отклике системы частиц, так и на уровне отдельной частицы, являющейся квантовым объектом. Изучение таких процессов представляет интерес не только для фундаментальной науки, но имеет и прикладное значение. Например, когерентные переходные процессы могут быть использованы для хранения и обработки информации [1–4]. Особый интерес представляет исследование взаимодействия нескольких резонансных полей с многоуровневыми квантовыми системами (атомами, молекулами, примесными ионами в кристаллах и др.). Этот интерес обусловлен возможными применениями различных эффектов, наблюдаемых при многочастотном возбуждении квантовых объектов. Среди них можно отметить цветную эхо-голографию [5], сжатие информации в трехуровневых средах [6], копирование квантовой информации [4] и многоуровневые нано-гейты, выполняющие логические операции. Запись и воспроизведение эхо-голограмм в многоуровневых системах приводит к возможности наряду с логическими операциями выполнять изменение шкалы реального времени и последовательности событий, информация о которых была заложена в пространственно-временную структуру объектного импульса [7, 8]. В перечисленных процессах информация из объектного импульса преобразуется в структурную (потенциальную) информацию, носителем которой являются переходные динамические решетки населенностей и поляризаций резонансной среды, то есть пространственно-частотное распределение q -битов в пределах неоднородно уширенных линий резонансных переходов. Поэтому формирование оптических переходных процессов в многоуровневых системах существенно

зависит от степени корреляции неоднородного уширения на разных частотных переходах, в связи с возможным разрушением обратимой фазовой памяти системы.

Типичными механизмами неоднородного уширения в твердых телах являются: деформационное уширение (дислокации и точечные дефекты в решетке); уширение, обусловленное случайными электрическими полями и градиентами полей заряженных дефектов; нарушение порядка в структуре решетки. Таким образом, как энергии состояний, так и энергии (частоты) резонансных переходов можно рассматривать как функции многих параметров x_i , число которых больше 1. Изменения этих параметров приводит к распределению оптических нано-центров по частотам, описываемого многопараметрической функцией $g(\Delta(x_1 \dots x_n))$. При этом даже монохроматическое возбуждение системы на уровень с энергией $E_i(x_1 \dots x_n)$ может не привести к выделению оптических нано-центров одинакового типа, так как фиксация значения функции многих переменных не фиксирует значений аргументов (может быть несколько локальных экстремумов). Таким образом, может быть наложено лишь условие [9]:

$$\Delta E_{ij}(x_1 \dots x_n) = E_i(x_1 \dots x_n) - E_j(x_1 \dots x_n) = \hbar \omega_{ij},$$

из которого следует, что при сравнении двух разных резонансных переходов, имеющих один общий уровень, оставшиеся нефиксированными параметры на одном переходе, влияют на энергию (частоту) другого перехода. От степени такой фиксации зависит степень сохранения когерентности в многоуровневой системе при ее возбуждении на разных резонансных переходах.

В данной работе исследуется формирование стимулированного фотонного эха в системе трехуровневых нано-гейтов в зависимости от величины корреляции неоднородного уширения на разных резонансных переходах.

2. Основные уравнения

Уравнение для одночастичной матрицы плотности в системе координат, связанной с частицей, запишем в виде

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho], \quad (1)$$

где $H = H_0 + H_C + U + V$, H_0 и H_C — гамильтонианы квантовой системы и окружающей среды, U — оператор их взаимодействия, V — оператор взаимодействия квантовой системы с излучением. Считая релаксационные процессы марковскими, из (1) можно получить [11]:

$$\frac{\partial \rho_{ij}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [V, \rho]_{ij} - \sum_{kl} K_{ijkl} \rho_{kl}, \quad (2)$$

где K_{ijkl} — релаксационные коэффициенты.

При описании взаимодействия квантовой системы с излучением ограничимся случаем коротких лазерных импульсов, длительностью $\Delta t \ll$ времени необратимых релаксаций. Таким образом, во время действия η -го импульса уравнение для матрицы плотности во вращающейся системе координат можно записать в виде

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [B_\eta, \tilde{\rho}], \quad (3)$$

где

$$B_\eta = \tilde{H}_0 + \tilde{V}_\eta - \hbar A, \quad \tilde{H}_0 = e^{iAt} H_0 e^{-iAt}, \quad \tilde{V}_\eta = e^{iAt} V_\eta e^{-iAt},$$

A — матрица перехода во вращающуюся систему координат. Решение уравнения (3) запишем в виде

$$\tilde{\rho}(t - t_\eta) = \exp \{ -i\hbar^{-1} B_\eta(t - t_\eta) \} \tilde{\rho}(t_\eta) \exp \{ i\hbar^{-1} B_\eta(t - t_\eta) \}, \quad (4)$$

где t_η — момент времени начала воздействия η -го импульса. Окаймляющие экспоненты в (4) можно вычислить методами функций от матриц. В качестве примера найдем функцию от матрицы $f(\alpha_\eta B_\eta)$, где B_η — квадратная матрица порядка m , $\alpha_\eta = i\hbar^{-1} \Delta t_\eta$. Корни матрицы $\alpha_\eta B_\eta$ найдем из секулярного уравнения

$$|\lambda I - \alpha_\eta B_\eta| = 0,$$

где I — единичная матрица порядка m . Пусть корни будут $\lambda_{s\eta}^{m_s}$, где m_s — кратность корня $\lambda_{s\eta}$, $\sum_s m_s = m$. Тогда

$$f(\alpha_\eta B_\eta) = \sum_{k=1}^s [f(\lambda_{k\eta}) Z_{k1}^\eta + f'(\lambda_{k\eta}) Z_{k2}^\eta + \dots + f^{(m_k-1)}(\lambda_{k\eta}) Z_{km_k}^\eta], \quad (5)$$

где Z_k^η — компоненты матрицы $f(\alpha_\eta B_\eta)$, которые находятся из системы уравнений

$$g_i(\alpha_\eta B_\eta) = \sum_{k=1}^s [g_i(\lambda_{k\eta}) Z_{k1}^\eta + g'_i(\lambda_{k\eta}) Z_{k2}^\eta + \dots], \quad (6)$$

где

$$g_1(\lambda) = \lambda^0 = 1, g_2(\lambda) = \lambda, \dots, g_m(\lambda) = \lambda^{m-1}, \\ g_1(\alpha_\eta B_\eta) = I, g_2(\alpha_\eta B_\eta) = \alpha_\eta B_\eta \dots g_m(\alpha_\eta B_\eta) = \alpha_\eta^{m-1} B_\eta^{m-1}.$$

Удобно также записать матрицу плотности в (4) в виде

$$\tilde{\rho}(t) = \sum_{\alpha\beta} \tilde{\rho}_{\alpha\beta}(t) P_{\alpha\beta}, \quad (7)$$

где $P_{\alpha\beta}$ — проективные матрицы. Подставляя (7) в (4) получим

$$\tilde{\rho}(t_\eta + \Delta t_\eta) = \sum_{\alpha\beta} \tilde{\rho}_{\alpha\beta}(t_\eta) e^{-\alpha_\eta B_\eta} P_{\alpha\beta} e^{\alpha_\eta B_\eta} = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \tilde{\rho}(t_\eta) p_{\gamma\delta\alpha\beta}^\eta P_{\gamma\delta}. \quad (8)$$

Здесь

$$\sum_{\gamma\delta} p_{\gamma\delta\alpha\beta}^\eta P_{\gamma\delta} = e^{-\alpha_\eta B_\eta} P_{\alpha\beta} e^{\alpha_\eta B_\eta}. \quad (9)$$

Таким образом, для того чтобы найти матрицу плотности после воздействия η -го импульса, необходимо вычислить коэффициенты $p_{\gamma\delta\alpha\beta}^\eta$.

На временных интервалах между возбуждающими импульсами эволюция матрицы плотности во вращающейся системе координат будет описываться кинетическими уравнениями вида

$$\frac{d\tilde{\rho}_{nn}}{dt} = \sum (K_{n'n} \tilde{\rho}_{n'n'} - K_{nn'} \tilde{\rho}_{nn}), \quad (10)$$

$$\frac{d\tilde{\rho}_{nn'}}{dt} = \left(-i\Delta_{nn'} - \frac{1}{\xi_{nn'}} \right), \quad (11)$$

где $K_{nn'}$ — коэффициенты релаксации диагональной части матрицы плотности, а $\xi_{nn'}$ — недиагональной части. Решение системы (10) имеет вид

$$\rho = e^{Qt} \rho_0, \quad (12)$$

где ρ_0 — начальное значение матрицы плотности. В случае трехуровневой системы

$$Q = -K_1 P_{11} + K_{32} P_{12} - K_2 P_{22},$$

где $K_1 = K_{21}$, $K_2 = K_{32} + K_{31}$. Расчет матрицы $F = \exp(Qt)$ методами функций от матриц дает

$$\begin{aligned} F_{11} &= e^{-K_1 t}, \quad F_{12} = -\frac{K_{32}}{\gamma} K_2 K_1 (e^{-K_1 t} - e^{-K_2 t}), \\ F_{21} &= F_{31} = F_{32} = 0, \quad F_{22} = e^{-K_2 t}, \quad F_{33} = 1, \\ \gamma &= -K_1 K_2^2 + K_2 K_1^2. \end{aligned}$$

Соответственно, для недиагональной части матрицы плотности будем иметь

$$\rho_{nn'} = \exp\left(-i\Delta_{nn'} - \frac{1}{\xi_{nn'}}\right) \rho_{nn'}^0, \quad (13)$$

где

$$\Delta_{nn'} = \hbar^{-1} \Delta E_{nn'}(x_1 \dots x_n) - \omega_{nn'}.$$

Таким образом, разрушение когерентности в резонансной системе может происходить не только за счет необратимых релаксаций, но также за счет частичной фиксации энергии одного резонансного перехода относительно энергии другого перехода.

3. Влияние некоррелированности неоднородного уширения на формирование стимулированного фотонного эха в трехуровневой системе

Гамильтониан трехуровневого оптического нано-центра в кристаллической матрице во вращающейся системе координат запишем в виде:

$$\tilde{H}_0 = \hbar \Delta P_{22} + P_{33} \hbar \Gamma (\Delta + \Delta' m(\Gamma, x_1 \dots x_n)), \quad (14)$$

где $\Delta = \hbar^{-1} E_{12}(x_1 \dots x_n) - \omega$, P_{ij} — проективные матрицы (имеют элемент ij равный единице, а остальные равные нулю), Γ — параметр неэквидистантности системы, параметр $m(\Gamma, x_1 \dots x_n)$ определяет неодинаковость взаимодействия оптического электрона с локальным кристаллическим полем в разных состояниях ($\lim_{\Gamma \rightarrow 1} m(\Gamma, x_1 \dots x_n) = 0$), Δ' — дополнительный частотный сдвиг, связанный с частичной фиксацией энергии перехода 1 — 3 относительно энергии перехода 1 — 2.

Коэффициент корреляции неоднородного уширения на разных частотных переходах введем аналогично [10]:

$$R_{ik, i'k'} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(f_{ik} - z_{ik})(f_{i'k'} - z_{i'k'})}{\sigma_{ik} \sigma_{i'k'}} g(\Delta) g_1(\Delta') d\Delta d\Delta', \quad (15)$$

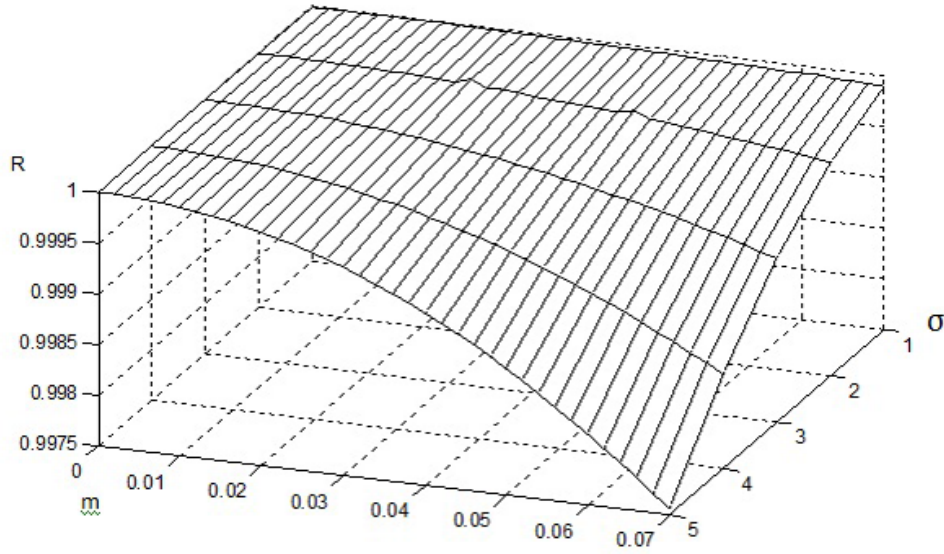


РИС. 1. Зависимость коэффициента корреляции R_{12-13} неоднородного уширения на двух различных переходах от параметра $m(\Gamma, x_1 \dots x_n)$ случайного взаимодействия оптического электрона с локальным полем и от ширины σ' распределения $g_1(\Delta')$ дополнительных частотных сдвигов Δ' из-за частичной фиксации энергии перехода 1 — 3 относительно энергии перехода 1 — 2

$$f_{12} = \Delta, \quad f_{13} = \Gamma(\Delta + \Delta' m(\Gamma, x_1 \dots x_n)), \quad f_{23} = f_{13} - \Delta,$$

$$z_{ik} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_{ik} g(\Delta) g_1(\Delta') d\Delta d\Delta',$$

$$\sigma_{ik}^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (f_{ik} - z_{ik})^2 g(\Delta) g_1(\Delta') d\Delta d\Delta',$$

а распределения оптических нано-центров по частотам $g(\Delta)$ и $g_1(\Delta')$ будем считать гауссовыми с дисперсиями σ^2 и σ'^2 соответственно. Таким образом, каждой изохромате неоднородно уширенной линии на одном переходе соответствует набор изохромат неоднородно уширенной линии на другом переходе, что может приводить к потере фазовой памяти рассматриваемой системы. В свою очередь потеря фазовой памяти может оказывать существенное влияние на формирование оптических переходных процессов в многоуровневых системах.

На рис. 1 представлены результаты численного расчета коэффициента корреляции неоднородного уширения на разных частотных переходах (1 — 2 и 1 — 3).

Из рис. 1 следует, что коэффициент корреляции R_{12-13} неоднородного уширения на разных частотных переходах уменьшается с увеличением параметров $m(\Gamma, x_1 \dots x_n)$ и σ' , что приводит к потере фазовой памяти системы.

Рассмотрим формирование стимулированного фотонного эха (СФЭ) в системе трехуровневых оптических нано-центров с неэквидистантными уровнями $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ с энергиями $\hbar\Omega_0, \hbar\Omega_1, \hbar\Omega_2$ соответственно, рис. 2.

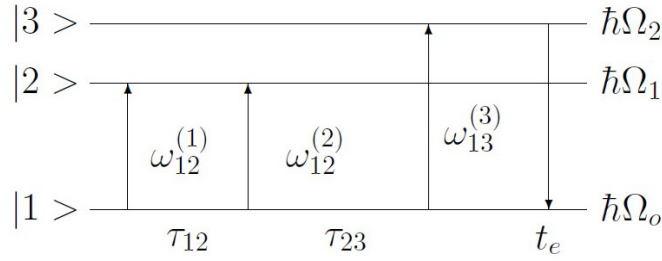


Рис. 2. Спектр возбуждения СФЭ в трехуровневой системе. $\omega_{ij}^{(\eta)}$ -несущая частота η -го лазерного импульса на переходе ij , t_e — время появления отклика СФЭ. Длительности возбуждающих лазерных импульсов Δt_η будем считать достаточно малыми, чтобы их частотный спектр полностью перекрывал неоднородно уширенные линии резонансной среды

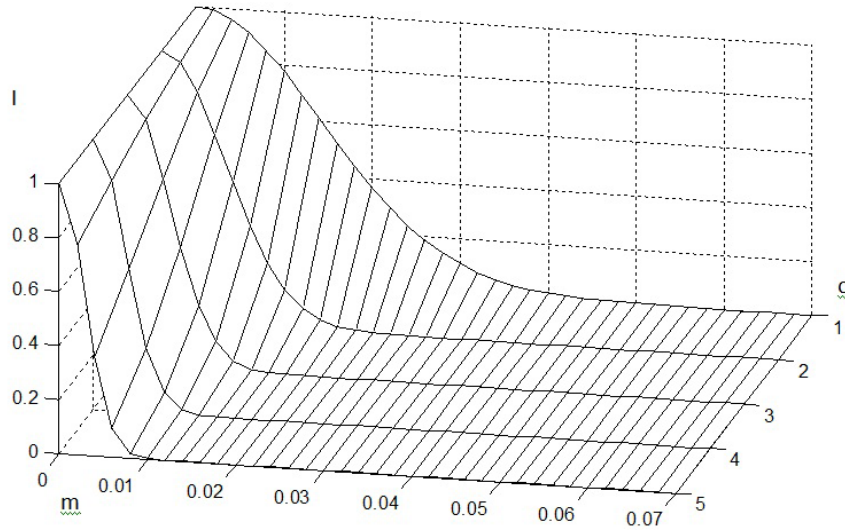


Рис. 3. Зависимость интенсивности отклика стимулированного фотонного эха от параметра m ($\Gamma, x_1 \dots x_n$) случайного взаимодействия оптического электрона с локальным полем и от ширины σ' распределения $g_1(\Delta')$ дополнительных частотных сдвигов Δ' из-за частичной фиксации энергии перехода 1 — 3 относительно энергии перехода 1 — 2

Матрицу плотности после воздействия η -го лазерного импульса найдем из (3), где матрица перехода во вращающуюся систему координат будет иметь вид $A = P_{22}\omega_{12} + P_{33}\omega_{13}$, а матрицу оператора взаимодействия с η -м лазерным импульсом запишем в виде

$$\tilde{V}^{(\eta)} = P_{12}V_{12}^{(\eta)}e^{-i\omega_{12}t} + P_{21}V_{21}^{(\eta)}e^{i\omega_{12}t} + P_{13}V_{13}^{(\eta)}e^{-i\omega_{13}t} + P_{31}V_{31}^{(\eta)}e^{i\omega_{13}t},$$

$$V_{ik}^{(\eta)} = -\frac{1}{2}d_{ik}\varepsilon_{ik}^{(\eta)}e^{i\omega_{ij}t - i\vec{k}_{(\eta)}\vec{r}},$$

где $\vec{r}$ — радиус-вектор местоположения оптического нано-центра, d_{ik} — дипольный момент перехода ik , $\varepsilon_{ij}^{(\eta)}$ — напряженность электрического поля Фурье-компоненты η -го лазерного импульса.

Напряженность электрического поля отклика в волновой зоне, в точке наблюдения с радиус-вектором $\vec{R}$ запишем в виде

$$\vec{E} = \sum_j \frac{1}{c^2 |\vec{R} - \vec{r}_j|} \left[\langle \ddot{\vec{d}}_j(t') \rangle \times \vec{n} \right] \times \vec{n}, \quad (16)$$

где $\vec{r}_j$ — радиус-вектор местоположения j -го оптического нано-центра,

$$\vec{n} = \frac{\vec{R}}{|\vec{R}|}, \quad t' = t - \frac{|\vec{R} - \vec{r}_j|}{c}, \quad \langle \vec{d}_j(t') \rangle = Sp(\vec{d}_j \rho(t)),$$

а решение для матрицы плотности $\rho(t)$ получается из (4), (7), (9), (12) и (13). В случае если $K_1 \ll \tau_2$ и $K_2 \ll \tau_2$, можно пренебречь влиянием продольной релаксации на интенсивность отклика стимулированного фотонного эха и из (16) следует зависимость напряженности электрического поля отклика от некоррелированности неоднородного уширения на разных частотных переходах и величины поперечной необратимой релаксации:

$$E(t) \sim \left[\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(t, \Delta, \Delta') g(\Delta) g_1(\Delta') d\Delta d\Delta' \right] \exp \left\{ -\frac{\tau_{12}}{\xi_{12}} - \frac{t - \tau_{12} - \tau_{23}}{\xi_{13}} \right\}, \quad (17)$$

где

$$\Phi(t, \Delta, \Delta') = \exp \left\{ i\Delta\Gamma \left[(t - \tau_{12} - \tau_{23}) \left(1 - \frac{\Delta'}{\Delta} m(\Gamma, x_1 \dots x_n) - \frac{\tau_{12}}{\Gamma} \right) \right] \right\}.$$

На рис. 3 представлены результаты численного расчета относительной интенсивности отклика СФЭ $J_{\text{отн}} = |E(t)|^2 / |E_{\text{max}}(t)|^2$.

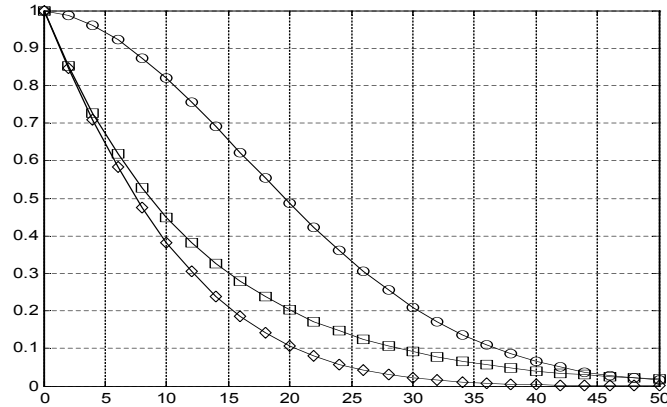


РИС. 4. Зависимость интенсивности отклика стимулированного фотонного эха от времени между 1 и 2 лазерными импульсами τ_{12} при различных временах поперечной релаксации и различных параметрах случайного взаимодействия оптического электрона с локальным полем m .

- — зависимость интенсивности отклика СФЭ от τ_{12} при $\xi_{ij} \gg \tau_{12}$, $m = 0.04$;
- — зависимость интенсивности отклика СФЭ от τ_{12} при $\xi_{ij} \sim \tau_{12}$, $m = 0$;
- ◇ — зависимость интенсивности отклика СФЭ от τ_{12} при $\xi_{ij} \sim \tau_{12}$, $m = 0.04$.

Сравнение рис. 3 и рис. 1 показывает, что небольшие изменения коэффициента корреляции R_{12-13} неоднородного уширения на разных частотных переходах приводит к значительному уменьшению интенсивности СФЭ с увеличением параметров m ($\Gamma, x_1 \dots x_n$) и σ' , что является следствием потери фазовой памяти системы.

Варьирование временного интервала τ_{12} приводит к изменению интенсивности отклика СФЭ, обусловленную двумя причинами: во-первых, релаксационным затуханием (ξ_{12}, ξ_{13}) и, во-вторых, к затуханию за счет некоррелированности неоднородного уширения (рис. 4).

4. Заключение

Показано, что в рассмотренной схеме возбуждения коэффициент корреляции неоднородного уширения на двух различных переходах R_{12-13} и интенсивность отклика стимулированного фотонного эха зависят от параметра случайного взаимодействия оптического электрона с локальным полем m и от частотных сдвигов σ' . Причем незначительное изменение коэффициента корреляции приводит к значительному спаду интенсивности отклика. При изменении времени τ_{12} ($T \gg \tau_{12}$) между лазерными импульсами получается дополнительное затухание аналогичное релаксации за счет эффекта некоррелированности.

Литература

- [1] Самарцев В.В., Зуйков В.А., Нефедьев Л.А. Оптическая память на основе долгоживущего фотонного эха // ЖПС. — 1993. — 59(5-6). — С. 395-424.
- [2] Kalachev A.A., Samartsev V.V. Coherent phenomena in optics. — Kazan: Kazan State University, 2003. — 280 p.
- [3] Nefed'ev L.A., Rusanova I.A. Information Processes in Optical Echo Holography // Optics and Spectr. — 2001. — 90(6). — P. 906-911.
- [4] Nefed'ev L.A., Rusanova I.A. Copying quantum information in a three-level medium with a phase memory // Laser Physics. — 2002. — 12(3). — P. 581-585.
- [5] Нефедьев Л.А., Самарцев В.В. Цветная эхо-голография // Опт. и спектр. — 1987. — 62(3). — С. 701-703.
- [6] Nefediev L.A., Samartsev V.V. The dynamic echo-hologram transformation in three-level systems // Phys. Stat. Sol. — 1985. — 88(a). — P. 631-635.
- [7] Нефедьев Л.А. Пространственно-временные преобразования эхо-голограмм в двух и трехуровневых системах // Опт. и спектр. — 1986. — 61(2). — С. 387-394.
- [8] Нефедьев Л.А. Динамическая эхо-голография в вырожденных и многоуровневых системах // Известия АН СССР. Серия физическая. — 1986. — 50(8). — С. 1551-1558.
- [9] Саари П.М., Тамм Т.Б. Корреляция неоднородной структуры спектров разных электронных переходов примесных молекул в твердых матрицах // Известия АН СССР. Серия физическая. — 1975. — 1. — С. 2321-2325.
- [10] Nefediev L.A., Khakimzyanova (Garnaeva) G.I. The Correlation of Inhomogeneous Broadening and the Efficiency of Data Locking in Optical Echo Processors // Optics and Spectr. — 2005. — 98(1). — P. 35-39.
- [11] Раутиан С.Г., Смирнов Г.И., Шалагин А.М. Нелинейные резонансы в спектрах атомов и молекул. — Новосибирск: Наука, 1979. — 310 с.

КОДИРОВАНИЕ ИНФОРМАЦИИ В НАНОВРЕМЕННЫХ ИНТЕРВАЛАХ МЕЖДУ ВОЗБУЖДАЮЩИМИ ЛАЗЕРНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ В ОПТИЧЕСКОМ ЭХО-ПРОЦЕССОРЕ

Л. А. Нефедьев, А. Р. Сахбиева

Казанский федеральный университет, Казань, Россия

nefediev@yandex.ru , alsu-sakhbieva@yandex.ru

PACS 42.40.-i, 42.50.-p, 42.50.Ct, 42.50.Gy, 42.79.Np, 89.70.+c

Рассмотрено кодирование информации в нановременных интервалах между возбуждающими лазерными импульсами в оптическом эхо-процессоре. Введены информационные меры для описания преобразования классической информации в квантовую. При преобразовании классической информации, заложенной в нановременные интервалы эшелона лазерных импульсов в квантовую, наиболее подходящей мерой является квантовая информационная мера, основанная на алгоритмической теории информации, так как она имеет наибольшую корреляцию с классической информационной мерой.

Ключевые слова: фотонное эхо, эхо-процессор.

1. Введение

Исследования по оптической обработке и хранению информации показывают большие перспективы по созданию быстродействующих процессоров, в частности — оптических эхо-процессоров [1], основанных на использовании сигналов фотонного эха. В этом случае информация может быть заложена в амплитудно-временную форму возбуждающих лазерных, в волновые фронты и поляризацию импульсов, в эшелоны импульсов.

Демонстрация частотно-селективной оптической памяти, где запись и обработка данных происходит как в нановременных, так и в частотных интервалах описывается в работе [2]. Эхо-процессор в режиме долгоживущего фотонного эха, в которой сочетаются достоинства одновременной записи динамической интерферограммы с длительным ее хранением был предложен в работе [3]. Конструкция данного процессора дала возможность продемонстрировать в [4] плотность записи и обработки информации порядка нескольких гигабит/см², используя сжатие и растяжение информационных сигналов путем быстрого изменения их несущей частоты.

С точки зрения теории информации можно представить эхо-процессор как информационный канал с памятью и шумами, на входе и выходе которого информация имеет классический вид, а внутри канала — квантовый. Такой канал обеспечивает передачу и преобразование информации между различными моментами времени и направлениями в пространстве.

Рассмотрим систему (сообщение), описываемую переменными A (классическими или квантовыми) и построим ее классическое и квантовое описание. В классической информационной теории определим Шенноновскую энтропию для A :

$$J_c = - \sum_n p(a) \log_2 p(a), \quad (1)$$

где переменная A принимает значение a с вероятностью $p(a)$. Квантовым аналогом является энтропия фон Неймана $J_{fn}(\rho_A)$:

$$J_{fn} = -\text{Tr}_A [\rho_A \log_2 \rho_A], \quad (2)$$

где Tr_A означает след по степеням свободы подсистемы A .

В данной работе мы исследуем процессы преобразования классической дискретной информации, заложенную в нановременные интервалы эшелона лазерных импульсов в квантовую.

2. Энтропия фон Неймана при описании систем с когерентной суперпозицией базисных состояний

Найдем выражение для энтропии фон Неймана $J_{fn} = -\text{Tr}_A [\rho_A \log_2 \rho_A]$ для двухуровневой системы, описываемой матрицей плотности

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix}.$$

Для расчета $\log_2 \rho$ применим методы вычислений функций от матриц. Энтропия фон Неймана будет описываться следующим выражением:

$$\begin{aligned} J_{fn} = -\text{Tr}_A [\rho_A \log_2 \rho_A] = & \frac{1}{\sqrt{(\rho_{11} - \rho_{22})^2 + 4|\rho_{12}|^2}} \left[2|\rho_{12}|^2 \log_2 \frac{\lambda_2}{\lambda_1} + \right. \\ & + \frac{1}{2}\rho_{11} \left(\rho_{22} - \rho_{11} - \sqrt{(\rho_{11} - \rho_{22})^2 + 4|\rho_{12}|^2} \right) \log_2 \lambda_1 - \\ & - \frac{1}{2}\rho_{11} \left(\rho_{22} - \rho_{11} + \sqrt{(\rho_{11} - \rho_{22})^2 + 4|\rho_{12}|^2} \right) \log_2 \lambda_2 - \\ & - \frac{1}{2}\rho_{22} \left(\rho_{22} - \rho_{11} - \sqrt{(\rho_{11} - \rho_{22})^2 + 4|\rho_{12}|^2} \right) \log_2 \lambda_1 - \\ & \left. - \frac{1}{2}\rho_{22} \left(\rho_{22} - \rho_{11} + \sqrt{(\rho_{11} - \rho_{22})^2 + 4|\rho_{12}|^2} \right) \log_2 \lambda_2 \right]. \quad (3) \end{aligned}$$

При отсутствии в системе когерентности из (3) следует

$$\lim_{|\rho_{12}| \rightarrow 0} J_{fn}(\rho) = -\rho_{11} \log_2 \rho_{22}. \quad (4)$$

В целом процесс записи и воспроизведения информации в резонансной среде [7, 8] можно представить в виде рис. 1.

Полученная структура энтропии фон Неймана показывает, что она не может быть хорошей мерой квантовой информации в случае наличия когерентности в системе. Она мало чувствительна к изменению недиагональной части матрицы плотности, в которой заложена информация о квантовых фазах. Подходящей мерой квантовой информации при наличии когерентности в системе может служить K — сложность и приложения алгоритмической теории информации к описанию квантовых информационных процессов [7, 8].

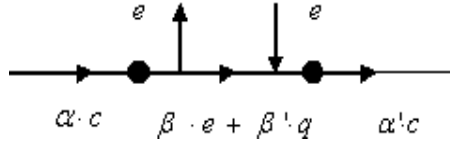


Рис. 1. Преобразование информации в оптическом эхо процессоре. $\alpha \cdot c$ — входящие в квантовую систему классические c — биты, $\beta \cdot e + \beta' \cdot q$ — информация, хранящаяся в квантовой системе в виде виртуальных и квантовых битов, $\bar{e}$ — виртуальные квантовые антибиты, возникающие из-за перепутывания состояний квантовой системы с состояниями резервуара, $\alpha' \cdot c$ — воспроизводимая классическая информация

3. Квантовая структурная информация в среде с фазовой памятью

Поскольку носителем структурной информации в резонансной среде являются переходные динамические решетки, описываемые матрицей плотности, то структурная информация оказывается заложенной в амплитудно-фазовой структуре матрицы плотности ρ . Сопоставим такой матрице взвешенный граф.

В качестве объекта рассмотрим граф G , соответствующий матрице плотности системы элементы которого $\in V(G)$, где V — конечное множество, состоящее из N вершин (помеченных), соответствующих диагональным элементам матрицы плотности и q ребер, соответствующих недиагональным элементам. Таким образом $V = \Gamma \cup Q$, где Γ — множество, содержащее элементы вершин графа, а Q — множество, содержащее элементы ребер.

Относительной сложностью K объекта G будем считать минимальную длину $l(p)$ программы p получения из G объекта G_0 . Определим количество структурной информации в G относительно G_0 как

$$J = K(G, G_0) - K(G_0). \quad (5)$$

Алгоритмический процесс получения из объекта G объекта G_0 расчленим на отдельные шаги ограниченной сложности. Каждый шаг состоит в переработке возникшего к этому шагу состояния объекта G_k в состояние G_{k+1} :

$$G^{k+1} = D_k(G^k). \quad (6)$$

Оператор D является набором правил по переработке активной части объекта G . Таким образом

$$G_0 = D(G). \quad (7)$$

Поскольку потенциальная квантовая информация заложена в когерентной части матрицы плотности, активной частью объекта G будем считать элементы $\in Q$. Оператор D определим как оператор удаления (уничтожения) любыми возможными способами элементов из соответствующей активной части объекта G :

$$D(Q) = 0. \quad (8)$$

Выполнение процедуры (8) приводит к ансамблю множеств $Q^{(k)}$. Так как взвешенному графу G соответствует матрица плотности

$$\rho = \sum_{i,j=1}^N \rho_{ij} P_{ij}, \quad (9)$$

где P_{ij} - проективные матрицы (имеют элемент ij равный 1, а остальные равны нулю), то сумма $S(t_0)$ величин элементов активной части объекта в начальный момент времени будет:

$$S(t_0) = \text{abs} \left(\sum_{i \neq j} \rho_{ij}(t_0) \right). \quad (10)$$

Вычисляя соответствующую сумму $S'(t) = \sum S^{(k)}(t)$ в момент времени t для ансамбля множеств $Q^{(k)}$, окончательно получим:

$$J_q = \log_2 \left(\frac{S'(t)}{S(t_0)} \right). \quad (11)$$

Таким образом, выражение (11) с учетом (10) определяет количество квантовой информации системы в q -битах.

4. Процесс преобразования дискретной классической информации в структурную квантовую информацию

Рассмотрим преобразование классической информации $J_c(A)$, заложенной в объектный лазерный импульс, при его воздействии на систему двухуровневых атомов в квантовую информацию J_q , носителями которой являются суперпозиционные состояния атомов.

Объектный импульс представим как последовательность (эшелон) n прямоугольных лазерных импульсов, разделенных произвольными нановременными интервалами. Обозначим временные интервалы как τ_η ($\eta = 1 \dots n$). Тогда $\varepsilon_\eta > 0$ будет соответствовать наличию импульса, а $\varepsilon_\eta = 0$ — временному интервалу. Длительность всего эшелона импульсов будет $\delta t = \sum \tau_\eta$ при условии $\delta t \ll T_1, T_2$, где T_1 и T_2 — времена продольной и поперечной необратимой релаксации рассматриваемой системы.

Для описания процесса преобразования классической информации в квантовую наиболее подходящим определением классической информации может служить дифференциальная информационная энтропия Фурье-спектра эшелона лазерных импульсов, поскольку в резонансной среде носителями информации являются q -биты, распределенные в пределах неоднородно уширенной линии резонансного перехода.

В общем случае напряженность Фурье-компоненты электрического поля эшелона импульсов будет иметь вид:

$$E(\nu') = \sum_{\eta=1}^n \varepsilon_\eta \int_{t_{\eta-1}}^{t_\eta} e^{-i2\pi\nu't} dt, \quad (12)$$

где ν' — частоты Фурье-спектра, а момент времени t_η начала действия η -го импульса определим как

$$t_\eta = t_0 + \sum_{k=1}^{\eta} \tau_k$$

и будем считать начальный момент времени $t_0 = 0$. Тогда из (12) для величины амплитуды Фурье-компоненты электрического поля эшелона импульсов получим:

$$A(\omega') = |E(\omega')| = \sqrt{\text{Re}(E(\omega'))^2 + \text{Im}(E(\omega'))^2}, \quad (13)$$

где $\omega' = 2\pi\nu'$,

$$\operatorname{Re}(E(\omega')) = \sum_{\eta=1}^n \varepsilon_{\eta} \tau_{\eta} \sin c(\omega' \tau_{\eta}/2) \cos \left(\omega' \left(2 \sum_{k=1}^{\eta} \tau_k - \tau_{\eta} \right) / 2 \right), \quad (14)$$

$$\operatorname{Im}(E(\omega')) = \sum_{\eta=1}^n \varepsilon_{\eta} \tau_{\eta} \sin c(\omega' \tau_{\eta}/2) \sin \left(\omega' \left(2 \sum_{k=1}^{\eta} \tau_k - \tau_{\eta} \right) / 2 \right). \quad (15)$$

Дифференциальную информационную энтропию Фурье-спектра эшелона лазерных импульсов определим как $J'_c = J_c - J_{c_0}$, где

$$J_c = - \int_{-\infty}^{\infty} p(\omega') \log_2 p(\omega') d\omega', \quad (16)$$

$$p(\omega') = \frac{A(\omega')}{\int_{-\infty}^{\infty} A_0(\omega') d\omega'}, \quad (17)$$

где $A_0(\omega')$ определяется из выражения (13) при одинаковых временных интервалах τ_{η} , J_{c_0} определяется аналогично (16) при одинаковых амплитудах ε_{η} и временных интервалах τ_{η} в выражениях (14) и (15).

Для нахождения величины квантовой информации (алгоритмической или фон Неймана) надо вычислить матрицу плотности резонансной системы после воздействия объектного импульса (эшелона).

Найдем матрицу плотности при взаимодействии атома с отдельной Фурье - компонентой поля эшелона импульсов с последующим усреднением по всем частотам. Напряженность электрического поля Фурье - компоненты поля импульса запишем как

$$\tilde{E}(\omega') = \frac{1}{2} \left[E^*(\omega') e^{i(\omega - \omega')t} + E(\omega') e^{-i(\omega - \omega')t} \right]. \quad (18)$$

Уравнение для Фурье-компоненты одночастичной матрицы плотности в этом случае запишем в виде

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [B, \tilde{\rho}], \quad (19)$$

где

$$\begin{aligned} B &= \tilde{J}_{c_0} - \hbar A + \tilde{V}, \quad J_{c_0} = \hbar(\Omega - \Omega') P_{22}, \quad A = (\omega - \omega') P_{22}, \\ e^{\pm i A t} &= P_{11} + P_{22} e^{\pm i(\omega - \omega')t}, \quad \tilde{V} = -\frac{1}{2} d [E^*(\omega') P_{12} + E(\omega') P_{21}], \\ B &= \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2} d E^*(\omega') \\ -\frac{1}{2} d E(\omega') & \hbar(\omega' - \Omega') \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

d — дипольный момент резонансного перехода, а P_{ij} — проективные матрицы (имеют элемент ij равный 1, а остальные = 0).

Решение уравнения (19) запишем в виде

$$\tilde{\rho}(t) = e^{-i\hbar^{-1} B t} \rho(0) e^{i\hbar^{-1} B t}. \quad (20)$$

Окончательный результат для величины квантовой алгоритмической информации будет иметь вид:

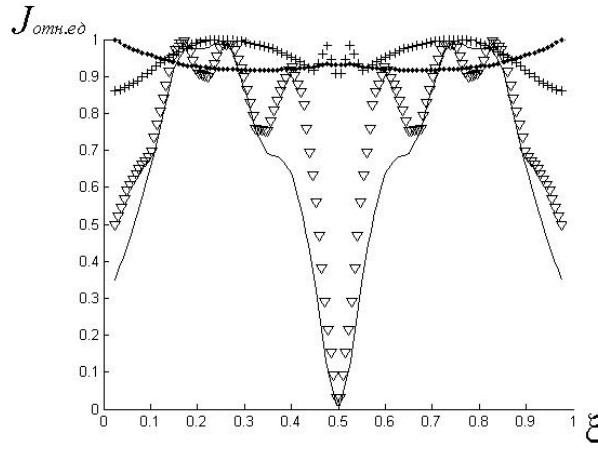


Рис. 2. Информационные меры в случае изменения положения среднего импульса в эшелоне объектного импульса. $\xi = \tau_1/(\tau_1 + \tau_2)$; $\theta = \pi/2$ — площадь объектного импульса; $n = \sigma \cdot \delta t = 5$, где σ — ширина неоднородно уширенной линии, δt — длительность эшелона импульсов.

∇ — J_c , классическая информация;

— — J_q , квантовая информация;

● — J_{fn-Re} , действительная часть комплексной энтропии фон Неймана;

+ — J_{fn-Im} , мнимая часть комплексной энтропии фон Неймана

$$J_q = \int_{-\infty}^{\infty} p(\omega') d\omega' \int_{-\infty}^{\infty} g(\Omega') J_q(\omega', \Omega') d\Omega', \quad (21)$$

где $g(\Omega')$ — функция распределения по частотам неоднородно уширенной линии резонансного перехода, а $J_q(\omega', \Omega')$ определяется выражением (11).

Аналогично для энтропии фон Неймана будем иметь

$$J_{fn} = \int_{-\infty}^{\infty} p(\omega') d\omega' \int_{-\infty}^{\infty} g(\Omega') J_{fn}(\rho(\omega', \Omega')) d\Omega', \quad (22)$$

где $J_{fn}(\rho(\omega', \Omega'))$ определяется выражением (3). После воздействия на резонансную среду объектного импульса, несущего классическую информацию, она оказывается распределенной между отдельными изохроматами неоднородно уширенной линии, то есть возникает «информационно - фазовая решетка» в пределах неоднородно уширенной линии резонансного перехода. Каждый отдельный q-бит может содержать классическую часть информации (диагональная часть матрицы плотности) и амплитудную квантовую часть информации (недиагональная часть матрицы плотности).

В случае, когда информация заложена в нановременные интервалы между лазерными импульсами, минимальной структурой несущей информацию, является последовательность трех импульсов с неодинаковыми временными интервалами τ_1 и τ_2 между ними. Для такой структуры результат преобразования $J_c \rightarrow J_q$ и $J_c \rightarrow J_{fn}$ представлен на рис. 2 и рис. 3.

На рис. 2 представлены значения информационных мер при изменении положения среднего возбуждающего импульса в эшелоне (объектный импульс состоит из 3-х импульсов). В данном случае наибольший коэффициент корреляции получается между классической и квантовой информацией $R_{J_c-J_q} = 0,92$, между классической информацией и энтропией фон Неймана $R_{J_c-J_{fn}} = -0.39$, между классической информацией и действительной частью комплексного значения энтропии фон Неймана $R_{J_c-J_{fn_Re}} = -0.41$, между классической и мнимой частью комплексного значения энтропии фон Неймана $R_{J_c-J_{fn_Im}} = 0.53$.

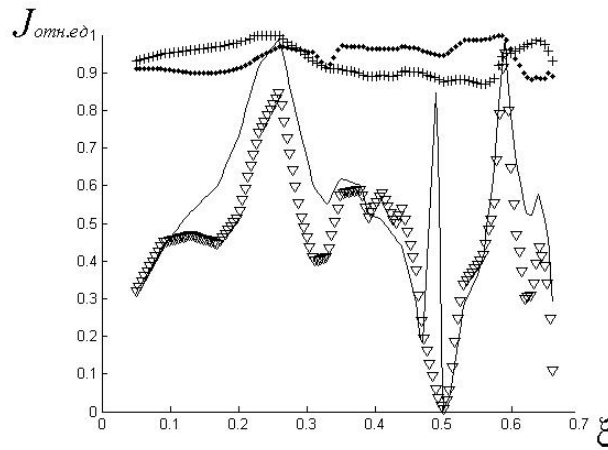


РИС. 3. Информационные меры в случае изменения положения крайнего импульса в эшелоне объектного импульса. $\xi = \tau_1 / (\tau_1 + \tau_2)$; $\theta = \pi/2$ — площадь объектного импульса; $n = \sigma \cdot \delta t > 4$, где σ — ширина неоднородно уширенной линии, δt — длительность всего эшелона импульсов.

∇ — J_c , классическая информация;

— — J_q , квантовая информация;

● — J_{fn-Re} , действительная часть комплексной энтропии фон Неймана;

+ — J_{fn-Im} , мнимая часть комплексной энтропии фон Неймана

На рис. 3 представлены значения информационных мер при изменении положения крайнего возбуждающего импульса в эшелоне (объектный импульс состоит из 3-х импульсов). Аналогично, наибольший коэффициент корреляции получается между классической и квантовой информацией $R_{J_c-J_q} = 0.74$, между классической информацией и энтропией фон Неймана $R_{J_c-J_{fn}} = 0.34$, между классической информацией и действительной частью комплексного значения энтропии фон Неймана $R_{J_c-J_{fn_Re}} = 0.35$, между классической и мнимой частью комплексного значения энтропии фон Неймана $R_{J_c-J_{fn_Im}} = 0.34$.

Таким образом, наибольшая корреляция наблюдается между классической и квантовой информацией, а с энтропией фон Неймана величина корреляции классической информации значительно меньше. Это показывает, что фон Неймановская энтропия мало пригодна для описания процессов преобразования классической информации в квантовую и более подходящей является мера, основанная на алгоритмической теории информации J_q .

5. Заключение

Наилучшей классической информационной мерой в случае кодирования информации в нановременных интервалах, является дифференциальная информационная энтропия Фурье-спектра эшелона лазерных импульсов. При преобразовании классической информации в квантовую, наиболее подходящей мерой является квантовая информационная мера,

основанная на алгоритмической теории информации так как она имеет наибольшую корреляцию с классической информационной мерой. Кодирование информации в нановременных интервалах между возбуждающими лазерными импульсами приводит к минимальным искажениям информации в отклике резонансной системы.

Литература

- [1] Kalachev A. A., Samartsev V.V. Coherent phenomena in optics. — Kazan: Kazan, State University, 2003. — 280 p.
- [2] Mitsunaga M., Yano R., Uesugi N. Time and frequency-domain hybrid optical memory: 1,6kbit data storage in Eu³⁺:Y₂SiO₅ // Opt. Lett. — 1991. — 16(23). — P. 1890-1892.
- [3] Un H., Wang T., Wilson G.A., Mossberg T.W. Experimental demonstration of swept-carrier time-domain optical memory // Opt. Lett. — 1995. — 20. — P. 91-93.
- [4] Un H., Wang T., Mossberg T.W. Demonstration of 8-Gbit / in.² areal storage density based on swept-carrier frequency-selective optical memory // Opt. Lett. — 1995. — 20. — P. 1658-1660.
- [5] Schumacher B. Quantum coding // Phys. Rev. A. — 1995. — 51. — P. 2738-2747.
- [6] Cerf N. J., Adami C., Phys. Negative Entropy and Information in Quantum Mechanics // Rev. Lett. — 1997. — 79(26). — P. 5194-5197.
- [7] Nefed'ev L. A., Rusanova I. A., Information Processes in Optical Echo Holography // Optics and Spectr. — 2001. — 90(6). — P. 906-910.
- [8] Nefed'ev L. A., Rusanova I. A. Copying Quantum Information in a Three-Level Medium with a Phase Memory // Laser Physics. — 2002. — 12(3). — P. 1-6.

РАСПРОСТРАНЕНИЕ УЛЬТРАКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКЕ, ОПИСЫВАЕМОМ МОДЕЛЬЮ ДЮФФИНГА ПЯТОГО ПОРЯДКА

С. С. Оженко¹, Е. В. Казанцева², А. И. Маймистов^{1,3}

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»;

²Московский государственный технический университет радиотехники, электроники и автоматики;

³Московский физико-технический институт (государственный университет)

elena.kazantseva@gmail.com, aimaimistov@gmail.com

PACS 42.65.Sf, 52.35.Mw, 77.80.-e

Рассмотрено распространение и взаимодействие предельно коротких импульсов в сегнетоэлектрической среде, характеризуемой нелинейностями третьего и пятого порядков. Опираясь на найденные ранее аналитические решения, численно продемонстрирована устойчивость стационарных импульсов по отношению к аддитивной модуляции и столкновениям. По отношению к мультипликативной модуляции импульсы оказываются устойчивы при высокой частоте модуляции и неустойчивы по отношению к низкочастотной модуляции. Показана устойчивость электромагнитного домена при воздействии на него стационарного импульса.

Ключевые слова: предельно короткие электромагнитные импульсы, сегнетоэлектрики, параэлектрики, домены, устойчивость.

1. Введение

Достижения в области квантовой электроники сделали возможной генерацию предельно коротких импульсов электромагнитного излучения. Длительность таких импульсов оказывается порядка фемтосекунд [1]. В связи с этим возник естественный интерес к вопросу о взаимодействии таких импульсов с веществом. Актуальным, в частности, является анализ распространения предельно коротких импульсов в нелинейных диспергирующих средах в рамках различных моделей среды. Естественной основой всех моделей являются уравнения Максвелла, дополненные материальными уравнениями, определяющими поляризацию или токи, или же уравнением Шредингера для электронов, взаимодействующих с внешним электромагнитным полем.

Здесь будет рассмотрено распространение предельно коротких электромагнитных импульсов в сегнетоэлектрике, находящемся в параэлектрической фазе. Описание сегнетоэлектрика выполнено на основе модели Гинзбурга-Ландау-Девоншира в случае одноосного сегнетоэлектрика [2]. Отклик на ультракороткий импульс электромагнитного поля с учетом дисперсии и нелинейных свойств такого сегнетоэлектрика может быть описан в рамках модели Дюффинга пятого порядка. Используя приближение однонаправленных волн в [3] была получена система уравнений, описывающая распространение электромагнитных волн в такой среде.

В приближении однонаправленных волн уравнения Максвелла сводятся к волновому уравнению

$$\frac{\partial E}{\partial z} + \frac{1}{c} \frac{\partial E}{\partial t} = -\frac{2\pi}{c} \frac{\partial P}{\partial t}. \quad (1)$$

Поляризация единицы объема вещества P изменяется согласно уравнению

$$\tau_0^2 \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} + AP + BP^3 + CP^5 = E, \quad (2)$$

где τ_0 , A , B и C — феноменологические параметры модели, причем параметр A зависит от температуры как $A = a_0(T - T_C)$ и может быть положительным или отрицательным, в зависимости от температуры T . Следует отметить, что в приведенном выше уравнении отсутствует член, отвечающий за угасание колебаний, его можно не учитывать, считая длительность взаимодействия предельно короткого импульса со средой много меньше времени релаксации ее поляризации. Здесь будет рассмотрен случай, когда температура превышает температуру Кюри T_C , то есть сегнетоэлектрик в параэлектрической фазе.

Перейдем к безразмерным переменным для времени и координаты $\tau = \sqrt{A}(t - z/c)/\tau_0$, $\zeta = z/L$, а также введем безразмерные переменные $q = P/P_0$ — для поляризации и $e = E/E_0$ — для электрического поля волны. Нормировочная длина определена выражением $L = c\tau_0\sqrt{A}/2\pi$. Коэффициент кубичной нелинейности определен следующим образом $2\mu = (B/A^3)E_0^2$, коэффициент нелинейности пятого порядка есть $\varepsilon = CE_0^4/3A^5$. Нормировочные константы для поляризации и электрического поля связаны следующим образом: $P_0 = E_0/A$.

В безразмерных переменных уравнения (1) и (2) принимают вид

$$\frac{\partial e}{\partial \zeta} = -\frac{\partial q}{\partial \tau}, \quad \frac{\partial^2 e}{\partial \tau^2} + q + 2\mu q^3 + 3\varepsilon q^5 = e. \quad (3)$$

Выбирая должным образом нормировочную амплитуду поля A_0 можно получить значение μ равное $\pm 1 = \text{sgn } B$. Тогда $\varepsilon = CA/3B^2$.

Анализ решений для модели Дюффинга второй и третьей степени был представлен в работах [4], [5]. Исследование распространения короткого импульса в среде с квадратичной нелинейностью в приближении однонаправленных волн показало, что здесь существует семейство стационарных уединенных волн, соответствующих предельно коротким импульсам. Численное моделирование распространения показало, что столкновение двух стационарных импульсов не приводит к их разрушению. Было найдено, что более мощные импульсы (отличные от стационарных) распадаются на ряд отдельных, движущихся со своей скоростью импульсов, которые сохраняют свои уникальные свойства в пределах того расстояния, на котором было проведено моделирование. Столкновение двух импульсов сопровождалось сдвигом фаз каждого из них, а скорость хотя бы и незначительно, менялась после взаимодействия. Из чего был сделан вывод, что найденные стационарные импульсы не являются солитонами в строгом смысле, хотя и проявляют довольно высокую стабильность. Аналогичные результаты были получены для среды с кубической нелинейностью.

В нашем случае были так же получены формы решений в виде стационарных импульсов [3]. Если $\mu = +1$, может существовать два типа решения. Для $\varepsilon > 0$ имеем

$$e^2(\xi; \mu = +1) = \frac{2a(a+1)^2}{1 + \sqrt{1 + 4a\varepsilon} \cosh[2a^{1/2}\xi]}, \quad (4)$$

и для $\varepsilon < 0$ соответственно

$$e^2(\xi; \mu = +1) = \frac{2a(a+1)^2}{1 + \sqrt{1 - 4a|\varepsilon|} \cosh[2a^{1/2}\xi]}. \quad (5)$$

Положив $\mu = -1$, получим лишь одно решение для $\varepsilon > 0$:

$$e^2(\xi; \mu = -1) = \frac{2a(a+1)^2}{\sqrt{1+4a\varepsilon} \cosh[2a^{1/2}\xi] - 1}. \quad (6)$$

В формулах (4)–(6) новая (характеристическая) переменная $\xi = \tau - \zeta/\alpha$ определяет скорость распространения стационарного импульса в среде и введен параметр $a = \alpha - 1$, связывающий скорость распространения стационарного импульса с его амплитудой. Для краткости стационарные импульсы (4)–(6) будут называться солитонами, несмотря на то, что система (3) не является вполне интегрируемой и ее решения (4)–(6) могут быть неустойчивыми.

Особый интерес представляет распространение стационарных импульсов вида (5) в случае когда $a \rightarrow a_c = 1/4|\varepsilon|$. В [3] было показано, что в пределе, когда параметр a приближается к критическому значению a_c , солитон распадается — его амплитуда достигает определенного конечного значения, а ширина может возрастать бесконечно. Импульс принимает почти прямоугольную форму с резкими фронтами. Такие солитоны были в [3] названы электромагнитными доменами.

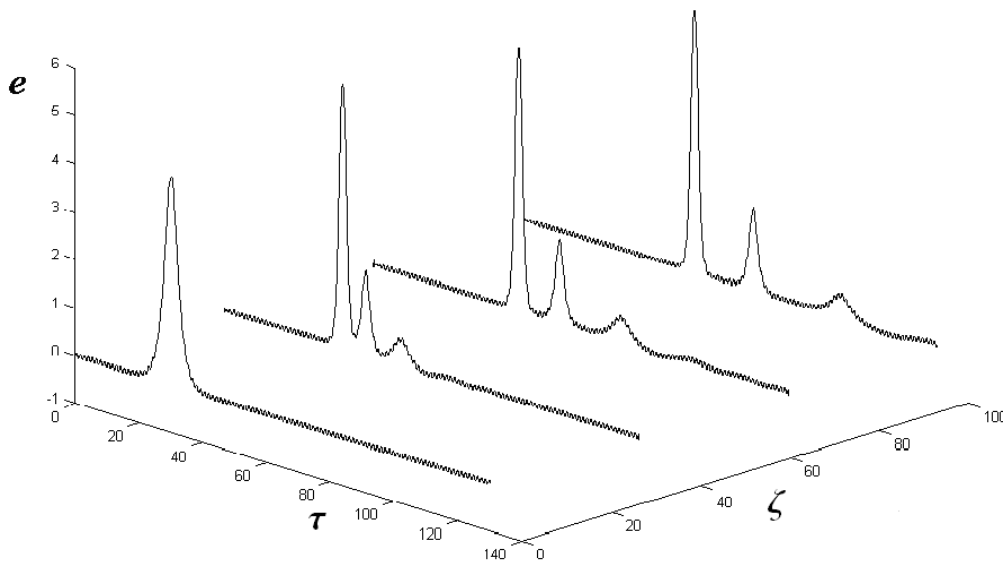


РИС. 1. Распад импульса превышающего энергию стационарного, на отдельные импульсы

2. Численное моделирование

2.1. Замечания о методе численного моделирования

Для удобства численного интегрирования представим систему (3) в виде

$$\frac{\partial e}{\partial \zeta} = -p, \quad \frac{\partial q}{\partial \tau} = p, \quad \frac{\partial p}{\partial \tau} = e - q - 2\mu q^3 - 3\varepsilon q^5. \quad (7)$$

Для решения системы (7) можно использовать любые методы численного интегрирования. Но, как оказалось, широко распространенные разностные методы, такие как: метод предиктор-корректор, метод Рунге-Кутты, а так же схема Адамса являются неустойчивыми для некоторых частных случаев. Наилучшие результаты показала комбинация неявной схемы Адамса-Моултона четвертого порядка для интегрирования третьего уравнения системы,

неявной схемы Нумерова для интегрирования второго уравнения системы и специальной разностной схемы шестого порядка [6] для интегрирования по оси ζ . Выбор неявного метода диктуется тем, что они считаются безусловно устойчивыми, что позволяет существенно увеличить шаг разностной сетки. Имело бы смысл применять неявную схему для интегрирования по оси ζ , но это приведет к существенному увеличению расхода машинного времени.

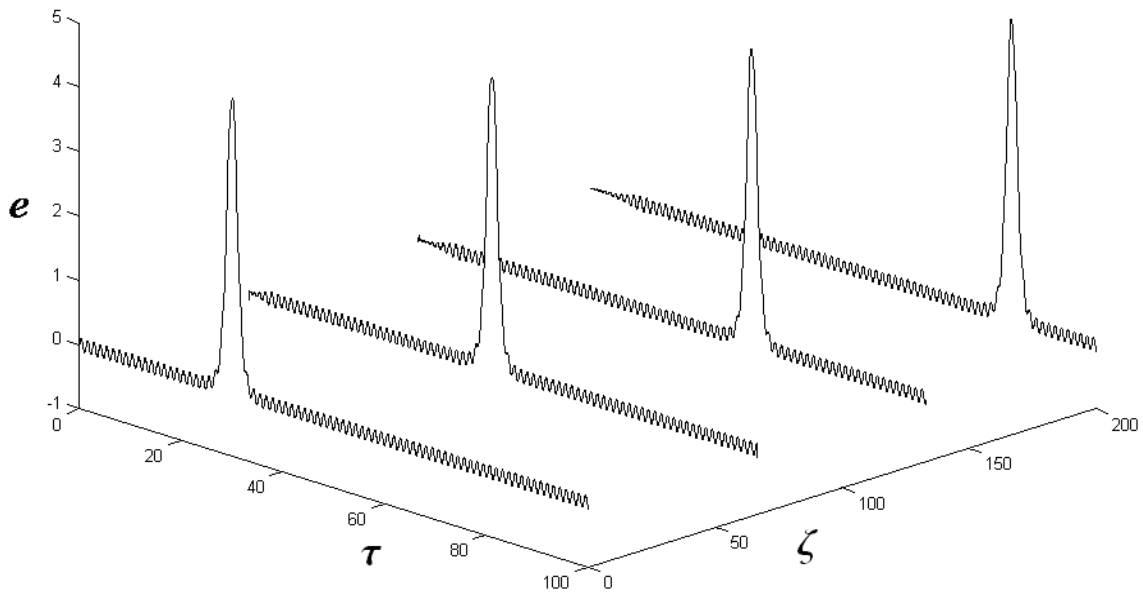


Рис. 2. Эволюция стационарного импульса при аддитивной модуляции амплитуды импульса гармонической волной

С учетом начальных и краевых условий

$$e(\zeta = 0, \tau) = e_0(\tau), \quad \lim_{|\tau| \rightarrow \infty} q(\zeta, \tau) = \lim_{|\tau| \rightarrow \infty} p(\zeta, \tau) = 0, \quad (8)$$

можно найти два интеграла движения

$$I_0 = \int_{-\infty}^{\infty} e(\zeta, \tau) d\tau, \quad I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} e^2(\zeta, \tau) d\tau.$$

В данном случае их значения определялись численно по формуле трапеций. Сохранение интегралов движения служило показателем достоверности полученных результатов.

При выборе параметров среды $\mu = +1$ и $\varepsilon = -0.124$, и, в качестве начального условия для e , стационарное решение (5) с $a = 1$, было продемонстрировано, что такой импульс распространяется без искажений до значения координаты $\zeta = 1000$. Это может служить тестом программы численного решения. Отклонения интегралов движения при этом находятся в пределах погрешности применяемых численных методов. Если на вход среды поступает импульс с энергией, превышающей энергию стационарного импульса, то по мере его распространения в среде происходит распад на ряд импульсов, каждый из которых, подобно стационарным импульсам движется со своей скоростью. На рис. 1 показан распад такого импульса при аддитивной модуляции гармоникой вида $0.1 \sin(5\tau)$.

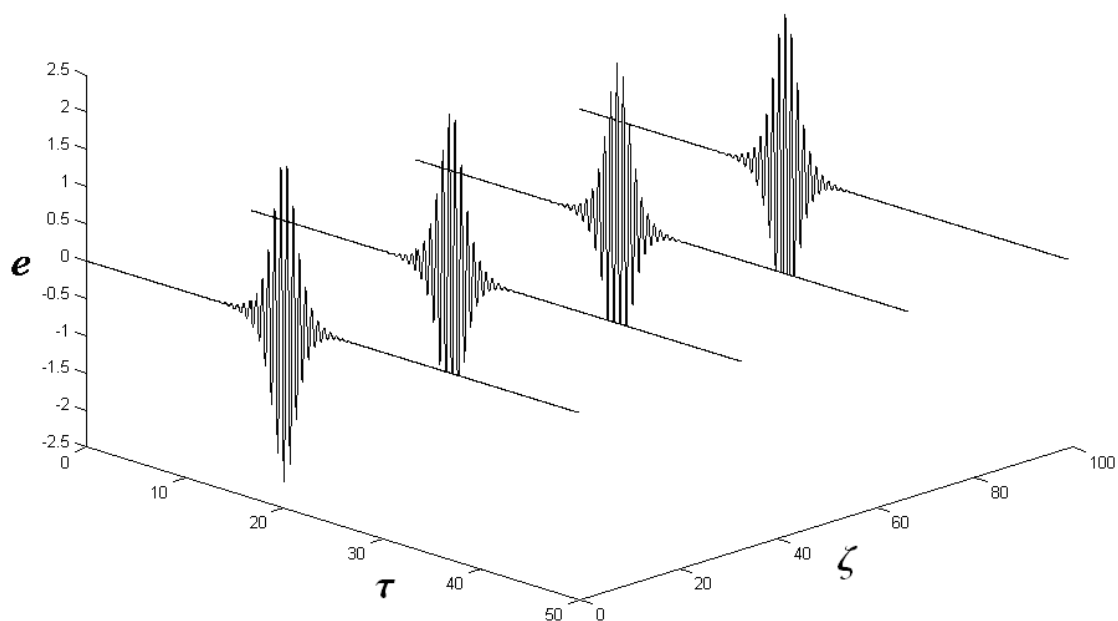


Рис. 3. Стабильность формы огибающей импульса с мультипликативной модуляцией

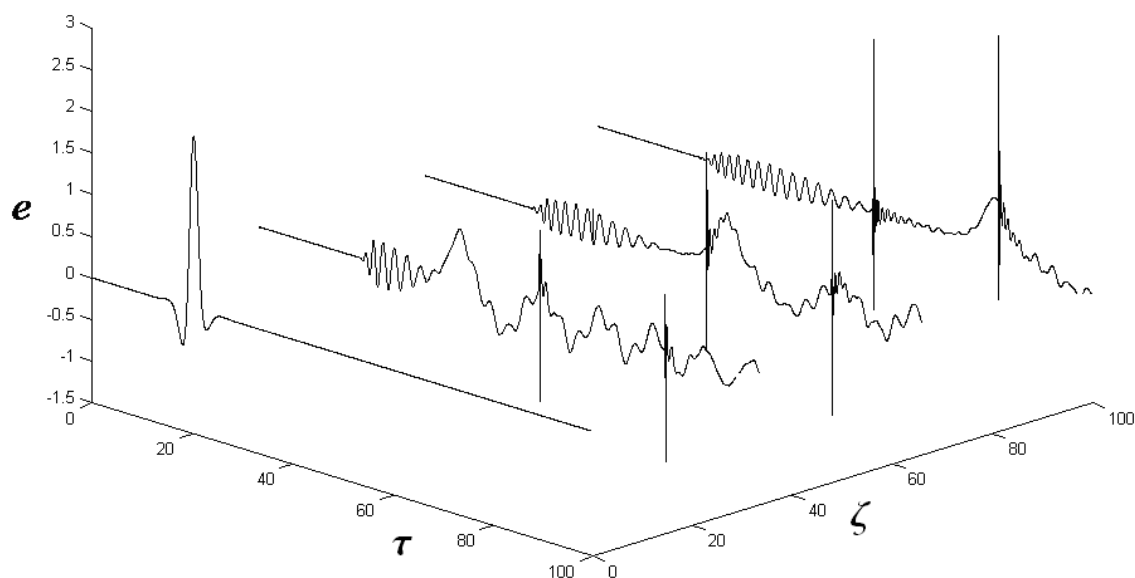


Рис. 4. Распад слабого импульса, модулированного гармонической волной

2.2. Исследование устойчивости по отношению к малым возмущениям

Интерес представляет устойчивость нелинейных волн по отношению к непрерывным возмущениям, например к регулярной модуляции огибающей. Солитоны с такой первоначальной модуляцией могут по мере распространения превратиться в импульсы с гладкой огибающей. Было рассмотрено два типа модуляции амплитуды гармонической волной — аддитивная и мультипликативная. В первом случае было найдено, что стационарный импульс распространяется на фоне непрерывной гармонической волны, сохраняя свою форму. На рис.2 представлен пример эволюции импульса с $a = 1.8$ и модуляцией вида $0.1 \sin(5\tau)$.

Было также найдено, что аддитивная высокочастотная модуляция не препятствует распаду исходного мощного импульса на ряд стационарных импульсов.

Случай мультипликативной модуляции рассматривался для импульса с параметром $a = 0.5$ и модуляцией вида $\sin(10\tau)$. Было найдено, что такой начальный импульс ведет себя подобно стационарному, но не освобождается от модуляции (рис. 3).

Однако, если понижать частоту модуляции, импульс испытывает дисперсионное расщепление. Из него выделяется медленно распространяющаяся квазигармоническая уединенная волна, а быстро распространяющаяся часть коллапсирует. На рис. 4 приведен пример разрушения стационарного импульса под действием мультипликативной низкочастотной модуляции. Расчет проведен для импульса с $a = 0.5$ и модулированного сигналом вида $\sin(\tau)$. Частота модуляции тут порядка обратной длительности импульса, и в этом смысле модуляция считается низкочастотной.

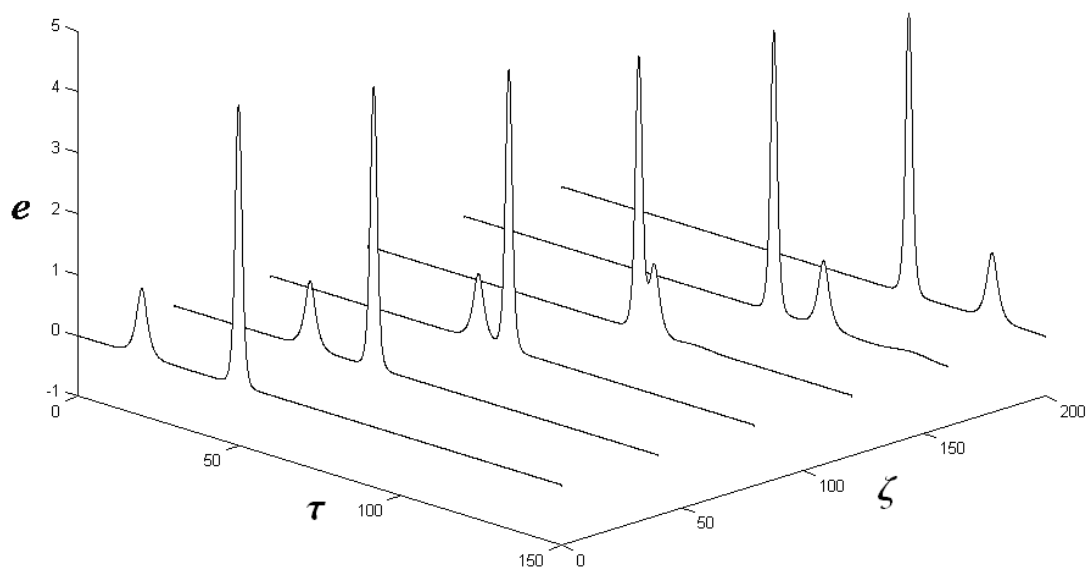


Рис. 5. Устойчивость уединенных волн по отношению к столкновениям

2.3. Исследование процесса столкновения стационарных импульсов

Столкновение двух стационарных импульсов, имеющих различные скорости, показало их значительную устойчивость к столкновениям. На рис. 5 показано столкновение двух уединенных волн характеризующихся параметрами $a = 1.8$ и $a = 0.5$. Однако при таком взаимодействии помимо начальных стационарных импульсов может образовываться еще один малый по амплитуде импульс, что свидетельствует о том, что стационарные импульсы не устойчивы по отношению к столкновениям.

2.4. Взаимодействие электромагнитного домена с солитоном

Особый интерес представляет поведение доменов при их столкновении с солитонами или с линейными квазигармоническими волнами. Здесь найдено, что для среды с $\varepsilon > -0.74$ импульсы с $a \rightarrow a_c \equiv 1/4|\varepsilon|$ ведут себя неустойчиво. Из рис. 6 видно как ведет себя такой неустойчивый импульс. Начиная с $\varepsilon = -0.74$ импульсы распространялись как устойчивые уединенные стационарные волны до значений $\zeta = 1500$.

Электромагнитные домены оказались устойчивы по отношению к аддитивной модуляции и столкновению с уединенными импульсами. На рис. 7 показано столкновение

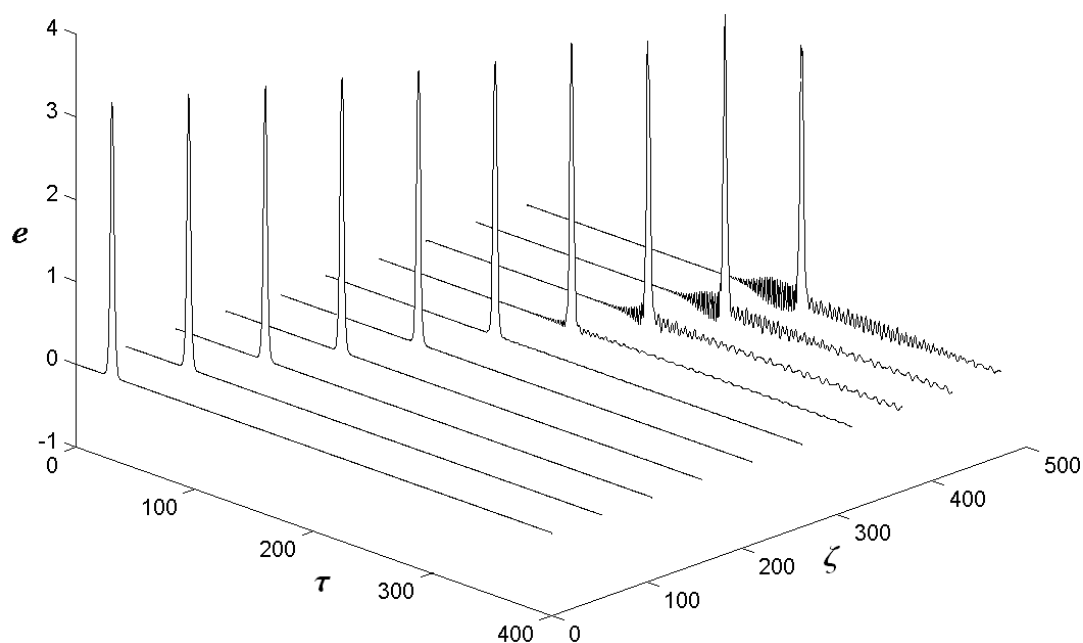


РИС. 6. Неустойчивое поведение уединенных импульсов с амплитудой, близкой к критической

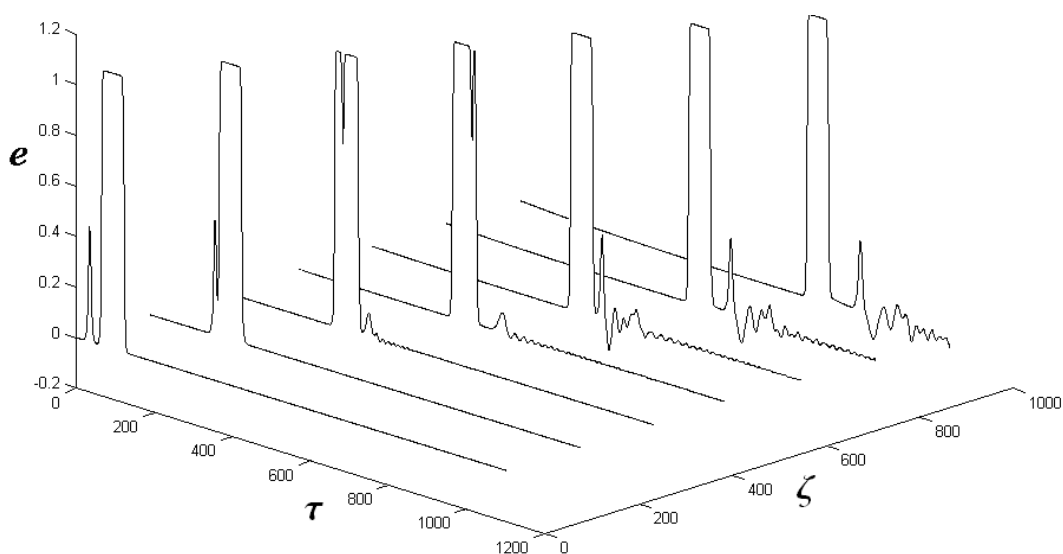


РИС. 7. Устойчивость доменов по отношению к столкновению с солитонами

солитона, характеризуемого параметром $a = 0.14$ с доменом. Хорошо видно, что солитон, сталкиваясь с доменом, меняет форму. Кроме того, процесс сопровождается излучением.

3. Заключение

В рамках поставленной задачи была спроектирована, написана и отлажена программа для численного решения уравнения (3). Численные расчеты показали, что устойчивость уединенных импульсов зависит от их амплитуды и параметра нелинейности среды. В работе так же была продемонстрирована устойчивость солитонов по отношению к аддитивной

и мультипликативной модуляции. Моделирование показало, что солитоны не вполне устойчивы по отношению к столкновению друг с другом. Их неустойчивость особенно ярко проявляется к столкновению с доменами. Численные расчеты показали, что домены устойчивы по отношению к аддитивной модуляции и столкновению с солитонами.

Литература

- [1] Morgner U., Ell R., Metzler G., Schibli T. R., Kertner F. X., Fujimoto J. G., Haus H. A., Ippen E. P. Nonlinear Optics with Phase-Controlled Pulses in the Sub-Two-Cycle Regime // *Phys.Rev.Lett.* — 2011. — 86 (24). — P. 5462-5465.
- [2] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. — М.: Наука, 1982. — 623 с.
- [3] Маймистов А.И. Распространение предельно короткого электромагнитного импульса в нелинейной среде, описываемой моделью Дюффинга пятого порядка // *Оптика и спектроскопия.* — 2003. — 94 (2). — С. 281-287.
- [4] Казанцева Е.В., Маймистов А.И. Распространение предельно коротких импульсов в нерезонансной квадратично-нелинейной среде в приближении однонаправленных волн // *Квантовая электроника.* — 2000. — 30 (7). — С. 623-628.
- [5] Kazantseva E.V., Maimistov A.I., Caputo J.G. Reduced Maxwell-Duffing description of extremely short pulses in nonresonant media // *Phys.Rev. E.* — 2005. — 71(5). — P. 056622 (12 pages).
- [6] Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. — М.: Бином, 2007. — 636 с.
- [7] Самарский А.А. Введение в численные методы. — М.: Наука, 1987. — 286 с.

СУБДОПЛЕРОВСКОЕ ЛАЗЕРНОЕ ОХЛАЖДЕНИЕ АТОМОВ ТУЛИЯ В МАГНИТО-ОПТИЧЕСКОЙ ЛОВУШКЕ И МАГНИТНОЕ УДЕРЖАНИЕ АТОМОВ ТУЛИЯ В НИЗКОГРАДИЕНТНОЙ МАГНИТНОЙ ЛОВУШКЕ

Д. Д. Сукачев^{1,2}, А. В. Соколов^{1,2}, Н. Н. Колачевский^{1,2},
Е. С. Калганова^{1,2}, А. В. Акимов^{1,2}, В. Н. Сорокин^{1,2}

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт
им. П. Н. Лебедева Российской академии наук, Москва, Россия

²Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего
профессионального образования «Московский физико-технический институт
(государственный университет)», Долгопрудный, Московская область, Россия
sukachev@gmail.com

PACS 37.10.Gh, 37.10.De, 32.30.Jc

Экспериментально исследован процесс субдоплеровского охлаждения атомов тулия в магнито-оптической ловушке (МОЛ), работающей на длине волны 410,6 нм. Без применения специального цикла субдоплеровского охлаждения достигнута температура 25(5) мК при числе атомов 3×10^6 , что существенно ниже доплеровского предела для данного перехода (240 мК). Высокая эффективность субдоплеровского охлаждения обуславливается близкими значениями g-факторов Ланде нижнего и верхнего уровней, задействованных в процессе лазерного охлаждения. Осуществлен захват ультрахолодных атомов тулия в магнитную ловушку (МЛ), образованную квадрупольным магнитным полем МОЛ (градиент поля 20 Гс/см). Загрузка атомов в МЛ осуществлена из облака, содержащего 4×10^5 атомов, предварительно охлажденных в МОЛ до субдоплеровской температуры 80 мК. В МЛ захвачено 4×10^4 атомов при температуре 40 мК. По характеру распада населенности в ловушке определено время жизни (0,5 с) и наложено ограничение на константу скорости неупругих бинарных столкновений спин-поляризованных атомов тулия в основном состоянии $g_{in} < 10^{-11} \text{ см}^3\text{с}^{-1}$.

Ключевые слова: лазерное охлаждение, магнито-оптическая ловушка, магнитная квадрупольная ловушка, магнитное диполь-дипольное взаимодействие, атом тулия, суб-доплеровское охлаждение.

1. Введение

Лазерное охлаждение редкоземельных атомов тулия было впервые продемонстрировано в ФИАНе в 2010 г. [1]. Интерес к атомам тулия (единственный стабильный изотоп ^{169}Tm имеет ядерный спин $I = 1/2$) обусловлен спецификой электронных уровней лантаноидов с незаполненной внутренней оболочкой. Так, магнито-дипольный переход на длине волны 1,14 мкм между подуровнями тонкой структуры основного состояния в ^{169}Tm имеет малую ширину порядка 1 Гц [2] и слабо подвержен влиянию статического и динамического штарковских сдвигов [3], что делает его привлекательным для использования в оптических часах на основе оптических решеток [4].

Атом тулия обладает относительно большим магнитным моментом ($4\mu_B$, μ_B — магнетон Бора) в основном состоянии. Это позволяет напрямую наблюдать влияние магнитного анизотропного дальнегодействующего диполь-дипольного взаимодействия. Помимо того, что

взаимодействие существенно отличается от ван-дер-ваальсовского, открывается возможность управлять им с помощью внешних полей [5] и использовать такие сильнокоррелированные атомные системы как модель твердотельных сверхпроводников (см., например, [6]). Особенно ярко диполь-дипольные взаимодействия проявляются в квантовых конденсатах [7]. Так, в Бозе-конденсате атомов хрома [8] наблюдалось явление квантового ферромагнетизма [9,10], а в атомах рубидия — фазовый переход металл-изолятор [11]. Влияние магнитных взаимодействий наблюдается и в неконденсированных средах, обуславливая, например, анизотропный разлет облака охлажденных атомов диспрозия [12]. Для проведения всех указанных экспериментов необходимо, во-первых, охладить атомы до очень низких температур порядка нескольких микрокельвинов, а во-вторых, уметь удерживать атомы в недиссипативных ловушках (например, в магнитной квадрупольной или оптической дипольной ловушке).

Для первичного охлаждения и удержания относительно большого числа атомов (около миллиона) чаще всего используется магнито-оптическая ловушка (МОЛ), состоящая из комбинации специально подготовленных световых полей и квадрупольного магнитного поля с осевым градиентом порядка 10 Гс/см [13].

Для большинства атомов минимальная температура, достижимая в МОЛ, совпадает с доплеровским пределом [14] и для получения более низких температур приходится осуществлять дополнительные циклы суб-доплеровского охлаждения [15]. Это связано с наличием в МОЛ магнитного поля, которое препятствует эффективному субдоплеровскому охлаждению [16, 17]. Однако, в случае атомов тулия (и большинства других редкоземельных атомов), наличие вакансии во внутренней 4f электронной оболочке атомов тулия, приводит к близким значениям g-факторов Ланде уровней, задействованных в лазерном охлаждении, что позволяет наблюдать эффективное суб-доплеровское охлаждение в МОЛ [18, 19] до температуры 25(5) мК, что на порядок ниже доплеровского предела (240 мК) для используемого перехода. Кроме этого основное состояние атома тулия обладает большим магнитным моментом ($4\mu_B$), что позволяет удерживать холодные атомы тулия в квадрупольной магнитной ловушке (МЛ), образованной магнитным полем МОЛ [20]. Исследование атомов в МЛ дает возможность осуществить предварительный анализ неупругих бинарных столкновений спин-поляризованных атомов тулия в основном состоянии, что важно при решении задачи Бозе-конденсации лантаноидов.

2. Экспериментальная установка

В экспериментах использовалась установка, описанная в работе [20]. Атомы тулия захватывались в МОЛ из пучка, предварительно замедленного в зеemanовском замедлителе [21]. Для охлаждения и удержания атомов использовалась классическая схема ловушки с тремя ортогональными парами встречных лазерных пучков с σ^- и σ^+ поляризациями. Охлаждение осуществлялось на переходе $4f^{13}6s^2(J = 7/2, F = 4) \rightarrow 4f^{12}5d_{3/2}6s^2(J = 9/2, F = 5)$ с длиной волны 410,6 нм, который возбуждался второй гармоникой лазера на сапфире, активированном титаном. Частотная отстройка охлаждающего излучения могла варьироваться в диапазоне нескольких γ относительно центра линии, где $\gamma = 10(4)$ МГц — естественная ширина линии [2], которая соответствует доплеровскому пределу в 240 мК. Для регистрации использовалась CCD-камера, на которую отображалось облако атомов тулия с увеличением 1:1.

3. Субдоплеровское охлаждение

Температура атомов измерялась по баллистическому разлету облака после выключения всех лазерных пучков [18] (при этом исчезает удерживающая атомы сила и облако

начинает расширяться). При условии, что начальный пространственный профиль концентрации атомов имеет гауссов вид, и распределение по скоростям является Максвелловским, зависимость радиуса облака $r(t)$ (по уровню $1/e$) от времени разлета t имеет следующий вид:

$$r(t) = \sqrt{r(0)^2 + \frac{2k_B T}{m} t^2} \quad (1)$$

где m — масса атома, k_B — постоянная Больцмана, T — искомая температура.

На рис. 1а представлены типичные фотографии расширяющегося облака атомов.

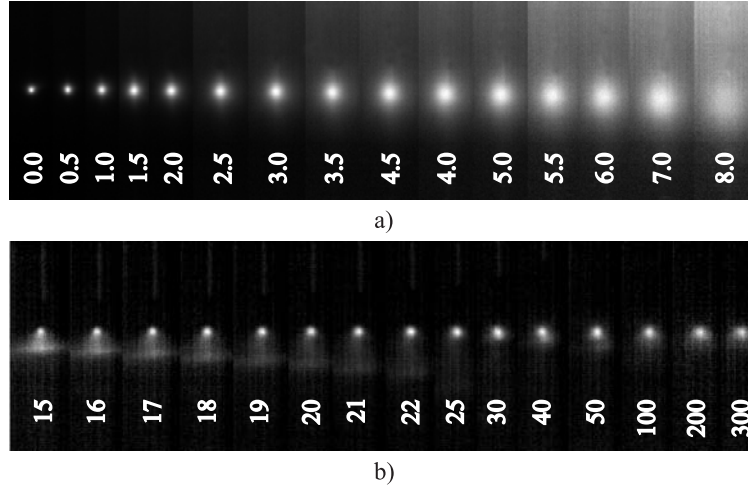


РИС. 1. Серии фотографий разлетающегося облака холодных атомов после выключения световых пучков. Цифры обозначают время в мс, прошедшее с момента выключения света. (а) Разлет в случае отсутствия магнитного поля. Облако изотропно расширяется и падает в поле силы тяжести. Через время порядка 10 мс сигнал от облака становится неразличим на фоне шумов. (б) Разлет в присутствии квадрупольного магнитного поля. Яркое неподвижное пятно в центре — атомы, захваченные в МЛ. Также видны атомы, не захваченные в МЛ и падающие под действием силы тяжести

Для определения, имеет ли место субдоплеровское охлаждение в МОЛ достаточно сравнить зависимость конечной температуры атомов от отстройки частоты охлаждающих пучков от резонанса ($-\delta$). В доплеровской теории эта зависимость определяется выражением [14] (в предположении малой интенсивности света):

$$T(\delta) = \frac{\gamma}{2k_B} \frac{\delta^2 + \gamma^2/4}{|\delta| \cdot \gamma} \quad (2)$$

где γ — естественная ширина линии, на которой происходит охлаждение, а k_B — постоянная Больцмана. Для субдоплеровского охлаждения зависимость совершенно иная [15]:

$$T \propto \frac{1}{\delta} \quad (3)$$

На рис. 2 представлены результаты измерения зависимости температуры атомов в МОЛ от частотной отстройки лазерных пучков. Видно, что температура монотонно убывает с ростом модуля частотной отстройки (рис.2), что свидетельствует о наличии субдоплеровского охлаждения в МОЛ. Наименьшая зарегистрированная температура составила 25(5) мК [13].

4. Магнитная ловушка

На рис. 1 представлены фотографии разлетающегося облака атомов после выключения всех лазерных пучков. Видно, что при включенном квадрупольном магнитном поле (рис. 1б) часть атомов из МОЛ удерживается в течение времени, которое существенно превышает характерное время разлета атомов из МОЛ, когда магнитное поле выключено (рис. 1а). Это и есть атомы тулия, захваченные в МЛ [22].

Большой магнитный момент ($4 \mu_B$) основного состояния позволяет захватывать холодные атомы тулия в магнитную ловушку (МЛ), сформированную квадрупольным магнитным полем МОЛ. Градиент поля в такой ловушке составляет 20 Гс/см. В центре ловушки создается минимум магнитного поля, поэтому в МЛ могут захватываться только атомы в таком квантовом состоянии, потенциальная энергия которого увеличивается с ростом поля [23]. При характерном размере МЛ порядка 1 см ее глубина для атомов тулия составляет десятки мК, что позволяет захватывать атомы, находящиеся в определенных (см. ниже) квантовых состояниях, непосредственно из МОЛ. В работающей МОЛ атомы непрерывно рассеивают свет различной поляризации, что приводит к перемешиванию магнитных подуровней. В МЛ будут удерживаться только те атомы, для которых магнитная сила будет больше силы тяжести, что для параметров нашего эксперимента выполняется для атомов с магнитными квантовыми числами основного состояния $m_F = 2, 3, 4$. Учитывая, что изначально присутствуют 9 равнозаселенных магнитных подуровней основного состояния ($F = 4$), в МЛ захватывается не более трети атомов из МОЛ.

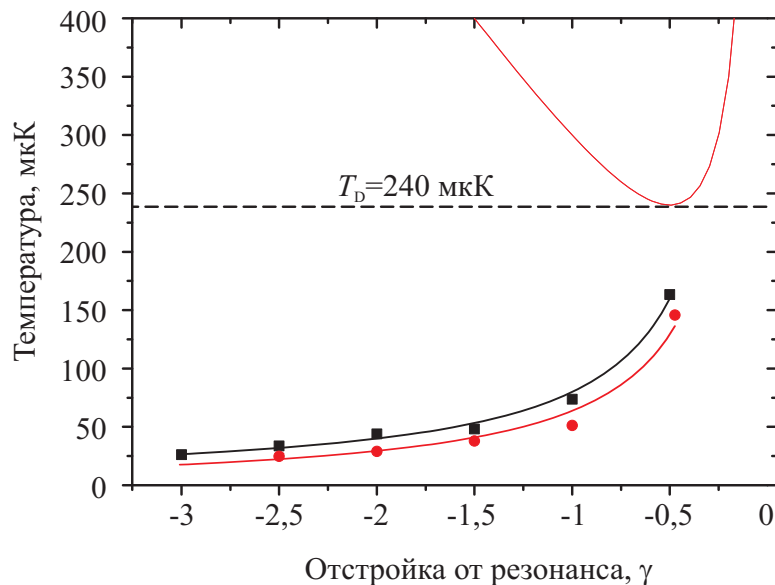


РИС. 2. Зависимость температуры атомов от отстройки охлаждающих пучков при двух значениях параметра насыщения $S = I/I_{sat}$, где $I_{sat} = 18 \text{ мВт/см}^2$ — интенсивность насыщения. Квадратики — $S = 2$, кружочки — $S = 0.4$. Сплошные линии соответствуют теоретической модели (3). Сверху изображена температура в доплеровской теории (2)

Для исследования МОЛ и МЛ использовался метод баллистического разлета. После полной загрузки МОЛ световые пучки выключались на некоторый интервал времени Δt . После этого облако подсвечивалось коротким резонансным импульсом света и его люминесценция отображалась с увеличением 1:1 на ПЗС-камеру. На рис.1 представлены

фотографии разлета облака атомов с выключенным (а) и включенным (б) квадрупольным магнитным полем МОЛ.

В экспериментах с МЛ использовался режим работы МОЛ, в котором число атомов составляло 4×10^5 при температуре 80 мК.

5. Температура атомов в МЛ

Температуру атомов в МЛ можно определить, измерив пространственный профиль концентрации атомов в МЛ [22]. Введем следующие обозначения: $\bar{\mu}$ – эффективный магнитный момент атома, $b_x = dB_x/dx$, $b_y = dB_y/dy$, $b_z = dB_z/dz$ – градиенты магнитного поля, m – масса атома g – ускорение свободного падения, направленное вдоль оси z . Тогда интегральные профили концентрации на вертикальную (4) и горизонтальную (5) оси запишутся как:

$$p_z(z) = N_z \exp \left(-2 \frac{|z|}{\tilde{z}} - 2\tilde{g} \frac{z}{\tilde{z}} \right) \left(1 + 2 \frac{|z|}{\tilde{z}} \right) \quad (4)$$

$$p_x(x) = N_x \exp \left(-2 \frac{|x|}{\tilde{x}} \sqrt{1 - \tilde{g}^2} \right) \left(1 + 2 \frac{|x|}{\tilde{x}} \sqrt{1 - \tilde{g}^2} \right) \quad (5)$$

где N_z и N_x – нормировочные множители и

$$\begin{aligned} \tilde{z} &= 2k_B T / (\bar{\mu} b_z), \quad \tilde{g} = mg / (\bar{\mu} b_z), \\ \tilde{x} &= 2k_B T / (\bar{\mu} b_x), \quad \tilde{y} = 2k_B T / (\bar{\mu} b_y) \end{aligned} \quad (6)$$

Температура будет выражаться следующим образом:

$$T = \frac{mg}{2k_B} \frac{\tilde{z}}{\tilde{g}} \quad (7)$$

Вертикальный профиль магнитной ловушки, измеренный через $\Delta t = 100$ мс после выключения световых пучков, представлен на рис.3 (слева). Температур атомов в МЛ составила 40(10) мК, что эквивалентно скорости 10 см/с. Полная ширина профиля на полувысоте составляет 430(40) мкм.

6. Динамика числа атомов и влияние столкновений в МЛ

Зависимость числа атомов в МЛ от времени, прошедшего после выключения световых полей описывается выражением [22]:

$$N(t) = \frac{N(0) \exp(-t/\tau)}{1 + \frac{g_{in}}{8} \frac{(1-\tilde{g})^2}{\pi \tilde{x} \tilde{y} \tilde{z}} N(0) \tau (1 - \exp(-t/\tau))} \quad (8)$$

где $g_{in} = \langle \sigma v \rangle$ – константа скорости неупругих бинарных столкновений (σ – сечение столкновений, v – скорость атомов) атомов тулия в основном состоянии друг с другом. Мы полагаем, что они связаны с магнитным диполь-дипольным взаимодействием [24], приводящим к переходу атомов тулия в состояния с меньшими m_F , которые не удерживаются в МЛ. Параметр τ в формуле (5) описывает линейные потери, не имеющие отношения к бинарным столкновениям.

На рис.3 (справа) представлена зависимость полного числа атомов в МЛ от времени Δt , прошедшего после выключения световых пучков МОЛ. Наибольшее число захваченных атомов составило 4×10^4 , т.е. примерно 10% от числа атомов в МОЛ. Плотность атомов в центре магнитной ловушки составляла порядка 10^9 см $^{-3}$. К сожалению, малая плотность атомов не позволила в нашем случае напрямую наблюдать влияние неупругих бинарных столкновений. Однако, аппроксимируя зависимость числа атомов от времени формулой (8), как показано на рис.3 (справа), мы получили ограничение сверху на константу $g_{in} <$

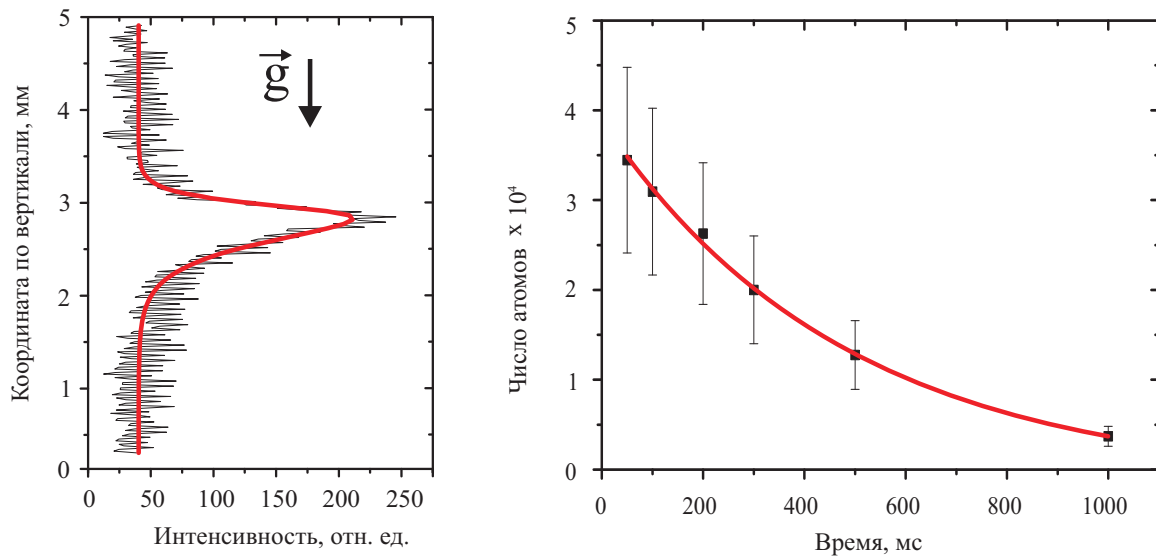


Рис. 3. Слева. Вертикальный интегральный профиль магнитной ловушки и его аппроксимация формулой (4); Справа. Зависимость числа атомов в МЛ от времени, прошедшего после выключения лазерных пучков. Точки — экспериментальные данные, сплошная кривая — аппроксимация формулой (8), в которой $\tau=0.5$ с, $g_{in} < 10^{-11}$ см³с

10^{-11} см³с⁻¹, которое согласуется с предыдущими исследованиями, выполненными при температуре 1 мК [25]. Стоит отметить, что значения константы скорости на уровне 10^{-12} — 10^{-11} см³с⁻¹ были получены для других сильномагнитных атомов (Er [9], Dy [26,8], Cr [26]).

7. Заключение

Таким образом, нами экспериментально исследован процесс лазерного охлаждения атомов тулия в магнито-оптической ловушке. Показано, что благодаря уникальной структуре уровней субдоплеровское охлаждение наблюдается непосредственно в МОЛ без применения дополнительного цикла субдоплеровского охлаждения. Наименьшая температура в МОЛ составила 25(5) мК при числе атомов 3×10^6 и радиусе облака 80 мкм, что соответствует фазовой плотности 10^{-5} .

Была обнаружена и исследована МЛ, образованная квадрупольным магнитным полем МОЛ. МЛ содержала 4×10^4 атомов при температуре 40 мК и имела диаметр порядка 0.4 мм. По характеру распада населенности МЛ получено ограничение на константу скорости неупругого рассеяния атомов тулия в основном состоянии $g_{in} < 10^{-11}$ см³с⁻¹, что, по-видимому, делает невозможным достижение Бозе-конденсации атомов в магнитной ловушке. Для этой цели может быть использована оптическая дипольная ловушка, в которую удастся загрузить спин-поляризованные атомы на самом нижнем магнитном подуровне основного состояния [8].

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки научных исследований молодых российских ученых — докторов наук (МД-669.2011.8), РФФИ (грант 12-02-01266-а) и Программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Экстремальные световые поля и их приложения».

Литература

- [1] Sukachev D., Sokolov A., Chebakov K. et al., Magneto-optical trap for thulium atoms // *Phys. Rev. A.* — 2010. — 82. — P.011405-011408 (R).
- [2] Kolachevsky N., Akimov A., Tolstikhina I. et al., Blue laser cooling transitions in Tm I // *Appl. Phys. B.* — 2007. — 89. — P. 589-594.
- [3] Овсянников В.Д., частные обсуждения.
- [4] Takamoto M., Hong F.-L., Higashi R. and Katori H., An optical lattice clock // *Nature.* — 2005. — 435. — P. 321-324.
- [5] Giovanazzi S., Gorlitz A., Pfau T. Tuning the Dipolar Interaction in Quantum Gases // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — 89. — P. 130401-130404.
- [6] Lewenstein M., Sanpera A., Ahufinger V., Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond // *Adv. in Phys.* — 2007. — 56. — P. 243- 379.
- [7] Lahaye T., Menotti C., Santos L. et al. The physics of dipolar bosonic quantum gases // *ReP. Prog. Phys.* — 2009. — 72. — P. 126401-126441
- [8] Griesmaier A., Werner J., et al. Bose-Einstein Condensation of Chromium // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — 94. — P. 160401-160404.
- [9] Lahaye T., Koch T., Frohlich B. et al. Strong dipolar effects in a quantum ferrofluid // *Nature.* — 2010. — 448. — P. 672-675
- [10] Pu H., Zhang W., Meystre P. Ferromagnetism in a Lattice of Bose-Einstein Condensates // *Phys. Rev. Lett.* — 2001. — 87. — P. 140405-140408.
- [11] Campbell G.K., Mun J., Boyd M. et al., Imaging the Mott Insulator Shells by Using Atomic Clock Shifts // *Science.* — 2006. — 313. — P. 649-652.
- [12] Youn S. H., Lu M., Ray U., Lev B. L. Dysprosium magneto-optical traps // *Phys. Rev. A.* — 2010. — 82. — P. 043425-043436.
- [13] Сукачев Д. Д., Соколов А. В., Чебаков К. А. и др. Субдоплеровское охлаждение атомов тулия в магнито-оптической ловушке // *Письма в ЖЭТФ.* — 2010. — 92. — С. 772-776.
- [14] Berglund A. J., Lee S. A., McClelland J. J. Sub-Doppler laser cooling and magnetic trapping of erbium // *Phys. Rev. A.* — 2007. — 76. — P. 053418-053422.
- [15] Dalibard J., Cohen-Tannoudij C. Laser cooling below the Doppler limit by polarization gradients: simple theoretical models // *J. Opt. Soc. Am. B.* — 1989. — 6. — P. 2023-2045.
- [16] Walhout M., Dalibard J., Rolston S., Phillips W. D. $\sigma^+ - \sigma^-$. Optical molasses in a longitudinal magnetic field // *J. Opt. Soc. Am. B.* — 1992. — 9. — P. 1997-2007.
- [17] Walhout M., Sterr U., and Rolston S. L., Magnetic inhibition of polarization-gradient laser cooling in $\sigma^+ - \sigma^-$ optical molasses // *Phys. Rev. A.* — 1996. — 54. — P. 2275-2279.
- [18] Raab E. L., Prentiss M., Cable A. et al., Trapping of Neutral Sodium Atoms with Radiation Pressure // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — 59. — P. 2631-2634.
- [19] Летохов В. С., Миногин В. Г., Павлик Б. Д. // *ЖЭТФ.* — 1977. — 72. — С. 1328.
- [20] Sukachev D., Chebakov K., Sokolov A., Akimov A., Kolachevsky N., Sorokin V. Laser cooling of thulium atoms // *Оптика и спектроскопия.* — 2011. — 111. — С. 669-674.
- [21] Chebakov K., Sokolov A., Akimov A., et al. Zeeman slowing of thulium atoms // *Opt. Lett.* — 2009. — 34. — P. 2955-2957.
- [22] Сукачев Д.Д., Соколов А.В., Чебаков К.А., Акимов А.В., Колачевский Н.Н., Сорокин В.Н. Магнитная ловушка для атомов тулия // *Квант. Электроника.* — 2011. — 41. — С. 765-768.
- [23] Риле Ф. Стандарты частоты. Принципы и приложения. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.
- [24] Hensler S., Werner J., Griesmaier A. et al. Dipolar relaxation in an ultra-cold gas of magnetically trapped chromium atoms // *Appl. Phys. B.* — 2003. — 77. — P. 765-772.
- [25] Connolly C. B., Au Y. S., Doret S. C. et al. Large spin relaxation rates in trapped submerged-shell atoms // *Phys. Rev. A.* — 2010. — 81. — P. 010702-010705.
- [26] Newman B. K., Brahms N., Au Y. S. et. al. Magnetic relaxation in dysprosium-dysprosium collisions // *Phys. Rev. A.* — 2011. — 83. — P. 012713-012717.

ИНФОРМАЦИЯ И ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

Требования к оформлению статей для журнала «Наносистемы: физика, химия, математика»

Журнал принимает к публикации исследовательские и обзорные статьи, а также краткие научные сообщения, нигде ранее не опубликованные и не принятые к изданию в других журналах. Статьи могут быть предоставлены на русском или английском языке. Все статьи рецензируются, после чего при необходимости возвращаются автору на доработку. Плата за публикацию рукописей не взимается.

Предоставляемые материалы

1. Файл статьи на русском или английском языке, содержащий индекс УДК, название статьи, инициалы и фамилии авторов, полные названия мест работы, электронный адрес, аннотацию, ключевые слова, индекс PACS (рекомендовано), текст статьи, список литературы.
2. Файл Summary на английском языке, содержащий название статьи, фамилии и инициалы авторов, названия мест работы, адреса электронной почты, аннотацию статьи, ключевые слова, а также подробную информацию об авторах: Ф.И.О. полностью, место работы, должность, ученая степень, ученое звание.
3. Сопроводительное письмо (для русскоязычных авторов), содержащее на русском языке информацию о статье (название статьи, индекс УДК, ключевые слова, аннотацию, список литературы) и о всех авторах (фамилии, имена, отчества, полное название мест работы, почтовый адрес с индексом, номер контактного телефона с кодом города, электронный адрес).
4. Экспертное заключение о возможности опубликования статьи в открытой печати (для авторов из России).

Авторские материалы могут быть переданы в редакцию на любом электронном носителе, присланы на электронные адреса nanojournal.ifmo@gmail.com; porov@mail.ifmo.ru или представлены через электронный сайт журнала <http://nanojournal.ifmo.ru>

Требования к оформлению текста

Статьи принимаются в формате LaTeX (предпочтительно) или MS Word.

Рекомендованный объем кратких сообщений 4-6 страниц, исследовательских статей 6-15 страниц, обзоров до 30 страниц.

Формат страницы – А4, поля страницы: правое – 2 см, остальные – 2,5 см. Шрифт – Times New Roman, размер шрифта – 12 pt, межстрочный интервал – 1. Абзацный отступ – 1,5 см. Название статьи печатается заглавными буквами, размер шрифта 16 pt, полужирный, выравнивается по центру. Инициалы и фамилии авторов печатаются шрифтом 12 pt, обычный, выравнивается по центру. Название организации и электронный адрес печатается шрифтом 12 pt, обычный, выравнивается по центру. Аннотация печатается шрифтом 10 pt, обычный, выравнивается по ширине. Объем не

должен превышать 150 слов. Ключевые слова печатаются шрифтом 10 pt, обычный, выравнивается по ширине. Названия разделов печатаются шрифтом Times New Roman, 12 pt, полужирный, межстрочный интервал – 1, выравнивается по левому краю, отделяется от предыдущего раздела полуторной пустой строкой. Название подразделов печатаются шрифтом Times New Roman, 12 pt, полужирный, межстрочный интервал – 1, выравнивается по левому краю, отделяется от предыдущего подраздела пустой строкой. Подписи к рисункам печатаются шрифтом 10 pt, обычный, без абзацного отступа, выравнивается по ширине.

Оформление статьи в LaTeX

При подготовке статьи в LaTeX, пожалуйста, включайте в предоставляемые материалы как исходный текст LaTeX, так и откомпилированный PDF файл. Вы можете использовать любые пакеты LaTeX, которые входят в стандартные дистрибутивы. Если вы вынуждены использовать специфический пакет, вы должны приложить все необходимые для компиляции файлы. Определенные вами макросы не должны переопределять уже существующие.

Для включения рисунков в текст используйте стандартные команды, например, `\includegraphics`, или создавайте рисунки с помощью команд LaTeX. Обратите внимание, что использование команд PostScript для создания специальных эффектов непосредственно в тексте статьи запрещено.

Для набора выделенных формул используйте окружение `equation`, `gather`, `align`. Пожалуйста, не используйте окружения `array` и `eqnarray`.

Для ускорения процесса подготовки вашей статьи, подготовленной в LaTeX, вы можете использовать созданный нами класс `nsart.cls` (который можно запросить в редакции или скачать с сайта журнала <http://nanojournal.ifmo.ru/>).

Оформление статьи в MS Word

При оформлении статьи в MS Word формулы набираются в редакторе Math Type. Функции и символы химических элементов набираются шрифтом Times New Roman, прямой; переменные Times New Roman, наклонный; греческие буквы – Symbol, прямой; символы – Symbol, прямой; матрицы-вектора – Times New Roman, прямой, полужирный; числа – Times New Roman, прямой. Размеры: обычный – 14 pt, крупный индекс – 10 pt, мелкий индекс – 8 pt, крупный символ – 16 pt, мелкий символ – 12 pt. Нумерацию формул и ссылки на литературу желательно делать вручную.

Требования к иллюстрациям

Иллюстрации предоставляются отдельными файлами. Предпочтительнее использовать векторные форматы файлов (eps, ps). Если же используются растровые форматы файлов (bmp, jpeg, png), то разрешение файлов должно быть не менее 300 dpi. Иллюстрации должны быть контрастными, так как в печатной версии все иллюстрации будут черно-белыми. В электронной версии журнала сохраняются цветные иллюстрации.

Требования к названиям файлов

В названиях файлов используйте английский алфавит. Старайтесь выбирать названия файлов иллюстраций согласно их номерам в статье, например: `fig1.eps` и т.п.

Требование к оформлению списка литературы

Ссылки на список литературы даются только в тексте статьи цифрами в квадратных скобках (в LaTeX необходимо использовать автоматическую нумерацию с помощью команды `\cite{...}`).

Список литературы оформляется по следующему образцу:

- [1] Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название книги. — СПб.: Наука, 2000. — 281 с.
- [2] Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название статьи // Название журнала. — 2000. — Т. 1, № 5. — С. 17-23.
- [3] Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название доклада // Сборник трудов конференции «Название конференции», место и дата проведения. — С. 17-23.
- [4] Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название статьи. — 2010. URL/arXiv: <http://books.ifmo.ru/ntv>
- [5] Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название патента // Патент РФ № 11111. — 2010. Бюл. № 33. — 5 с.
- [6] Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название диссертации // Дис. докт. физ.-мат. наук. — СПб., 2000. — 105 с.

SUMMARIES

FLOWS IN NANOSTRUCTURES: HYBRID CLASSICAL-QUANTUM MODELS

S.A. Chivilikhin, I.Yu. Popov, V.V. Gusarov

Flow through nanotube has many interesting peculiarities. To describe these unusual properties we suggest a model of the flow based on crystallite liquid theory. Slip boundary condition is used instead of conventional no-slip condition. The condition is derived by consideration of interaction of flow particles with the nanotube wall potential in the framework of quantum mechanics. For nanotube with elastic walls another mechanism of flow plays an important role. Namely, a model of flow caused by elastic soliton wave in its wall is suggested. As for general consideration, a modification of the Navier-Stokes equations for the nanotube flow is derived from many-particle Hamiltonian in the framework of quantum statistical physics. Particularly, for a model confinement the effective viscosity of the nanotube flow is got. The obtained dependence of the viscosity on the nanotube diameter is in good correlation with the corresponding experimental results.

Keywords: nanotube, flow, crystallite, soliton, quantum statistics.

S.A. Chivilikhin – Saint Petersburg National Research University of Information Technologies, Mechanics and Optics, Saint Petersburg, Russia, associate professor, sergey.chivilikhin@gmail.com

V.V. Gusarov – Saint Petersburg State Institute of Technology (Technical University), Saint Petersburg, Russia, Ioffe Physical Technical Institute, Saint Petersburg, Russia, Head of Department of Physical Chemistry, Corresponding member of RAS, victor.v.gusarov@gmail.com

I.Yu. Popov – Saint Petersburg National Research University of Information Technologies, Mechanics and Optics, Saint Petersburg, Russia, Professor, Doctor of Science, Head of Department of Higher Mathematics, popov@mail.ifmo.ru

INVESTIGATIONS OF HEAT CONDUCTIVITY OF NANOFLUIDS BASED ON ALUMINUM OXIDE NANOPARTICLES

S.P. Bardakhanov, S.A. Novopashin, M.A. Serebrjakova

The heat conductivity of nanofluids based on aluminum oxide nanoparticles (mean diameter of 13 nm) have been measured experimentally. Glycol and isopropyl alcohol as the based fluids were used. The non stationary “hot wire” method has been used. It was shown the heat conductivity at low volume concentration of nanoparticles (<0,5 %) corresponds to classical Maxwell theory. For higher volume concentration of nanoparticles in glycol the heat conductivity deviated to low side due to aggregate instability of the nanofluid. The anomalous growth of heat conductivity in isopropyl alcohol have been observed. The possible nature of the observed phenomenon is discussed in conclusion.

Keywords: nanofluid, heat conductivity.

S.P. Bardakhanov – Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences

S.A. Novopashin – Kutateladze Institute of Thermophysics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences

M.A. Serebrjakova – Kutateladze Institute of Thermophysics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences

BOUND STATES IN BIREFRINGENT CRYSTALS DOPED WITH TWO-LEVEL ATOMS

M.B. Belonenko, A.S. Sasov, A.V. Alpatov.

The dynamics of the interaction of electromagnetic pulses in a medium with impurity two-level atoms. Using the kinetic equation for the mean values of pseudospin operators, and decay in the random phase approximation. A numerical study of the conditions of formation of bound states of optical pulses and shows the evolution of the system for different parameters of the problem. The analogy between the results obtained and the well-known soliton modes.

Keywords: bound states, birefringence, impurity, two-level systems.

Mikhail Belonenko – Volgograd institute of business Volgograd, Russia, professor, doctor of physical and mathematical sciences, mbelonenko@yandex.ru

Alexey Sasov – Volgograd institute of business Volgograd, Russia, docent, candidate of physical and mathematical sciences

Alexey Alpatov – Volgograd institute of business Volgograd, Russia, docent, candidate of physical and mathematical sciences, alpatov80@mail.ru

THE INFLUENCE FUNCTIONAL APPROACH FOR A DESCRIPTION OF THE NANOSYSTEMS DYNAMICS

A.A. Biryukov, M.A. Shleenkov

In the functional integration formalism and the influence functional approach we derive formulas, describing the evolution of the statistical density matrix of nanosystems in different representation. We find the explicit form of the quantized electromagnetic field influence functional. We present examples, which agree with the calculations in the framework of perturbation theory.

Keywords: nanosystems in an electromagnetic field, the functional integration formalism, the influence functional approach.

Alexander Biryukov – Samara State University, Samara, Russia, the head of general and theoretical physics department, candidate of physico-mathematical sciences, professor, biryukov@ssu.samara.ru

Mark Shleenkov – Samara State University, Samara, Russia, postgraduate, shleenkov@list.ru

INTERACTION OF TERAHERTZ RADIATION WITH DNA

A.N. Bugay

A nonlinear model of DNA dynamics with coupling between conformational dynamics and proton tunneling is presented. It is demonstrated that terahertz radiation can influence both vibrational excitations and proton motion in DNA hydrogen bonds. The irradiation at the edge of far IR spectral range can promote proton tunneling. If the radiation frequency matches the vibrational mode, the generation of localized excitations in form of dissipative solitons is possible. These solitons decrease the probability of proton tunneling.

Keywords: DNA, terahertz radiation, proton tunneling, dissipative soliton.

Aleksandr Bugay – Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia, Ph.D., researcher, bugay_aleksandr@mail.ru

PHOTON DENSITY OF STATES IN OPTICAL NANOMATERIALS AND CONTROL OF ENERGY LEVELS OF ATOMS

R.Kh. Gainutdinov, M.A. Khamadeev, E.V. Zajtseva, M.Kh Salakhov

We discuss the influence of the optical nanomaterial medium on the character of interaction of atoms with their own radiation field on the example of photonic crystals. It is shown that such effects may lead to changes of energy levels of atoms placed in a periodic dielectric medium of nanometer size.

Keywords: density of states, photonic crystal, energy levels shift.

Renat Gainutdinov – Kazan University, Kazan, Russia, Full Professor Doctor of Sciences, Renat.Gainutdinov@ksu.ru

Marat Khamadeev – Kazan University, Kazan, Russia, assistant, Marat.Khamadeev@ksu.ru

Ekaterina Zajtseva – Kazan University, Kazan, Russia, student, zaek131@mail.ru

Myakzyum Salakhov – Kazan University, Kazan, Russia, President of Kazan University, Doctor of Sciences, professor, msalakh@ksu.ru

THE HIGH HARMONIC GENERATION ON SUPERLATTICES BASED ON GRAPHENE AT THE PRESENCE OF A UNIFORM ELECTRIC FIELD

S.Yu. Glazov, N.E. Mescheryakova

The high harmonic generation on superlattices based on graphene under the influence of a variable and a uniform electric fields is considered. Intensities vectors of these fields are directed along superlattices axis. The electron system superlattices based on graphene is considered using the kinetic Boltzman equation with a constant relaxation time. The dependence of the amplitude of the high harmonic from fields characteristics is investigated.

Keywords: superlattice, grapheme.

Sergey Yurjevich Glazov – Volgograd State Social Pedagogical University, Volgograd, Russia, Phd, assistant professor, ser-glazov@yandex.ru

Natalia Evgenjevna Mescheryakova – Volgograd Business Institute, Volgograd, Russia, Phd, assistant professor, dandelion1@yandex.ru

MANAGEMENT OF OCCURRENCE TIME AN SHTARKOVSKY ECHO IN NANOGAMUT BY OF MUTUAL ORIENTATION OF GRADIENTS OF ELECTRIC FIELDS VARIATION

G.I. Garnaeva, L.A. Nefediev, E.N. Ahmedshina

Possibility of management is shown by time of occurrence of the response of the Shtarkovsky echo at change of mutual orientation external electric fields gradients of. It is found that at various corners between gradients of external non-uniform electric fields shift of time of occurrence of the Shtarkovsky echo is observed.

Keywords: photon echo, information lock-out, Shtarkovsky echo, non-uniform electric fields, optical nanocenters.

Garnaeva Guzel Ildarovna – Kazan (Volga region) Federal university, Kazan, Russia, senior lecturer, the candidate of physical and mathematical sciences, guzka-1@yandex.ru

Nefediev Leonid Anatolievich – Kazan (Volga region) Federal university, Kazan, Russia, the professor managing chair of educational technologies in the physicist, the doctor of physical and mathematical sciences, professor, nefediev@yandex.ru

Ahmedshina Ekaterina Nikolaevna – Kazan (Volga region) Federal university, Kazan, Russia, post-graduate student, vesnuschka-88@yandex.ru

UNIVERSAL INTERATOMIC POTENTIAL FOR PURE METALS

V.E. Zalizniak, O.A. Zolotov

A new interatomic potential for metals based on the embedded atom method is proposed in this paper. Some approximation of electron density distribution is suggested from the basic principles of quantum mechanics. The form of this distribution defines not only the pair potential but also the particular form of embedding energy function. To describe various metal properties one should choose only two parameters of the electron density distribution. The parameters are determined empirically by fitting to the equilibrium lattice constant, sublimation energy, vacancy formation energy and elastic constants. Potential parameters for Al(fcc), Fe(bcc) and Mg(hcp) are presented. Potential is expressed by simple functions and can be used in molecular dynamics simulations of large atomic systems.

Keywords: interatomic potential, embedded atom method.

Victor Zalizniak – Siberian Federal University, Associate Professor, PhD, vzalizniak@sfu-kras.ru

Oleg Zolotov – Siberian Federal University, Associate Professor, PhD, ozolot_@mail.ru

ERRORS IN “THE SIFTED” QUANTUM KEY WHILE TRANSMISSING VIA SINGLE-MODE STOCHASTIC ANISOTROPIC INHOMOGENEOUS FIBER

G.P. Miroshnichenko, A.A. Sotnikova

In this article we take into consideration time dynamics of a field density matrix in basis of conditions of vacuum and two orthogonal polarization photons. The analysis was performed using the device with passive modulation of distributed photons conditions and additional

unexcited modes. Errors in the sifted key can appear due to the absorption and depolarization of photons, as well as from the optical fibre (OB) parameters disorder. We find the average relative error (QBER) for variation of OB parameters in the sifted quantum key using BB84 protocol distribution with polarizing coding of the information. It is possible to reduce QBER significantly, even when random OB parameters are widely dispersed. For identifying the protocol working conditions at large distances we use the polarizing palpation effect, most clearly expressed when average value of OB parameters surpass their variation. In conclusion, the correct choice of OB manufacturing technology will lower QBER to the critical level of 0.11, below which the distributed key can be applied for cryptographical purposes.

Keywords: quantum cryptography, noise in the quantum channel, QBER, optical fibre, photons, error in a quantum key, polarizing coding of the information

G.P. Miroshnichenko – Saint Petersburg National Research University of Information Technologies, Mechanics and Optics, Saint Petersburg, Russia, Professor, Doctor of Science, gpmirosh@gmail.com

A.A. Sotnikova – Saint Petersburg National Research University of Information Technologies, Mechanics and Optics, Saint Petersburg, Russia, student, oirt@yandex.ru.

MICROSCOPIC DISCRETE MODEL OF NONIDEAL PHOTODETECTOR

G.P. Miroshnichenko, A.I. Trifanov

The descreet photodetection process is under investigation. It is assumed to be nonideal due to the possibility of appearing "dark" and "bright" clicks of ionization chamber, which measures the atom state. The nonorthogonal POVM measures and Kraus extension on the field states space are proposed.

Keywords: photodetection, ionizing chamber, QED intracavity interaction, state reduction, Kraus extension.

G.P. Miroshnichenko – Saint Petersburg National Research University of Information Technologies, Mechanics and Optics, Saint Petersburg, Russia, Professor, Doctor of Science, gpmirosh@gmail.com

A.I. Trifanov – Saint Petersburg National Research University of Information Technologies, Mechanics and Optics, Saint Petersburg, Russia, postgraduate student, alextrifanov@gmail.com.

THE INFLUENCE OF UNCORRELATION OF INHOMOGENEOUSLY BROADENING ON FORMATION OF TRANSITIVE OPTICAL PROCESSES IN THREE-LEVEL NANO-GATES SYSTEM

L.A. Nefediev, E.I. Nizamova, S.V. Taktaeva

The correlation of the inhomogeneous broadening in different frequencytransitions in three-tier system of nano-gate and its impact on the intensity of the response of the stimulated photon echo investigated. It is shown that the correlation coefficient of inhomogeneous broadening on two different transitions and the intensity of the response of the stimulated photon echo depends on the parameter of the random interaction of the optical electron with

the local field and the width of the distribution of additional frequency shifts due to partial mutual fixation of the transition energies. Moreover, a slight change in the coefficient of correlation leads to a significant decline in the intensity of the response.

Keywords: stimulated photon echo, nano-gates, correlation coefficient, optical nano-center.

Leonid Nefediev – KSU, Kazan, Russia, professor, Head of Department, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, nefediev@yandex.ru

Ekmira Nizamova – KSU, Kazan, Russia, enizamova@yandex.ru

Sofiya Taktaeva – KSU, Kazan, Russia, graduate, Sofiya-Taktaeva@yandex.ru

CODING INFORMATION IN NANO-TIME INTERVALS BETWEEN THE EXCITING LASER PULSES IN OPTICAL ECHO PROCESSOR

L.A. Nefediev, A.R. Sakhibeva

Encoding of information in the nano-time intervals between the exciting laser pulses in optical echo processor was considered. Information measure to describe the transformation of classical in quantum information was introduced. When converting classical information stored in the nano-time intervals tier laser pulses in a quantum, the most appropriate measure is the quantum information measure based on algorithmic information theory as it has the highest correlation with the classical information measure.

Keywords: photon echo, echo-processor.

Leonid Nefediev – KSU, Kazan, Russia, professor, Head of Department, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, nefediev@yandex.ru

Alsu Sakhibeva – KSU, Kazan, Russia, graduate, alsu-sakhibeva@yandex.ru

ULTRASHORT PULSE PROPAGATION IN FERROELECTRIC MODELED BY THE FIFTH-ORDER DUFFING MODEL

S.S. Ozhenko, E.V. Kazantseva, A.I. Maimistov

We consider propagation and interaction the extremely short pulses in ferroelectric media possessing both the nonlinearities of the third and fifth orders. Using to the analytic expressions found previously, the stability of the stationary pulses to additive modulation and interpulse collisions is demonstrated by numerical simulation. The stability of electromagnetic domain is proved regarding the interaction to the incident solitary wave.

Keywords: extremely short electromagnetic pulses, ferroelectrics, paraelectrics, domain walls, stability.

Sergey Ozhenko – National Research Nuclear University «MEPhI», postgraduate student, ozhenko@gmail.com

Elena Kazantseva – Moscow State Technical University of Radio Engineering, Electronics and Automation, researcher, PhD, elena.kazantseva@gmail.com

Andrei Maimistov – Moscow Physical-Technical Institute (State University), professor, Doct. Sci., aimaimistov@gmail.com

**SUB-DOPPLER LASER COOLING OF THULIUM ATOMS
IN A MAGNETO-OPTICAL TRAP AND TRAPPING THULIUM ATOMS
IN A MAGNETIC TRAP WITH LOW GRADIENT OF MAGNETIC FIELD**

D.D. Sukachev, A.V. Sokolov, N.N. Kolachevsky,
E.S. Kalganova, A.V. Akimov, V.N. Sorokin

We have studied sub-Doppler laser cooling of thulium atoms in a magneto-optical trap (MOT) operated at 410.6 nm. Without any additional sub-Doppler cooling cycles the sub-Doppler temperature of 25(5) microK have been achieved (the number of atoms was 3×10^6). This temperature is one order of magnitude lower than the Doppler limit for used transition (240 microK). The high efficiency of sub-Doppler cooling is accounted for by equality of Lande g-factors of high and lower levels of cooling transition. We have implemented trapping of ultracold thulium atoms in a magnetic trap (MT) formed by a MOT quadruple magnetic field (field gradient is about 20 G/cm). Loading of MT has been performed from the cloud contained 4×10^5 thulim atoms previously cooled in the MOT down to the sub-Doppler temperature of 80 microK. About 4×10^4 atom have been trapped in MT at the temperature 40 microK. By analysing MT population decay process the lifetime has been determined (0.5 s) and the constrain on the rate constant of inelastic binary collision of spin-polarized thulim atoms in the ground state ($g_{in} < 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$) has been imposed.

Keywords: laser cooling, magneto-optical trap, magnetic quadruple trap, magnetic dipole-dipole interaction, thulium atom, sub-Doppler laser cooling.

D.D. Sukachev – P.N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Science, Moscow Institute of Physics and Technology (State University), sukachev@gmail.com

A.V. Sokolov – P.N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Science, Moscow Institute of Physics and Technology (State University), teopetuk@gmail.com

N.N. Kolachevsky – P.N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Science, Moscow Institute of Physics and Technology (State University), kolachbox@mail.ru

E.S. Kalganova – P.N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Science, Moscow Institute of Physics and Technology (State University)

A.V. Akimov – P.N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Science, Moscow Institute of Physics and Technology (State University), AkimovWork@mail.ru

V.N. Sorokin – P.N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Science, Moscow Institute of Physics and Technology (State University), sovn@lebedev.ru



НАНОСИСТЕМЫ:

ФИЗИКА, ХИМИЯ, МАТЕМАТИКА

Журнал зарегистрирован

Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций

(свидетельство ПИ № ФС 77-42762 от 25.11.2010 г.)

ISSN 2220-8054

Учредитель: федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования

«Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики»

Издатель: федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования

«Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики»

Отпечатано в учреждении «Университетские телекоммуникации»

Адрес: 197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49

Подписка на журнал НФХМ

На 2012 год подписка осуществляется через ОАО Агентство «Роспечать»

Подписной индекс 57385 в каталоге «Издания органов научно-технической информации»