Труды XXV научной конференции по радиофизике

СЕКЦИЯ «ОБЩАЯ ФИЗИКА»

Председатель – М.И. Бакунов, секретарь – Е.З. Грибова. Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского.

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ОПТИЧЕСКОЙ ГЕНЕРАЦИИ ТГЦ-ПОЛЕЙ В КРИСТАЛЛЕ LINbO3

Н.А. Абрамовский, М.И. Бакунов

ННГУ им. Н.И. Лобачевского

Эффективным методом настольной генерации сильных ТГц-полей является оптическое выпрямление фемтосекундных лазерных импульсов в электрооптических кристаллах, прежде всего, в LiNbO₃. Для преодоления рассогласования фазовой скорости терагерцовых волн и групповой скорости оптического импульса накачки используют неколлинеарные схемы, такие как черенковская схема [1]. В настоящее время наиболее эффективным оптико-терагерцовым конвертором черенковского типа является структура в виде тонкого слоя LiNbO₃, прикрепленного к кремниевой призме. Распространяющийся в слое LiNbO₃ фемтосекундный лазерный импульс индуцирует движущуюся нелинейную поляризацию, которая и генерирует ТГц-излучение, выходящее через призму в свободное пространство.

Принципиальным недостатком указанных конверторов является провал в спектре ТГц-излучения, обусловленный деструктивной интерференцией ТГц-волн, выходящих в кремниевую призму напрямую и после отражения от границы LiNbO₃-воздух [2]. Для преодоления этого недостатка было предложено использовать специальную ориентацию осей кристалла LiNbO₃, при которой лазерный импульс генерирует лишь ту половину черенковского клина, которая распространяется в сторону призмы [3].



Рис. 1

В данной работе был проведен эксперимент по визуализации черенковского клина ТГц-волн и проверке предсказаний работы [3]. Для визуализации была использована схема на основе эффекта Тэлбота [4], в которой ТГц-клин просвечивается широким зондирующим оптическим пучком в поперечном направлении. Разные части зондирующего пучка испытывают различный набег фазы из-за взаимодействия с неоднородным ТГц-полем. Возникшая фазовая модуляция зондирующего пучка через определенное расстояние переходит в амплитудную и может быть зарегистрирована CCD-камерой.

В схеме (рис. 1) в качестве накачки использовался Ti:sapphire лазер с длиной волны 800 нм. Лазерный пучок фокусировался в линию шириной 70 мкм на входной грани кристалла LiNbO₃ и возбуждал в нем черенковский клин ТГц-волн. В качестве зондирующего пучка использовалось излучение второй гармоники (длина волны 400 нм), полученное в кристалле BBO.



Рис. 2

На рис. 2 показаны результаты визуализации симметричного конуса при стандартной ориентации осей кристалла [1]. Изображения получены со смещением 4 мм по линии задержки в пучке накачки. Измерения для схемы работы [3] показали отсутствие асимметрии клина, что может говорить о неточности использованного в работе [3] тензора нелинейной восприимчивости LiNbO3.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (20-32-90080\20).

- Auston D.H., Cheung K.P., Valdmanis J.A., and Kleinman D.A. // Phys. Rev. Lett. 1984. Vol. 53. P. 1555.
- [2] Bakunov M.I. and Bodrov S.B. // Appl. Phys. B. 2010. Vol. 98. P. 1.
- [3] Bakunov M.I., Mashkovich E.A., and Svinkina E.V. // Opt. Lett. 2014. Vol. 39. P. 6779.
- [4] Wang Z., Su F.H., and Hegmann F.A. // Opt. Express. 2015. Vol. 23. P. 8073.

ИЗМЕРЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ МНОГОФОТОННОГО ПОГЛОЩЕНИЯ И НЕЛИНЕЙНОГО ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ ZnTe и GaP В ДИАПАЗОНЕ ДЛИН ВОЛН 1,3-2,1 MKM

Е.А. Бурова¹⁾, С.Б. Бодров^{1, 2)}, И.Е. Иляков²⁾, Б.В. Шишкин²⁾, А.И. Корытин²⁾, М.И. Бакунов¹⁾

¹⁾ННГУ им. Н.И. Лобачевского ²⁾Институт прикладной физики РАН

Кристаллы ZnTe и GaP широко используются для генерации терагерцового излучения методом оптической ректификации фемтосекундных лазерных импульсов. Основным фактором, ограничивающим эффективность оптико-терагерцового преобразования в этих кристаллах, является двухфотонное поглощение лазерной накачки (с длиной волны ~0.8-1 мкм) и поглощение генерируемого терагерцового излучения на возникающих при этом свободных носителях заряда. Повышение эффективности преобразования может быть достигнуто путем подавления двухфотонного поглощения за счет увеличения длины волны накачки и увеличения интенсивности накачки. С увеличением интенсивности накачки, однако, становятся существенными эффектыв многофотонного поглощения. Для оценки пределов повышения эффективности терагерцовой генерации за счет использования длинноволновой накачки необходимо знать значения коэффициентов многофотонного поглощения кристаллов. С этой целью в данной работе экспериментально измерены коэффициенты трех- и четырехфотонного поглощения кристаллов ZnTe и GaP методом z-сканирования. Проведены также измерения нелинейного коэффициента преломления кристаллов.

Коэффициенты α_n многофотонного (*n*-го порядка) поглощения определяются соотношением

$$\frac{dI}{dz} = -\alpha_n I^n,\tag{1}$$

где I – оптическая интенсивность, а z – координата вдоль лазерного пучка. Нелинейная составляющая n_2 показателя преломления n определяется как $n = n_0 + n_2 I$, где n_0 – линейный показатель преломления. Для определения α_n и n_2 применяют обычно технику z-сканирования. В данной работе эта техника была использована для измерения коэффициентов $\alpha_{3,4}$ и n_2 кристаллов (110) ZnTe и (110) GaP.

Для измерения коэффициентов $\alpha_{3,4}$ использовался режим открытого zсканирования, в котором исследуемый кристалл перемещался относительно фокуса лазерного пучка и в зависимости от перемещения регистрировалась мощность прошедшего через кристалл излучения (рис. 1). Полученные зависимости имеют провал в области фокуса, что объясняется сильным многофотонным поглощением в этом положении. Ширина провала уменьшается с увеличением порядка многофотонного поглощения. В расчетах на основе полученных данных были использованы предположения, что линейное поглощение α_1 мало, лазерный импульс имеет гауссовы пространственное и временное распределения, имеет место многофотонное поглощение только одного порядка. Последнее предположение позволяло использовать уравнение (1) с определенным n (n > 1). Путем решения этого уравнения находилась интенсивность прошедшего через кристалл импульса, а затем мощность прошедшего излучения. Расчеты проводились на основе формул работы [1].



Рис. 1

Рис. 2

Для нахождения нелинейного показателя преломления перед измерителем мощности ставилась диафрагма (рис. 2). При этом зависимость измеренной мощности от положения образца имела провал в области перед фокусом и пик сразу за ним, что можно объяснить формированием в кристалле нелинейной линзы. Нелинейный показатель преломления рассчитывался по формулам работы [2], при этом предполагалось, что лазерный импульс имеет гауссовы пространственное и временное распределения, а толщина кристалла меньше длины Рэлея.

Схема экспериментальной установки приведена на рис. 3. В качестве источника света использовалась титан-сапфировая лазерная система Spitfire с параметрическим усилителем TOPAS. Часть излучения, отраженная от стеклянного клина и ослабленная нейтральными светофильтрами (NF), фокусирова-





лась линзой с фокусным расстоянием 15 см на исследуемый кристаллический образец. Образец находился на подвижке с интервалом перемещений 10 см. Прошедшее через образец излучение собиралось линзой с фокусным расстоянием 30 см и фокусировалось на ячейку Голея. В экспериментах по измерению n_2 перед ячейкой Голея ставилась диафрагма, пропускающая половину мощности пучка.



На рис. 4, 5 показаны зависимости n_2 от длины волны для ZnTe и GaP. Значения при одной длине волны получены для двух интенсивностей, отличающихся в 1,5-2

раза. Слабая зависимость от интенсивности подтверждает достоверность результатов. Видна дисперсия нелинейного показателя преломления для обоих кристаллов.



Наблюдается также дисперсия коэффициента трехфотонного поглощения (рис. 6), для сравнения на рис. 6 приведено значение α_3 из работы [3].

Коэффициент α_4 , как видно из рис. 7, уменьшается с ростом длины волны при постоянной интенсивности накачки. При этом, однако, наблюдалась сильная зависимость данного коэффициента от интенсивности для каждой из длин волн (1,7-2,1 мкм). Возможные причины такой зависимости обсуждаются в работе [4]. Полученные результаты для длины волны 1,7 мкм хорошо

согласуются с результатами работы [4] для 1,75 мкм (рис. 8, 9).



Рис. 8

Рис. 9

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (0729-2020-0035).

- [1] Corrêa D.S., De Boni L., Misoguti L., Cohanoschi I., Hernandez F.E., Mendonça C.R. // Opt. Commun. 2007. Vol. 227. P. 440.
- [2] Sheik-Bahae M., Said A.A., Wei T.H., Hagan D.J., Van Stryland E.W. // IEEE J. Quantum Electron. 1990. Vol. 26, № 4. P. 760.
- [3] Lui F., A.I., Li Y., Xing Q., Chai L., Hu M., Wang C., Deng Y., Sun Q., Wang C. // J. Opt. 2010. Vol. 12. P. 195201.
- [4] Monoszlai B., Nugraha P.S., Tóth G., Polónyi G., Pálfalvi L., Nasi L., Ollman Z., Rohwer E.J., Gäumann G., Hebling J., Feurer T., Fülöp J.A. // Opt. Express 2020. Vol. 8, № 13. P. 12352.

ФОРМА МОЛЕКУЛЯРНОЙ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЛИНИИ ЗА РАМКАМИ УДАРНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

Ю.В. Гурьева^{1, 2)}, М.Ю. Третьяков²⁾

¹⁾ ННГУ им. Н.И. Лобачевского ²⁾ Институт прикладной физики РАН

Неопределенность расчетов атмосферного поглощения излучения является одним из основных препятствий к созданию физически обоснованной модели распространения излучения и радиационного баланса Земли. Одним из главных вопросов в рамках этой проблемы является природа нерезонансного поглощения (континуума), анализ его составляющих и количественные оценки их вкладов.

Эмпирически континуум определяется как разность общего измеряемого поглощения и расчетного вклада резонансных линий молекул-мономеров. Он содержит поглощение, связанное с межмолекулярным взаимодействием (включая столкновительно-индуцированное поглощение и вклад молекулярных комплексов), и имеет плавную зависимость от частоты [1]. В связи с отсутствием физически обоснованного описания нерезонансного поглощения возникает несоответствие расчетных и экспериментальных спектров [2, 3]. Значительная часть континуума, извлекаемого из измеряемого поглощения, не может быть объяснена на основе общепринятых представлений [4].

Континуум однозначно связан с моделью резонансных линий, применявшейся для его выделения из экспериментальных спектров. Все известные формы резонансной линии выведены в ударном приближении и значительно отличаются при широкодиапазонном моделировании. В ударном приближении время соударения молекул считается много меньше времени свободного пробега. Отличия характерного для столкновительного уширения лоренцева крыла линии от реального проявляются в «дальних крыльях» – при больших отстройках частоты от центра, соответствующих продолжительности столкновительного взаимодействия τ_c : $|\nu - \nu_0| > 1/2\pi\tau_c$.

До сих пор не существует обоснованной физической модели дальнего крыла спектральной линии мономера. Известные теоретические модели очень сложны, и для их применения требуется слишком много эмпирических параметров [5]. Для моделирования резонансного поглощения в моделях распространения излучения используют «усеченную» лоренцеву форму линии, в которой дальние крылья «обрезаются» на частоте отсечки *v_{cut}*, а сама линия «осаживается» до нуля, чтобы в модели не возникало скачков поглощения:

$$I(\nu,\nu_0) = \frac{1}{\pi} \begin{cases} \frac{\Delta\nu_c}{(\nu-\nu_0)^2 + \Delta\nu_c^2} - \frac{\Delta\nu_c}{\nu_{cut}^2 + \Delta\nu_c^2}, |\nu-\nu_0| \le \nu_{cut} \\ 0, & |\nu-\nu_0| > \nu_{cut} \end{cases}$$
(1)

где v_0 – центральная частота линии, Δv_c – столкновительная ширина.

«Подставку» под линией и дальние крылья относят к континууму. Взаимодействие молекул, проявляющееся в дальних крыльях, является одним из механизмов формирования нерезонансного поглощения. С учетом столкновительного взаимодействия форма резонансной линии отличается от лоренцевой при больших отстройках от центра. В работе [6] показано, что скорректированное с учетом взаимодействия мономолекулярное поглощение может частично объяснить происхождение избыточного континуума.

Целью данной работы является развитие метода численного моделирования формы дальних крыльев линии на основе результатов траекторных расчетов парного столкновительного взаимодействия молекул с применением *ab initio* потенциала, которое позволит выделить вклад мономолекулярного поглощения в континуум.

Упрощенное качественное моделирование межмолекулярного взаимодействия и формы линии на его основе было проведено в работе [6]. Было показано, что вращение молекул во время столкновительного взаимодействия является механизмом, который может приводить к избыточному поглощению в резонансной линии в определенной области отстроек от центра – так называемое суперлоренцево поведение крыла линии.

Коэффициент поглощения газа определяется следующим общим выражением:

$$\alpha(\omega) = n \frac{2\pi\omega}{3\hbar c} \left(1 - exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \right) J(\omega), \tag{2}$$

где второй и третий сомножители представляют собой так называемый «радиационный член», который вместе с концентрацией поглощающих молекул n определяет интегральную интенсивность поглощения, а $J(\omega)$ является спектральной функцией, определяющей форму спектра поглощения.

В случае газа молекул мономеров форма спектра $J(\omega)$ определяется процессом эволюции дипольного момента мономера вдоль траектории его движения [7]:

$$J(\omega) = \left(\left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \boldsymbol{\mu}(t) \, dt \right|^2 \right), \tag{3}$$

где $\mu(t)$ – соответствующая составляющая дипольного момента молекулы, а усреднение производится по ансамблю молекул газа. Рассчитать $\mu(t)$ при межмолекулярном взаимодействии позволяет метод классических траекторий, в котором столкновительная динамика молекул описывается классическими уравнениями движения в поле потенциала взаимодействия, который рассчитывается из первых принципов (квантово-химические методы) [7, 8]. До настоящего времени такой расчет применяется лишь для моделирования столкновительно-индуцированных и, в более общем случае, бимолекулярных спектров неполярных молекул. Для моделирования бимолекулярного поглощения рассматривается только столкновительная часть траектории, на которой в системе двух неполярных молекул появляется поляризация [7]. В рамках задачи о форме линии мономера нужно рассматривать эволюцию дипольного момента мономера на траектории свободного пробега и на части траектории столкновительного взаимодействия, где сохраняется когерентность осцилляций молекулярного диполя.

В данной работе проведено упрощенное численное моделирование для простейшего идеализированного случая двухуровневых молекул. При этом спектральная функция (3) соответствует форме одиночной и единственной в спектре резонансной молекулярной линии. Использовалась классическая модель молекул-осцилляторов, предложенная в [6]. На участке свободного пробега дипольный момент совершает свободные осцилляции; при взаимодействии происходят амплитудные и фазовые искажения осцилляций. Выполнено упрощенное качественное моделирование этих искажений.

Усреднение по ансамблю сводится в данном подходе к усреднению по времени между соударениями и по столкновительным траекториям. Вероятность столкновения на интервале времени τ определяется распределением Пуассона: $R(\tau) = \frac{\tau}{\tau_0} \exp(-\frac{\tau}{\tau_0})$,

где τ_0 – среднее время движения между столкновениями (в данной работе оно считается известным из эксперимента или рассчитанным из первых принципов [9]). Для такой модели ансамбля молекул-поглотителей спектральная функция имеет следующий вид:

$$I(\omega) = \int_0^\infty \left| \int_{-\tau/2}^{\tau/2} \mu(t) e^{-i\omega_0 t} dt \right|^2 e^{-\left(\frac{\tau}{\tau_0}\right)} d\tau.$$
(4)

В данной работе спектральная функция рассчитывается численно на основе эволюции дипольного момента при взаимодействии. В отличие от [6], разработанная программа позволяет работать с расчетными массивами эволюции дипольного момента, а не с аналитически заданными функциями, определяющими огибающую гармонических осцилляций $\mu(t)$.

В рамках такой модели проведен численный расчет формы линии для следующих упрощенных моделей взаимодействия молекул:

- ударное приближение, соответствующее мгновенному обрыву цуга осцилляций;
- монотонное затухание осцилляций. Плавный переход молекулы в состояние покоя в течение характерного времени столкновения т_с;
- немонотонное затухание осцилляций. Относительное вращение молекул приводит к дополнительной поляризации и периодическому воздействию.

В ударном приближении проведено сравнение расчетной кривой с контуром Лоренца с помощью его оптимизации в окрестности центра линии (рис. 2) и при больших отстройках от центра (рис. 3).



Из рис. 2 можно сделать вывод, что результат численного моделирования в ударном приближении достаточно точно соответствует кривой Лоренца: абсолютная величина

остатка не превышает 10⁻⁷ от амплитуды линии (отметим, что относительный уровень шумов на лучших экспериментальных записях спектров имеет порядок 10⁻⁴).

На рис.3 показаны результаты для разных механизмов взаимодействия молекул. Точечной кривой показан контур Лоренца, штрихпунктирной – результат для монотонного затухания осцилляций. При отстройках частоты от центра $\Delta v \sim 1/2\pi \tau_c$ наблюдается сублоренцево поведение крыла линии. Скорость спадания крыла ожидаемым образом зависит от времени столкновения τ_c . Сплошной кривой показан результат для немонотонного затухания. При отстройках частоты от центра $\Delta v \sim 1/2\pi \tau_c$ проявляется суперлоренцево поведение крыла линии; наблюдается поднятие крыла линии, переходящее в сублоренцево при удалении от центра.

Реальная столкновительная эволюция диполя может быть определена как результат полуклассического траекторного расчета. Этот метод не требует таких вычислительных затрат, как расчет из первых принципов [10], при этом результаты достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными [7, 8].

Итогом работы является разработка подхода к численному расчету формы спектральной линии за рамками ударного приближения на основе модели классического ансамбля молекул-осцилляторов. Разработанная программа протестирована на простейших моделях столкновения. Разработанный метод позволяет использовать расчетные массивы эволюции дипольного момента.

Следующим этапом работы станет оптимизация алгоритма для работы с реальными расчетными массивами большой длины и использование результатов траекторных расчетов в качестве столкновительных частей траектории.

Работа поддержана грантом РФФИ 18-55-16006.

- [5] Третьяков М.Ю. Высокоточная резонаторная спектроскопия атмосферных газов в миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах длин волн. – Нижний Новгород. ИПФ РАН, 2016, 320 с.
- Odintsova T.A., Tretyakov M.Yu., Zibarova A.O., Pirali O., Roy P., Campargue A. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2019. Vol. 227. P. 190.
- [2] Lechevallier L., Vasilchenko S., Grilli R., Mondelain D., Romanini D., Campargue A. // Atmos.Meas.Tech. 2018. Vol. 11. P. 2159.
- [3] Shine K., Campargue A., Mondelain D., McPheat R., Ptashnik I., Weidmann D. // J. Mol. Spectrosc. 2016. Vol. 327. P. 193.
- [4] Tvorogov S.D., Rodimova O.B. // J. Chem. Phys. 1995. Vol. 102. P. 8736.
- [5] Serov E.A., Odintsova T.A., Tretyakov M.Yu., Semenov V.E. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2017. Vol. 193. P. 1.
- [6] Chistikov D.N., Finenko A.A., Lokshtanov S.E., Petrov S.V., Vigasin A.A. // J. Chem. Phys. 2019. Vol. 151. P. 194106.
- [7] Ivanov S.V. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2016. Vol. 177. P. 269.
- [8] Slowinsky M. et al // Phys. Rev. 2020. Vol. 101. P. 52705.
- [9] Karman T., Miliordos E., Hunt K., Groenenboom G., van der Avoird A. // J. Chem. Phys. 2015. Vol. 142. P. 84306.

АКУСТИЧЕСКИ ИНДУЦИРОВАННАЯ ПРОЗРАЧНОСТЬ ДЛЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ФОТОНОВ СИНХРОТРОННОГО МЁССБАУЭРОВСКОГО ИСТОЧНИКА

И.Р. Хайрулин, Е.В. Радионычев, В.А. Антонов

Институт прикладной физики РАН

Индуцированная прозрачность оптически толстой среды для резонансного электромагнитного излучения является мощным инструментом управления взаимодействием между средой и полем. Ранее были предложены различные методы реализации индуцированной прозрачности для излучения от микроволнового до рентгеновского диапазона [1–5]. Большинство из них основано на модификации квантовооптических свойств среды под действием внешнего достаточно интенсивного когерентного электромагнитного поля. Однако отсутствие в настоящее время подобных источников в жёстком рентгеновском/мягком гамма-диапазоне не позволяет реализовать индуцированную прозрачность на подобных механизмах.

В недавней работе [6] нами был экспериментально продемонстрирован эффект акустически индуцированной прозрачности (АИП), который состоит в просветлении резонансной поглощающей среды вследствие её акустических колебаний вдоль направления распространения квазимонохроматического излучения. Было показано 150-кратное уменьшение резонансного поглощения 14.4 кэВ фотонов, излучённых радиоактивным мёссбауэровским источником (РМИ) ⁵⁷Со, в оптически толстом резонансном ядерном поглотителе, который представляет собой тонкую фольгу из нержавеющей стали, содержащей резонансные ядра мёссбауэровского изотопа ⁵⁷Fe. При этом важно отметить, что как спектральные, так и временные характеристики падающего резонансного излучения сохраняются в результате индуцированной прозрачности.

Однако используемый в демонстрационном эксперименте источник резонансных фотонов обладает рядом недостатков (малая активность источника, отсутствие эффективных методов фокусировки излучения РМИ), которые ограничивают возможности его практического использования для реализации эффекта АИП. Кроме того, фотоны РМИ излучаются случайным образом относительно фазы колебаний поглотителя, что приводит к необходимости усреднения спектрально-временных характеристик выходного излучения по начальной фазе колебаний среды. В результате спектральновременные характеристики фотонов на выходе из поглотителя оказываются не чувствительными к изменению фазы колебаний среды, что может быть важным для дальнейших квантово-оптических приложений.

Существует ещё один тип источников, который позволяет получить излучение со спектрально-временными характеристиками, близкими к характеристикам РМИ – это синхротронный мёссбауэровский источник (СМИ) [7]. Излучение СМИ представляет собой чрезвычайно обуженное (до порядка ширины линии мёссбауэровского ядерного перехода) синхротронное излучение вследствие брэгтовского рассеяния на кристалле, содержащем соответствующий мёссбауэровский нуклид. К примеру, для получения излучения 14.4 кэВ фотонов необходимо использовать кристалл ⁵⁷FeBO₃. Помимо высокой яркости, а также возможности фокусировки в пятно микронного размера излучение фотонов СМИ является детерминированным. Это позволяет синхронизо-

вать момент излучения фотонов с определённой фазой колебаний поглощающей среды, что позволяет наблюдать новые эффекты при АИП.

Для теоретического описания процесса распространения квазимонохроматического излучения через вибрирующий резонансный ядерный поглотитель с синглетной спектральной линией поглощения удобно перейти в сопровождающую систему отсчёта, в которой ядра поглотителя покоятся. Тогда вследствие эффекта Доплера падающее квазимонохроматическое излучение в сопровождающей системе отсчёта приобретает гармоническую частотную модуляцию. Спектр такого излучения представляет собой совокупность дочерних спектральных линий, разделённых частотой колебаний поглотителя Ω, с амплитудами, пропорциональными функциям Бесселя первого рода $J_n(p)$ от индекса модуляции p (безразмерная амплитуда колебаний среды), и фазами, определяемыми начальной фазой колебаний среды *θ*. При этом спектр поглощения среды в этой системе отсчёта остаётся синглетным и локализованным в окрестности частоты резонанса. В условиях акустически индуцированной прозрачности спектральные линии падающего поля в сопровождающей системе отсчёта располагаются достаточно далеко друг от друга, а амплитуда резонансной компоненты равна нулю. Таким образом, спектральные линии поля в сопровождающей системе отсчёта находятся далеко от ядерного резонанса и испытывают влияние спектральных крыльев резонансной дисперсии поглотителя. Кроме этого, на частоте ядерного резонанса имеется ненулевое остаточное поле, обусловленное интерференцией крыльев спектральных линий падающего излучения, амплитуда которого зависит от начальной фазы колебаний среды. Поглощение этого поля приводит к дополнительным искажениям спектральных и временных характеристик выходного излучения [8].

Прежде чем перейти к обсуждению характера дополнительных искажений, необходимо отметить, что спектрально-временные характеристики СМИ могут изменяться в довольно широких пределах благодаря помещению рассеивающего кристалла во внешнее магнитное поле, его нагреву, а также изменению ориентации кристалла относительно оси пучка синхротронного излучения [7]. В данной работе мы рассмотрели два режима излучения СМИ: (а) со спектральной линией лоренцевой формы, аналогичной излучению РМИ, (б) со спектральной линией формы лоренц-квадрат, образованной двумя близкими лоренцевыми контурами, противофазными друг к другу.

Начнём со случая спектральной линии падающего поля лоренцевой формы. Она обладает широкими спектральными крыльями, спадающими обратно пропорционально величине отстройки от центральной частоты линии. В результате даже в условиях АИП амплитуда остаточного поля на частоте резонанса в сопровождающей системе отсчёта оказывается существенно ненулевой. При частоте колебаний среды, в несколько раз превышающей ширину спектра падающего квазимонохроматического излучения, остаточное резонансное поле оказывается подавленным при $\theta = \pi/2$ вследствие деструктивной интерференции крыльев спектральных компонент излучения в сопровождающей системе отсчёта. Это приводит к наименышим искажениям характеристик резонансного излучения при фиксированных значениях частоты колебаний Ω и оптической толщины среды T_a . Дальнейшее уменьшение спектрально-временных искажений может быть достигнуто путём уменьшения величины отношения T_a/Ω . Если же начальная фаза колебаний среды $\theta = 0$, то амплитуда остаточного поля будет максимальной. Поглощение этого поля приводит к (а) уменьшению амплитуды спектральной линии излучения в лабораторной системе отсчёта, (б) появлению дополнительных искажений на крыльях спектра, (в) появлению амплитудной модуляции интенсивности прошедшего поля.

В случае, когда спектр излучения СМИ имеет форму лоренц-квадрат, спектральные крылья спадают быстрее крыльев лоренцевого контура. Таким образом, в условиях АИП амплитуда остаточного поля на частоте ядерного резонанса в сопровождающей системе отсчёта оказывается пренебрежимо малой. Это приводит к практически полному подавлению поглощения поля на частоте резонанса и, как следствие, отсутствию дополнительных искажений, перечисленных выше.

Наконец, для уменьшения спектрально-временных искажений характеристик рентгеновского излучения, особенно при малых частотах колебаний среды, можно добавить субгармонику в закон движения поглотителя. В этом случае удаётся найти такие условия, при которых ширина индуцированного спектрального окна прозрачности будет совпадать с таковой для случая одночастотных колебаний на фундаментальной частоте. Однако при двухчастотных колебаниях спектр излучения в сопровождающей системе отсчёта будет распределён по большему количеству комбинационных частот и дальше от ядерного резонанса, что приводит к меньшим амплитудам спектральных линий, а значит, и к меньшему резонансному воздействию среды на излучение. В результате как спектральные, так и временные искажения излучения оказываются меньше. Стоит, однако, отметить, что при большой частоте колебаний среды использование двухчастотных колебаний теряет эффективность и, вместе с тем, становится трудно реализуемым. Поэтому в этом случае выгоднее использовать одночастотные колебания поглотителя.

Таким образом, в настоящей работе исследован новый режим АИП, при котором колебания среды синхронизованы с излучением фотонов, что может быть эффективно реализовано при использовании СМИ. Показано, что в этом режиме имеют место интерференционные эффекты, приводящие к дополнительной модуляции во временной зависимости интенсивности прошедшего излучения. Они обусловлены остаточным резонансным взаимодействием излучения со средой, которое зависит от начальной фазы колебаний поглотителя. Также показано, что прозрачность среды может быть улучшена путём добавления субгармоники в закон движения поглотителя.

- [1] McCall S.L., Hahn E.L. // Phys. Rev. Lett. 1967. Vol. 18, № 21. P. 908.
- [2] Boller K.J., İmamoğlu A., Harris S.E. // Phys. Rev. Lett. 1991. Vol. 66, № 20. P. 2593.
- [3] Weis S., Rivi`ere R., Del`eglise S., Gavartin E., Arcizet O., Schliesser A., Kippenberg T.J. // Science. 2010. Vol. 330, № 6010. P. 1520.
- [4] Zhang S., Genov D., Wang Y., Liu M., Zang X. // Phys. Rev. Lett. 2008. Vol. 101, № 4. P. 047401.
- [5] Röhlsberger R., Wille H.-C., Schlage K., Sahoo B. // Nature. 2012. Vol. 482. P. 199.
- [6] Radeonychev Y.V., Khairulin I.R., Vagizov F.G., Scully M., Kocharovskaya O. // Phys. Rev. Lett. 2020. Vol. 124, № 16. P. 163602.
- [7] Potapkin V., Chumakov A.I., Smirnov G.V., Celse J.-P., Rüffer R., McCammon C., Dubrovinsky L. // J. Synchrotron Radiat. 2012. Vol. 19, № 4, P. 559.
- [8] Khairulin I.R., Radeonychev Y.V., Antonov V.A., Kocharovskaya O. // Scientific Reports. 2021. Vol. 11. P. 7930.

СПЕКТР КИСЛОРОДА В ММ-ДИАПАЗОНЕ: ЛАБОРАТОРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ, МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРИЛОЖЕНИЕ К ЗАДАЧАМ АТМОСФЕРНОЙ ФИЗИКИ

Д.С. Макаров, М.В. Беликович, Е.А. Серов, М.Ю. Третьяков

Институт прикладной физики РАН

Введение

Изучение 60-ГГц полосы кислорода важно для решения прикладных задач, связанных с глобальным мониторингом атмосферы Земли. Среди таких задач стоит указать, прежде всего, построение моделей распространения излучения в атмосфере, используемых для развития систем радиосвязи, радиолокации, дистанционного зондирования атмосферы и поверхности Земли, восстановления профиля температуры и предсказания погоды. [1].

Для правильной интерпретации данных, получаемых с радиометров, нужна модель поглощения, основанная на результатах лабораторных исследований в контролируемых условиях. Эти результаты включают в себя как точное знание параметров спектральных линий атмосферных газов (в первую очередь, кислорода и водяного пара), так и информацию о форме линий, учитываемых при моделировании. Так, например, на профиль 60-ГГц полосы существенное влияние оказывает столкновительная связь спектральных линий (которую также называют эффектом интерференции линий или спектральным обменом). Также заметен вклад зависимости столкновительного сечения поглощающей молекулы от её скорости, или «эффект ветра» [2, 3, 4], что сказывается и на расчёте яркостной температуры.

В данной работе изложена актуальная информация о моделировании мм-спектра молекулярного кислорода в атмосферном воздухе, приведены оценки точности моделирования, связанной с неопределённостью спектроскопических параметров модели и их корреляцией, также демонстрируется возможность применения разработанных моделей для расчёта яркостной температуры атмосферы по данным дистанционного зондирования.

Моделирование мм-спектра кислорода с учётом столкновительной связи линий

Вблизи 60 ГГц находится большое количество линий тонкой структуры, при атмосферном давлении профили линий перекрываются и сливаются в единую несимметричную полосу. Наблюдаемая форма полосы не соответствует сумме профилей Ван Флека–Вайскопфа (модельный профиль линии под действием однородного столкновительного уширения), рассчитанных для линий, составляющих полосу – так проявляется эффект столкновительной связи линий [5]. Вид спектра под действием столкновительных процессов определяется матрицей оператора столкновительной релаксации **W**. Точное выражение для спектральной функции включает в себя инверсию матрицы, что требует значительных вычислительных ресурсов при больших размерах матриц. Для 60-ГГц полосы кислорода в атмосфере применяются два подхода. Первый заключается в использовании теории возмущений и моделировании спектра в виде суммы профилей Ван Флека–Вайскопфа с небольшими поправками, пропорциональными первой и второй степени давления газа. Для каждой линии при этом вводятся три дополнительных параметра для учёта столкновительной связи [6]. Такой подход к моделированию применяется в модели MPM (Millimeter-wave Propagation Model), широко используемой специалистами по зондированию атмосферы для моделирования переноса излучения. Параметры модели получаются путём решения некотором упрощении структуры матрицы W.

Подход с использованием формализма ECS (Energy Corrected Sudden, т.е. быстрых соударений с коррекцией энергии) предполагает расчёт матрицы, основанный на знании коэффициентов уширения линий (т.е. её диагональных элементов) и общих соотношений для столкновительных сечений молекулы на разных вращательных уровнях. Также учитывается конечное время соударения, инвертирование матрицы выполняется численно [6, 7]. Для расчёта матрицы в этом случае достаточно ввести всего три параметра, которыми определяются недиагональные элементы.

| Модель, год | сркв. отличие при 300 К, дБ/км |
|-------------|--------------------------------------|
| MPM, 1989 | 0.27 |
| MPM, 1992 | 0.18 |
| MPM, 2005 | 0.1 |
| MPM, 2011 | 0.05 |
| MPM, 2020 | 0.025 |
| ECS, 2020 | 0.021 |

Для обоих подходов параметры модели, характеризующие столкновительную связь, определяются с помощью обработки лабораторных записей профиля 60-ГГц полосы при атмосферном давлении. Прогресс в точности описания спектра при атмосферном давлении и комнатной температуре приведён в таблице. В качестве характеристики соответствия модели экспериментальным данным используется среднеквадратичное отличие между измеренным и расчётным поглощением

при комнатной температуре.



Неопределённость расчётов и точность знания параметров моделей

Значения параметров линий центральной частоты, коэффициента уширения, интегральной интенсивности, априорно используемые в моделях, известны с некоторой конечной точностью. То же самое справедливо для параметров столкновительной связи, которые определяются на основе записей спектра при атмосферном давлении. Все эти неопределённости приводят к неопределённости расчётного значения коэф-

фициента поглощения. Также на эту неопределённость влияет корреляция параметров

моделей. Было показано, что ведущую роль здесь играет точность, с которой известна интенсивность полосы.

На рис. 1 приведен характерный вид неопределённости расчёта коэффициента поглощения с помощью моделей МРМ и ECS для различных случаев (каждая последующая область включает предыдущие):

- серая область для неопределённости интенсивности полосы 0.37% с учётом корреляции параметров;
- голубая область для неопределённости интенсивности полосы 0.37% без учёта корреляции параметров;
- синяя область для неопределённости интенсивности полосы 1% с учётом корреляции параметров;
- зелёная область для неопределённости интенсивности полосы 1% без учёта корреляции параметров [2].
- Красная кривая показывает отличие между экспериментом и расчётом. Также чёрными линиями отмечено положение каналов радиометра HATPRO, для которого ниже приведено сравнение измеренной и расчётной яркостной температуры. Видно, что при неопределённости интенсивности полосы в 1% точность знания

формы полосы становится неважна, поскольку неопределённость интенсивности становится основным источником ошибки расчёта.

Сравнение измерений яркостной температуры с расчётами с использованием обновлённых моделей 60-ГГц полосы кислорода



Модели, с помощью которых рассчитывается поглощение электромагнитных волн атмосферой при произвольных значениях давления и температуры, применяются в радиометрических исследованиях. С их помощью на основании зондовых данных (зависимость давления и температуры от высоты) можно рассчитать яркостную температуру атмосферы (T_b). На рис. 2 приведено сравнение измеренной T_b с расчётной для нескольких случаев [8]. Измерения проводились радиометром HATPRO, частоты каналов которого отмечены на рис. 1. Красными квадратами показано отличие измеренной T_b от расчёта с использованием MPM, где в расчёт поглощения излучения кислородом включены по-

правки только первого порядка по давлению [9] – эта версия широко используется по всему миру (обозначим эту версию модели MPM1). Синим цветом показано отличие измеренной T_b от расчёта, где включены поправки второго порядка по версии работы [6] (MPM2). Голубым цветом показано отличие от расчёта по той же модели, но интенсивность 60-ГГц полосы увеличена на 0.43% согласно выкладкам в [6] (MPM2a). Фиолетовым показано отличие измеренной T_b от расчётной, где коэффициент поглощения молекулярного кислорода рассчитан по модели ECS (обновлённые параметры также приведены в [6]). Модель ECS обеспечивает наилучшее согласие расчёта с радиометрическими измерениями.



Отдельный интерес вызывает учёт «эффекта ветра» в профилях линий, составляющих полосу [3]. На данный момент произведена численная оценка вклада этого эффекта, поскольку отсутствуют данные о температурной зависимости параметров линий, описывающих этот эффект. Согласно оценкам, приведённым на рис. 3, при учёте «эффекта ветра» разница в расчёте T_b для случая, аналогичного представленному на рис. 2, может составить до 0.8 К, что приведёт расчёт по модели МРМ2а к лучшему согласованию с измерениями, а это, в свою очередь, обеспечит более точное восстановление профилей температуры

по данным радиометрических измерений.

Работа поддержана Российским Научным Фондом проект РНФ 18-72-10113.

- Третьяков М. Ю. Высокоточная резонаторная спектроскопия атмосферных газов в миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах длин волн. - Нижний Новгород: ИПФ РАН, 2016, 320 с.
- [2] Koshelev M.A., Delahaye T., Serov E.A. et al // J. Quant. Spectrosc. Rad. Trans. 2017. Vol. 196. P. 78.
- [3] Koshelev M.A., Vilkov I.N., Makarov D.S. et al // J. Quant. Spectrosc. Rad. Trans. 2021. Vol. 264. P. 107546.
- [4] Koshelev M.A., Vilkov I.N., Makarov D.S. et al // J. Quant. Spectrosc. Rad. Trans. 2021. Vol. 262. P. 107472.
- [5] Smith E.W. // J. Chem. Phys. 1981. Vol. 74. Issue 12. P. 6658.
- [6] Makarov D.S., Tretyakov M.Yu., Rosenkranz P.W. // J. Quant. Spectrosc. Rad. Trans. 2020. Vol. 242. P. 106798.
- [7] D.S. Makarov, M.Yu. Tretyakov, C. Boulet // J. Quant. Spectrosc. Rad. Trans. 2013. Vol. 124. P. 1.
- [8] Belikovich, M.V.; Kulikov, M.Y.; Makarov, D.S. et al // Remote Sens. 2021. Vol. 13. P. 2061.
- [9] https://rscl-grss.org/coderecord.php?id=483

ЭФФЕКТ ДОПЛЕРА В ПРОЗРАЧНОЙ ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМЕ

Н.А. Михейцев, А.В. Коржиманов

ННГУ им. Н.И. Лобачевского

Введение

Современные технологии создания фемтосекундных лазеров со сверхвысокой пиковой мощностью позволили проводить эксперименты по взаимодействию с веществом излучения интенсивностью до 10^{22} Вт/см² и выше. Характер взаимодействия при этом носит сильно нелинейный характер, вызванный ультрарелятивизмом осциллирующих в поле излучения электронов. Такие системы актуальны с точки зрения преобразования оптической энергии излучения в кинетическую энергию движения заряженных частиц [1] и энергию излучения других спектральных диапазонов [2]. Данная работа посвящена теоретическому описанию генерации низкочастотного излучения в диапазоне длин волн выше 3 мкм в подобных лазерно-плазменных системах.

Этот диапазон относится к плохо освоенным в силу того, что частота излучения здесь слишком мала для эффективной лазерной генерации, но слишком велика для электронных методов генерации. Однако в последние годы наблюдается резкий рост эффективности источников в этом диапазоне на основе параметрического усиления света, который позволил достичь релятивистских интенсивностей излучения [3]. При этом источники среднего инфракрасного излучения чрезвычайно востребованы в большом числе спектрографических приложений [4]. В частности, в ритр-ргоbе экспериментах с контролируемой задержкой они позволяют изучать динамику электронной конфигурации с фемтосскундным разрешением во времени.

В настоящей работе мы обращаем внимание, что даже в прозрачной плазме за счёт стрикционной нелинейности возможно образование пика электронной плотности, достаточного для эффективного отражения падающего на плазму интенсивного лазерного излучения со значительным доплеровским сдвигом по частоте.

Одномерный случай

Лазерный импульс релятивистской интенсивности при падении на слой закритической плазмы оказывает пондеромоторное воздействие на электронную компоненту плазмы. При этом при длительности импульса, много меньшей обратной плазменной ионной частоты, динамикой ионной компоненты можно пренебречь. В результате пондеромоторной силе противодействует электростатическая сила, возникающая благодаря разделению зарядов. При балансе этих сил возможен квазистационарный режим отжатия с сохранением резкой границы электронного слоя. Скорость движения этой границы определяется скоростью нарастания амплитуды лазерного импульса и плотностью плазмы. При достаточно быстром нарастании амплитуды в достаточно разреженной плазме скорость движения отражающей поверхности может приближаться к скорости света, обеспечивая заметное понижение частоты отражённого импульса.

Этот эффект наблюдался в одномерном численном моделировании, выполненном с помощью программного комплекса PICADOR [5], в котором реализован метод частиц в ячейках. Причём при использовании падающих импульсов с резким передним фронтом и плазменных мишеней с концентрацией электронов, меньшей критической, эффект понижения частоты был выражен наиболее ярко.

Для оценки силы эффекта воспользуемся тем фактом, что для слоёв плазмы с концентрацией, меньшей критической, скорость движения отражающей границы оказывается постоянной в течение многих периодов падающего поля. Величину этой скорости определим из численного моделирования. Тогда отражённое поле можно описать с помощью эффекта Доплера для волнового пакета, отражающегося от движущегося зеркала: $E_r(t) = E_i(t - 2z_b(t')/c)$, здесь $E_r(t), E_i(t)$ – отражённые и падающие поля, $z_b(t)$ – зависимость положения отражающей границы от времени, в





нашем приближении линейная, t' – момент времени, в который происходит отражение, c – скорость света. На рис. 1 представлено сравнение полей из численного моделирования (синим цветом) с полем, полученным в рамках модели, учитывающей только эффект Доплера (зелёным), а также концентрация электронов в том же сечении (оранжевым). Все величины приведены в безразмерных единицах $a = eE/(mc\omega)$ –

компоненты поля, $n_e = 4\pi N_0 e^2/(m\omega^2)$ – концентрация электронов, ω – частота падающего излучения, m – масса электрона, e – элементарный заряд. Наблюдается хорошее совпадение в начале взаимодействия, но сильное отличие после отрыва пучков электронов, вылетающих навстречу падающему излучению.

Таким образом, в одномерном случае наблюдается сильное смещение излучения в низкочастотную область при обратном отражении лазерного импульса с резким передним фронтом от слоя плазмы с резкой границей и концентрацией, меньшей критической. При уменьшении начальной концентрации частиц в плазме эффект преобразования в низкочастотную область усиливается. При этом максимальная длина волны в спектре отраженного импульса хорошо совпадает с оценкой на основе эффекта Доплера.

Двумерный случай

При рассмотрении одномерного случая удаётся найти основной механизм преобразования в низкочастотный диапазон. Однако в многомерной геометрии существенную роль может играть развитие поперечных неустойчивостей. Поэтому для проверки основных зависимостей, полученных в одномерном анализе, был поставлен также ряд двумерных численных экспериментов.

На рис. 2 приведён пример двумерного расчёта, выполненного также с применение программного комплекса PICADOR. Сверху приведено распределение электронов, а снизу – распределение одной из поперечных компонент поля. Как и в одномерном случае наблюдается отжатие электронной компоненты в тонкий слой с образованием характерной каверны. Так как на этих временах взаимодействия ионная компонента плазмы не успевает за движением электронов, то после прохождения задней части импульса отрицательно заряженные частицы под действием кулоновских сил



Рис. 2

закрывают каверну. Следствием этого является то, что низкочастотное излучение эффективно отражается только в течение нескольких первых периодов, а остальная её часть оказывается запертой внутри каверны.

Вывод

В данной работе исследована генерация ультракоротких импульсов в диапазоне длин волн выше 3 мкм при обратном отражении релятивистски интенсивного лазерного импульса от слоя прозрачной плазмы. Наибольшая отраженная длина волны наблюдалась при отражении лазерного импульса с резким передним фронтом от малоплотной мишени. Длина волны отсечки хорошо совпадает с оценкой на основе эффекта Доплера. В двумерном случае также наблюдается эффективная генерация, но поперечные неоднородности укорачивают отражённый импульс.

- Esarey E., Schroeder C., Leemans W. // Reviews of Modern Physics. 2009. Vol. 81. P. 1229.
- [2] Albert F., Thomas A.G.R. // Plasma Physics and Controlled Fusion. 2016. Vol. 58.
- [3] Wilson D.J., Summers A.M., Zigo S., Davis B., Robatjazi S.-J., Powell J.A., Rolles D., Rudenko A., Trallero-Herrero C.A. // Scientific Reports. 2019. Vol. 9. P. 6002.
- [4] Meshcherinov V.V., Spiridonov M.V., Kazakov V.A., Rodin A.V. // Quantum Electronics. 2020. Vol. 50. P. 1055.
- [5] Gonoskov A. et. al. // Phys. Rev. 2011. Vol. 51. P. 046403.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭНЕРГИИ УРБАХА В ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНКАХ И СТРУКТУРАХ С КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ НА ОСНОВЕ ТВЕРДОГО РАСТВОРА HgCdTe

А.А. Разова^{1, 2)}, В.В. Румянцев²⁾, Е.В. Андронов³⁾, Н.Н. Михайлов⁴⁾, С.А. Дворецкий⁴⁾, С.В. Морозов²⁾

¹⁾ННГУ им. Н.И. Лобачевского ²⁾ Институт физики микроструктур РАН ³⁾Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева ⁴⁾Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН

Эпитаксиальные пленки на основе HgCdTe (КРТ) уже давно используются для создания фотодетекторов среднего инфракрасного (ИК) диапазона [1]. Но несмотря на это, при увеличении рабочей длины волны технология роста структур до сих пор сталкивается с рядом проблем, одной из которых являются флуктуации состава твердого раствора HgCdTe. При малой доле кадмия и, соответственно, малой ширине запрещенной зоны флуктуации сильно увеличивают значение темнового тока и ограничивают возможность создания высокочувствительных детекторов. Поэтому исследование однородности структур, рассчитанных на детектирование излучения с длиной волны более 20 мкм, становится актуальной задачей. В данной работе эта задача решается с помощью анализа энергии Урбаха, которая отражает наличие «хвостов» плотностей состояний в запрещенной зоне и определяется как характерный масштаб экспоненциального спадания длинноволновой («красной») границы спектров фотопроводимости (ФП) и фотолюминесценции (ФЛ), полученных методом фурьеспектроскопии:

$$I = I_0 ex \, p\left(\frac{h\nu - E_0}{W}\right),\tag{1}$$

где I_0 – уровень сигнала ФП или ФЛ при E_0 , $h\nu$ – энергия фотона, W – энергия Урбаха, E_0 – ширина запрещенной зоны.

В общем случае урбаховский «хвост» возникает из-за взаимодействия носителей заряда с фононами, а также из-за наличия неоднородностей и дефектов в материале. Вклад в энергию Урбаха, обусловленный взаимодействием с фононами, зависит от температуры, что позволяет отделить его от вклада, связанного со «статическими» неоднородностями.

Все исследуемые эпитаксиальные пленки были выращены методом молекулярнолучевой эпитаксии (МЛЭ) на полуизолирующей подложке GaAs (013) с буферами ZnTe и CdTe [2]. Образцы преднамеренно не легировались. Параметры пленок (*d* толщина пленки, *x* — концентрация Cd) приведены в табл. 1.

На рис. 1 представлены спектры $\Phi\Pi$ объемных структур с различным содержанием кадмия (x) при температуре 4.2 и 77 К. Видно, что логарифмический масштаб по вертикальной оси «спрямляет» длинноволновый край спектров $\Phi\Pi$. Таким образом, аппроксимируя этот край простейшей экспоненциальной функцией (1), можно определить значение энергии Урбаха W (табл. 1). Из табл. 1 видно, что для всех исследованных эпитаксиальных структур энергия Урбаха составляет от 1 до 5 мэВ, и ее значение увеличивается с ростом температуры. Отметим, что энергия Урбаха в исследуемых структурах более чем на порядок меньше, чем в КРТ-пленках, также выращенных МЛЭ, других групп [3], а также типичных значений в других твердых растворах [4] и даже бинарных материалах [5].

Табл 1

| | | | | | | 140.1.1 | |
|--------------------|-------|---------------|------------------|--------------|-------------------|---------------|--|
| Номер структуры | x | <i>d</i> , нм | <i>W</i> , мэВ | | | | |
| | | | Фотопроводимость | | Фотолюминесценция | | |
| | | | 4.2 K | 77 K | 18 K | 77 K | |
| 1 (130905) | 0.183 | 8000 | 0.95 ± 0.25 | 1.6 ± 0.6 | - | - | |
| 2 (120208) | 0.189 | 4200 | 1.5 ± 0.4 | 2.5 ± 0.2 | 1.46 ± 0.06 | 1.16 ± 0.07 | |
| 3 (120210) | 0.191 | 3840 | 1.4 ± 0.25 | 2.1 ± 0.1 | 1.77 ± 0.05 | - | |
| 4 (120613) | 0.22 | 3940 | - | 3.5 ± 0.2 | 1.96 ± 0.1 | 2.23 ± 0.12 | |
| 5 (120621) | 0.23 | 5960 | 2.35 ± 0.25 | 3.7 ± 0.6 | 2.97 ± 0.07 | 5.06 ± 0.1 | |



Рис. 1

Полученная на основе анализа спектров ФП температурная зависимость для структуры с содержанием Cd *x*=0.191 хорошо описывается полуэмпирической моделью G. D. Cody [6] (рис. 2):

$$W(T) = A \left[\frac{1+P}{2} + \left\{ exp\left(\frac{T_0}{T}\right) - 1 \right\}^{-1} \right],$$
 (2)

где P – коэффициент, описывающий вклад флуктуации состава твердого раствора и дефектов. Для исследуемой структуры P стремится к нулю в пределах ошибки +0.5, что соответствует малому вкладу неоднородности структур в энергию. При этом в рамках модели можно оценить значение Дебаевской температуры как $\Theta_D = 4T_0 / 3$, которое хорошо согласуется с литературными данными [7] и составляет (144 ± 27) К.

Таким образом, зависимость энергии Урбаха от температуры показывает, что неоднородность структур играет пренебрежимо малую роль, и основной вклад в энергию Урбаха дает фундаментальное взаимодействие с фононами.

Помимо объемных пленок, отдельный интерес представляют гетероструктуры с квантовыми ямами (КЯ) на основе КРТ, выращенные МЛЭ, которые последние годы предлагаются как материал для источников длинноволнового ИК-диапазона.



Рис. 2



Параметры исследованных структур с КЯ $Hg_{1-x}Cd_xTe/Cd_yHg_{1-y}Te$ (концентрация кадмия в КЯ (x) и в барьерах (y) и толщина КЯ (d)) приведены в табл. 2. Значения энергии Урбаха W гетероструктур с массивами КЯ близки к значениям энергии в эпитаксиальных слоях (табл. 1 и 2, рис. 3). Также из табл. 2 видно, что энергия Урбаха W меньше по сравнению с пороговой энергией оже-рекомбинации E_{th} , то есть суммарной кинетической энергии трех частиц, при которой оже-процесс становится разрешен законами сохранения энергии и квазиимпульса [8]. При достижении носителями энергии E_{th} темп безызлучательной оже-рекомбинации резко возрастает, что может привести к гашению СИ [9] или невозможности его получения. Поэтому полученный результат ($W < E_{th}$) позволяет рассчитывать на получение СИ в диапазоне 10–30 мкм в условиях, когда суммарная кинетическая энергия носителей меньше E_{th} .

| | | | | | | | Табл. 2 |
|-----------|-------|------|-------|---------------|----------------|-------------|------------------|
| Номер | | | 1 | | <i>W</i> , мэВ | | <i>Еth</i> , мэВ |
| структуры | x | У | а, нм | 4.2 K | 77 K | 300 K | 4.2 K |
| 150120 | 0 | 0.59 | 3.17 | 4.8 ± 1.4 | 4.8 ± 0.9 | 4.5 ± 0.6 | 42.6 ± 0.5 |
| 161222 | 0.102 | 0.63 | 6.1 | 1.7 ± 0.5 | 2.4 ± 0.2 | 6.5 ± 0.9 | 19 ± 0.5 |
| 170331 | 0.098 | 0.55 | 7.8 | 2.3 ± 0.7 | 2.6 ± 0.7 | - | 10.6 ± 0.5 |

Стоит заметить, что в структурах № 150120 (*x*=0) и № 161222 (*x*=0.102), рассчитанных на длину волны около 10 мкм, значение энергии Урбаха различается в 2-3 раза при 4.2 и 77 К, что, по-видимому, обусловлено различием в толщинах КЯ: воспроизводимый рост узких КЯ HgTe является более сложной задачей по сравнению с ростом относительно широких (*d* > 6 нм) КЯ HgCdTe. Разница в однородности приводит к тому, что в структуре № 161222 удается получить СИ в непрерывном режиме при пороговой мощности возбуждения около 2 Вт/см² (рис. 4), в то время как в структуре № 150120 СИ удается получить только в импульсном режиме с плотностью мощности накачки ~ 100 Вт/см². При этом в структуре № 150120 СИ наблюдается вплоть до 175 К, а в № 161222 – до 100 К, что уже определяется пороговой энергией оже-рекомбинации [10]. Для сравнения СИ для структуры № 150120 при 20 К в импульсном режиме продемонстрированно на рис. 4.



Рис. 4

Таким образом, в настоящий момент достигнут существенный прогресс в технологии роста структур на основе HgCdTe методом МЛЭ. Показано, что основной вклад в энергию Урбаха эпитаксиальных пленок дает фундаментальное взаимодействие носителей заряда с фононами. В структурах с КЯ достигнутая степень однородности сравнима с однородностью объемных пленок. В структуре с КЯ с энергией Урбаха ~2 мэВ получено СИ на длине волны 10.35 мкм в непрерывном режиме.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (проект № 0729-2020-0035).

- [1] Rogalski A. // Reports on Progress in Physics. 2005. Vol. 68, № 10. P. 2267-2336.
- [2] Mikhailov N.N., Smirnov R.N., Dvoretsky S.A., Sidorov Yu.G., Shvets V.A., Spesivtsev E.V., Rykhlitski S.V. // Int. J. of Nanotechnology. 2006. Vol. 3, № 1. P. 120.
- [3] Chang Y., Badano G., Zhao J., Zhou Y.D., Ashokan R., Grein C.H., Nathan V. // Journal of Electronic Materials. 2004. Vol. 33, № 6. P. 709-713.
- [4] Zhu Jiajun, Xia Yunyouyou, Li Gang, Zhou Shengqiang, Wimmer S., Springholz G., Pashkin A., Helm M., Schneider H. // Appl. Phys. Lett. 2019. Vol. 114. P. 162105.
- [5] Rai R. // Journal of Applied Physics. 2013. Vol. 113, № 15. P. 153508.
- [6] Cody G.D., Tiedje T., Abeles B., Brooks B., Goldstein Y. // Phys. Rev. Lett. 1981. Vol. 47, № 20. P. 1480–1483.
- [7] Zhang K., Yadav A., Shao L., Bommena R., Zhao J., Velicu S., Pipe K.P. // AIP Adv. 2016. Vol. 6, № 7. P. 075009.
- [8] Aleshkin V.Y., Dubinov A.A., Rumyantsev V.V., Morozov S.V. // Journal of physics. Condensed matter: an Institute of Physics journal. 2019. Vol. 31, № 42. P. 425301.
- [9] Morozov S.V., Rumyantsev V.V., Fadeev M.A., Zholudev M.S., Kudryavtsev K.E., Antonov A.V., Kadykov A.M., Dubinov A.A., Mikhailov N.N., Dvoretsky S.A., Gavrilenko V.I. // Applied Physics Letters. 2017. Vol. 111, № 19. P. 192101.
- [10] Разова А.А., Румянцев В.В., Бовкун Л.С., Алешкин В.Я., Михайлов Н.Н., Дворецкий С.А., Морозов С.В. // В кн.: Труды XXIV научной конференции по радиофизике. 13-31 мая 2020 г. / Ред. В.В. Матросов. – Н. Новгород: Изд-во ННГУ, 2020. С. 252-255.

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПАРАМЕТРОВ СТОЛКНОВИТЕЛЬНОГО УШИРЕНИЯ ЛИНИИ КИСЛОРОДА ВБЛИЗИ 118.75 ГГЦ

М.А. Кошелев¹⁾, И.Н. Вилков¹⁾, М.А. Сергеев^{1, 2)}, М.Ю. Третьяков¹⁾

¹⁾ ИПФ РАН ²⁾ ННГУ им. Н.И. Лобачевского

Линия кислорода вблизи 118 ГГц – одна из важнейших диагностических линий миллиметрового диапазона длин волн, используемая в радиометрических исследованиях атмосферы Земли для определения температуры и давления. Для анализа радиометрических данных требуются модели распространения электромагнитного излучения в атмосфере. В основе таких моделей лежит высокоточная спектроскопическая информация о форме и параметрах линий поглощения основных атмосферных газов, от точности которой зависит точность интерпретации результатов радиометрических измерений. Этим фактором обусловлено ужесточение требований к точности используемой в моделях спектроскопической информации.

Данная работа направлена на уточнение формы 118-ГГц линии кислорода с учетом «тонких» физических эффектов, в частности, «эффекта ветра». Физически этот эффект обусловлен тем, что молекулы, движущиеся с разными скоростями, имеют различные эффективные сечения столкновений. На примере спектров ряда молекул известно, что относительный вклад «эффекта ветра» в форму линии составляет порядка 1-2%, и это достаточно большая величина с учетом современных требований радиометрии. Однако существующие модели атмосферного поглощения миллиметровых волн данный эффект не учитывают, внося тем самым систематическую ошибку в определение параметров атмосферы. Полученные нами в широком диапазоне температур (от -28°C до +85°C) спектры кислорода позволяют с необходимой для приложений точностью измерить столкновительные параметры линии, включая параметры, характеризующие «эффект ветра», и использовать их для усовершенствования моделей атмосферного поглощения.

Эксперимент

Спектры чистого (99.995%) кислорода регистрировались с помощью спектрометра с радиоакустическим детектором сигнала поглощения (РАД-спектрометр), принцип действия которого представлен в работе [1]. В качестве источника излучения использовалась лампа обратной волны (ЛОВ), частота которой стабилизировалась системой ФАПЧ по высокостабильному сигналу опорного генератора. Для записи спектров использовалась манипуляция частоты излучения ЛОВ с последующей демодуляцией сигнала спектрометра на частоте модуляции. Девиация частоты для каждого спектра фиксировалась на величине, примерно равной ширине спектральной линии. Для увеличения качества получаемых спектров производилась их многократная запись с последующим усреднением. Пример усредненного экспериментального спектра чистого О₂ при температуре 70⁰С и давлении 1.53 Торр показан на рис. 1.



При частотной манипуляции зависимость выходного сигнала спектрометра $S_{\text{вых}}$ от частоты f можно представить в следующем виде:

$$S_{\text{Bbix}}(f) = S(f + dev) - S(f - dev), \tag{1}$$

где

 $S(f) = S_0 \cdot F(f) \cdot (1 + a \cdot (f - f_0)) + b + c \cdot (f - f_0)),$ S₀ – интенсивность линии; F(f) – профиль линии; a, b, c – параметры, характеризующие аппаратную функцию спектрометра.

Профиль линии и анализ экспериментальных данных

При анализе экспериментальных данных использовался контур Фойгта, учитывающий эффект Доплера и столкновительное уширении линии. Соответствующая функция профиля линии записывается в следующем виде:

$$F_{Voigt}(f - f_0) = \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-t^2}}{y^2 + (x - t)^2} dt,$$

$$x = \frac{f - f_0}{\Delta f_0} \cdot \sqrt{\ln 2}, \quad y = \frac{\Delta f_c}{\Delta f_0} \cdot \sqrt{\ln 2}.$$
(2)

Здесь f_0 – центр линии, Δf_D и Δf_c – доплеровская и столкновительная полуширины, соответственно.

Остаток математической подгонки функции Фойгта к экспериментальной записи показан в нижней части рис. 1 и демонстрирует систематическое отличие экспериментальной записи от расчетной. Качество фита (отношение сигнала к шуму) составляет величину порядка 3300. Причем вид этого систематического отличия характерен для проявления «эффекта ветра», поэтому следующим шагом было использование модифицированного контура Фойгта, в котором зависимость ширины линии Δf_c от скорости поглощающих молекул V_a аппроксимируется квадратичной зависимостью вида

$$\Delta f_c = \frac{\Gamma}{2\pi}, \quad \Gamma(V_a) = \Gamma_0 + \Gamma_2 \cdot \left(\left(\frac{V_a}{V_0}\right)^2 - \frac{3}{2}\right), \qquad \Gamma_0 = \int_0^\infty \Gamma(V_a) f(V_a) dV_a. \tag{3}$$

В литературе этот контур носит название quadratic speed-dependent Voigt (qSDV). Остаток математической подгонки контура qSDV к экспериментальной записи, приведенный в нижней части рис. 1, носит шумовой характер, что свидетельствует об адекватности используемой модельной функции. Кроме того, ее применение для анализа экспериментального спектра почти в 4 раза улучшает качество фита.

Аналогичным образом был произведен анализ всех экспериментальных спектров. Для каждой температуры была построена зависимость параметров Γ (для контура Фойгта), Γ_0 и Γ_2 (для qSDV) от давления *P* (см. рис. 2), по линейной аппроксимации которой определялись соответствующие параметры уширения *γ*, *γ*₀ и *γ*₂.

Профиль линии и анализ экспериментальных данных

Температурная зависимость параметров γ_0 и γ_2 показана на рис. 3 и рис. 4, соответственно. Там же показана функция вида $\gamma(T) = \gamma(296) \left(\frac{296}{T}\right)^{n_{\gamma}}$, использовавшаяся для аппроксимации температурной зависимости параметров столкновительного уширения. Численные результаты аппроксимации приведены в таблице в сравнении с данными предшествующих работ. Ошибки, приведенные для значений данной работы, соответствуют утроенной статистической неопределенности 3 σ , полученной из аппроксимации зависимостей.



Хорошее согласие (в пределах экспериментальных погрешностей) результатов данной и более ранних работ подтверждает достоверность представленных в таблице данных. Видно, что температурные показатели $n_{\gamma 0}$ и $n_{\gamma 2}$, полученные в данном исследовании, совпадают в пределах экспериментальной погрешности, что также продемонстрировано на рис. 4 двумя аппроксимирующими функциями с соответствующими значениями температурных показателей. Таким образом, отношение γ/γ_0 в пределах ошибок эксперимента можно считать постоянной величиной. Следует также отметить, что зависимость $\gamma_2(T)$ для этой линии получена впервые.

Табл.

| | Значение параметра, МГц/Торр | | | | | |
|----------------------|------------------------------|-----------|-----|--|--|--|
| Параметр | Данная работа | ие | | | | |
| γ(296) | 2.247(3) | 2.239(2) | [2] | | | |
| n_{γ} | 0.782(15) | 0.765(7) | [2] | | | |
| γ ₀ (296) | 2.272(2) | 2.269(4) | [3] | | | |
| $n_{\gamma 0}$ | 0.776(6) | - | | | | |
| $\gamma_{2}(296)$ | 0.173(3) | 0.172(12) | [3] | | | |
| $n_{\gamma 2}$ | 0.66(15) | - | | | | |

Полученная информация является новой и представляет интерес для решения задач атмосферной физики.

Работа поддержана грантом РФФИ № 19-05-00969.

[1] Третьяков М. Ю., Кошелев М. А., Макаров Д. С., Тонков М. В. // Приборы и техника эксперимента. 2008. № 1. С. 87.

[2] Koshelev M.A., Vilkov I.N., Tretyakov M.Yu. // JQSRT. 2016. Vol. 169. P. 91.

[3] Koshelev M.A., Delahaye T., Serov E.A., Vilkov I.N., Boulet C., Tretyakov M.Yu. // JQSRT. 2017. Vol. 196. P. 78.

АДИАБАТИЧЕСКАЯ ТРАНСФОРМАЦИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В НЕСТАЦИОНАРНОЙ СРЕДЕ ЛОРЕНЦА

А.В. Широкова, А.В. Маслов, М.И. Бакунов

ННГУ им. Н.И. Лобачевского

Введение

Исследование электромагнитных явлений в нестационарных средах представляет интерес для разработки новых устройств активной фотоники и плазмоники. Нестационарность среды может приводить к таким интересным эффектам, как преобразование частоты, отражение от временной границы, невзаимность распространения волн. Как правило, для описания явлений в нестационарных средах используется модель недиспергирующего диэлектрика с изменяющейся во времени диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(t)$ или модель плазмы с изменяющейся плотностью свободных носителей. Указанные модели, однако, не применимы для описания сред с атомными (молекулярными) резонансами. Учет взаимодействия электромагнитной волны с резонансами среды важен, например, для описания электромагнитных явлений в метаматериалах с активируемыми внешним источником метаатомами [1] или в смеси химически реагирующих молекул [2]. Для описания таких сред в работе [3] было предложено использовать модель среды Лоренца с изменяющейся во времени плотностью осцилляторов.

В данной работе получены материальные уравнения для нестационарной среды Лоренца, плотность осцилляторов в которой увеличивается или уменьшается во времени по произвольному закону, а также для среды Лоренца с изменяющейся собственной частотой осцилляторов. Исследовано преобразование электромагнитных волн в медленно изменяющейся среде Лоренца. Для этого получены адиабатические инварианты – комбинации энергии и частоты волны, которые остаются постоянными при медленных изменениях среды во времени.

Среда Лоренца с возрастающей плотностью осцилляторов

Среда Лоренца – модель диспергирующей среды, в которой реальный материал представляется как совокупность классических осцилляторов (электронов, колеблющихся относительно ядер). Рассмотрим вначале электромагнитные свойства среды Лоренца с возрастающей во времени по произвольному закону плотностью осцилляторов *N*(*t*).

Отклик осциллятора на электрическое поле определяется следующим уравнением для дипольного момента осциллятора $\mathbf{p}(t)$:

$$\frac{\partial^2 \boldsymbol{p}}{\partial t^2} + \Omega_0^2 \boldsymbol{p} = \frac{e^2}{m} \boldsymbol{E},\tag{1}$$

где *е* и *m* – заряд и масса электрона, Ω_0 – собственная частота осциллятора.

Поляризация среды в момент времени t определяется выражением

$$\boldsymbol{P}(t) = \int_{-\infty}^{t} \frac{dN(\tilde{t})}{d\tilde{t}} \boldsymbol{p}(t,\tilde{t}) d\tilde{t}, \qquad (2)$$

где $p(t, \tilde{t})$ – дипольный момент осциллятора, появившегося в момент \tilde{t} . Выражение (2) учитывает возникновение в среде многопотокового движения осцилляторов, появившихся в разные моменты времени.

Преобразуя уравнения (1) и (2), получим материальное уравнение для среды Лоренца с возрастающей плотностью осцилляторов вида

$$\frac{\partial^2 \boldsymbol{P}}{\partial t^2} + \Omega_0^2 \boldsymbol{P} = \frac{\Omega_p^2}{4\pi} \boldsymbol{E}, \ \Omega_p(t) = \sqrt{4\pi e^2 N(t)/m}.$$
(3)

Далее, используя уравнение (3) и уравнения Максвелла, исследуем методом ВКБ эволюцию электромагнитной волны в среде Лоренца при медленном (в масштабе периода волны) возрастании плотности осцилляторов.

На рис. 1 показано, как изменяется частота исходной волны при увеличении плотности осцилляторов. Для волны с исходной частотой $\omega > \Omega_0$ (верхняя дисперсионная кривая) увеличение плотности осцилляторов приводит к росту частоты волны, для волны с $\omega < \Omega_0$ (нижняя дисперсионная кривая) – к убыванию частоты. Волновое число *k* сохраняется в силу трансляционной симметрии системы.

Используя выражение для плотности энергии электромагнитной волны и следуя процедуре, описанной в работе [4], получаем адиабатический инвариант вида

$$W\frac{\omega^2 - \Omega_0^2}{\omega} = const.$$
 (4)

Из (4) следует, что в среде с возрастающей плотностью осцилляторов сдвиг частоты волны всегда сопровождается уменьшением ее энергии как для волн с $\omega > \Omega_0$, так и для волн с $\omega < \Omega_0$ (рис. 2).



Среда Лоренца с убывающей плотностью осцилляторов

Рассмотрим теперь электромагнитные свойства среды Лоренца, в которой плотность осцилляторов N(t) убывает во времени по произвольному закону. Поскольку в данном случае не возникает многопотокового движения осцилляторов, материальное уравнение может быть записано в виде

$$J = N(t) \frac{\partial p}{\partial t'},\tag{5}$$

где дипольный момент р определяется уравнением (1).

Используя материальное уравнение (5), получим адиабатический инвариант для электромагнитных волн, распространяющихся в среде Лоренца с медленно убывающей плотностью осцилляторов, в виде

$$W \frac{\omega}{\omega^2 - \Omega_0^2} = const.$$
(6)

Из инварианта (6) и рис. 1 (с противоположным направлением стрелок) следует, что сдвиг частоты волны также сопровождается уменьшением энергии волны (см. рис. 3).

Среда Лоренца с изменяющейся во времени собственной частотой

Рассмотрим, наконец, случай нестационарной среды Лоренца с изменяющейся во времени собственной частотой осцилляторов $\Omega_0(t)$. Материальное уравнение в этом случае имеет вид

$$\frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2} + \Omega_0^2(t) \mathbf{P} = \frac{\Omega_p^2}{4\pi} \mathbf{E}.$$
(7)

Как показано на рис. 4, при медленном изменении собственной частоты осцилляторов частота исходной волны повышается с ростом собственной частоты как для низкочастотных, так и для высокочастотных волн.

Используя уравнение (7), находим инвариант $W/\omega = const$, который справедлив как при увеличении, так и при уменьшении собственной частоты. Из инварианта следует, что в случае увеличения собственной частоты энергия волны увеличивается, а в случае уменьшения собственной частоты – уменьшается.



Рис. 3

Рис. 4

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (0729-2020-0035).

- [1] Lee K., Son J., Park J., Kang B., Jeon W., Rotermund F., Min B. // Nature Photon. 2018. Vol. 12. P. 765.
- [2] Huang K., Hong T. // J. Phys. Chem. A. 2015. Vol. 119. P. 8898.
- [3] Qu K., Jia Q., Edwards M.R., Fisch N.J. // Phys. Rev. E. 2018. Vol. 98. P. 023202.
- [4] Bakunov M.I., Grachev I.S. // Phys. Rev. E. 2002. Vol. 65. P. 036405.

ГЕНЕРАЦИЯ ВЫСОКИХ ГАРМОНИК ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГАЗАХ: ВЛИЯНИЕ АСИМПТОТИКИ МОЛЕКУЛЯРНОГО ПОТЕНЦИАЛА И ИНТЕРФЕРЕНЦИИ ЭЛЕКТРОННЫХ ТРАЕКТОРИЙ НА ПОЛОЖЕНИЕ ДВУХЦЕНТРОВОГО МИНИМУМА

А.Д. Слюсарева¹⁾, М.Ю. Рябикин^{1, 2)}

¹⁾ ННГУ им. Н.И. Лобачевского ²⁾ Институт прикладной физики РАН

Введение

Воздействие на частицы газа фемтосекундными лазерными импульсами с пиковыми напряженностями электрического поля, сравнимыми с напряженностями внутренних полей в частицах, приводит к их ионизации. Среди явлений, связанных с лазерной ионизацией частиц газа, большой фундаментальный и практический интерес вызывают такие явления, как многофотонная ионизация, надпороговая ионизация, многократная ионизация, генерация высоких гармоник лазерного излучения, генерация терагерцового излучения, стабилизация атомов и др. При теоретическом описании многих из этих явлений используется приближение сильного поля, основанное на пренебрежении влиянием поля ионного остова на движение отрываемого электрона. Однако в ряде важных случаев использование такого приближения не позволяет адекватно описывать наблюдаемые эффекты или приводит к значительным расхождениям между теоретическими и экспериментальными результатами. Даже в случае расчетов за рамками приближения сильного поля результаты могут сильно зависеть от выбора модели для описания взаимодействия между частицами, участвующими в исследуемом процессе.

В данной работе рассматривается генерация высоких гармоник в молекулярных газах. Расчеты проводились путем численного интегрирования нестационарного уравнения Шредингера в рамках одномерных моделей. Модели пониженной размерности широко используются при рассмотрении процессов в сильных полях, позволяя значительно уменьшить объем требуемых вычислительных ресурсов при исследовании зависимостей характеристик изучаемых процессов от различных параметров задачи, зачастую давая при этом результаты, хорошо согласующиеся с экспериментальными данными и с результатами расчетов в рамках более точных моделей.

Описание метода

В качестве основного уравнения используется уравнение Шредингера:

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi = \frac{1}{2}(\vec{p} + \frac{\vec{A}(t)}{c})^2\psi + V(\vec{r})\psi, \qquad (1)$$

где $\vec{A}(t)$ – векторный потенциал электромагнитного поля

$$\vec{A}(t) = c \int_{-\infty}^{t} \vec{E}(\tau) d\tau.$$
⁽²⁾

 $V(\vec{r})$ – потенциал взаимодействия электрона с ионом.

В качестве ионизующего лазерного импульса в данной работе используется поле линейно поляризованного лазерного импульса с трапецеидальной огибающей.

Излучение атома определяется величиной дипольного ускорения электрона $\ddot{d}(t)$. Величину $\ddot{d}(t)$ удобно вычислять, используя теорему Эренфеста, согласно которой средние значения физических величин изменяются по законам классической механики:

$$\ddot{d}(t) = -\frac{d^2}{dt^2} \langle \vec{r} \rangle = \left\langle \psi(\vec{r}, t) \middle| \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial \vec{r}} + \vec{E}(t) \middle| \psi(\vec{r}, t) \right\rangle.$$
(3)

Перепишем равенство (3) в виде:

$$\ddot{d}(t) = -\frac{d^2}{dt^2} \langle \vec{r} \rangle = \left\langle \psi(\vec{r}, t) \middle| \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \middle| \psi(\vec{r}, t) \right\rangle + \vec{E}(t) = \vec{R}(t) + \vec{E}(t).$$
⁽⁴⁾

Второе слагаемое линейно по полю, поэтому для исследования в данной работе представляет интерес лишь первое слагаемое, содержащее нелинейную часть отклика, связанную с влиянием атомного потенциала:

$$\vec{R}(t) = \int |\psi(\vec{r},t)|^2 \frac{\partial V}{\partial \vec{r}} d\vec{r}.$$
(5)

Далее величину (5) будем называть поляризационным откликом атома.

Для численного расчета динамики волновой функции электрона в данной работе был выбран метод операторного расщепления (split-step метод) с использованием быстрого преобразования Фурье:

$$\psi(t + \Delta t) = \exp\left(-iH_r\frac{\Delta t}{2}\right)F^{-1}\exp\left(-iH_p\Delta t\right)F\exp\left(-iH_r\frac{\Delta t}{2}\right)\psi(t),$$
⁽⁶⁾

где F и F^{-1} обозначают прямое и обратное преобразования Фурье соответственно.

Потенциал

В качестве дальнодействующего и короткодействующего потенциалов использовались, соответственно, двухцентровые аналоги сглаженных потенциалов Кулона (7) и Юкавы (8):

$$V_{c} = -\left(\frac{1}{\sqrt{2 + \left(x - \frac{R}{2}\right)^{2}}} + \frac{1}{\sqrt{2 + \left(x + \frac{R}{2}\right)^{2}}}\right),$$
(7)

$$V_Y = -\left(\frac{V_0}{\sqrt{a^2 + \left(x - \frac{R}{2}\right)^2}} + \frac{V_0}{\sqrt{a^2 + \left(x + \frac{R}{2}\right)^2}}\right)e^{-\frac{|x|}{b}}.$$
(8)

Величина b в потенциале (8) – параметр экранировки. Параметр сглаживания a^2 и эффективный заряд V_0 для потенциала Юкавы подбирались таким образом, чтобы энергия основного состояния совпадала со случаем кулоновского потенциала

 $(E_0 = 0,6492 \text{ ат. ед.})$ при R = 2 ат. ед. Расчеты проводились для потенциала Юкавы с уменьшенным (по сравнению с дальнодействующим потенциалом) параметром сглаживания ($a^2 = 1,6 \text{ ат. ед.}$) и увеличенным эффективным зарядом ядра ($V_0 = 1,065 \text{ ат. ед.}$).

Расчет

Мы рассматривали молекулярный ион H_2^+ под действием линейнополяризованного лазерного импульса с длиной волны $\lambda = 800$ нм и интенсивностью $I = 5 * 10^{14}$ Вт см⁻².

В первой задаче численно исследовался вклад интерференции длинных и коротких электронных траекторий в общую интерференционную картину. На рис. 1 показаны результаты расчетов без селекции траекторий (а) и с селекцией (б). Можно видеть, что при расчете без селекции взаимодействие двухцентровой интерференции (см. ниже) и интерференции длинных и коротких электронных траекторий приводит к сложной картине интерференции на графике и, таким образом, определить положение двухцентрового минимума практически невозможно. Напротив, при выборе индивидуального вклада коротких траекторий положение двухцентрового интерференционного минимума хорошо наблюдается во всем диапазоне исследуемых интенсивностей лазерного импульса и в широком интервале параметров молекулярного потенциала. Это подчеркивает важность выбора электронных квантовых путей для точного извлечения информации о молекулярной структуре из спектров высоких гармоник. На рис. 1 представлена зависимость спектров гармоник от параметра экранировки без селекции электронных траекторий (а) и с селекцией (б).



Во второй задаче исследовалась роль асимптотики молекулярного потенциала. Рассчитывались спектры гармоник, испускаемых двухатомной молекулярной системой при воздействии с интенсивным низкочастотным лазерным излучением, при этом основное внимание уделялось положению двухцентрового интерференционного провала в спектре испускаемых гармоник при различных межатомных расстояниях. Расчеты проводились с селекцией электронных траекторий для получения большей точности.

Согласно модели, основанной на приближении сильного поля, частота излучаемых фотонов определяется как $\Omega = E_k + I_p$, где E_k – кинетическая энергия электрона и I_p – потенциал ионизации. В спектрах высоких гармоник в газах молекул наблюдаются прова-

лы, обусловленные двухцентровой деструктивной интерференцией вкладов в поляризацию от разных ядер. Условие деструктивной интерференции: $R = (2n + 1)^{\lambda}/_2 (\lambda - длина волны де Бройля электрона, налетающего на родительский ион). Из положения наинизшего порядка интерференции (<math>n=0$) можно определить межьядерное расстояние согласно соотношению $\Omega = \frac{\pi^2}{2R^2} + I_p$.

В этой задаче проводилось сравнение результатов, получаемых для случаев дальнодействующего и короткодействующего потенциалов взаимодействия отрываемого электрона с ионным остовом. В качестве дальнодействующего и короткодействующего потенциалов, как отмечалось выше, использовались, соответственно, двухцентровые аналоги сглаженных потенциалов Кулона и Юкавы. Полученные результаты позволяют прояснить роль формы молекулярных потенциалов в исследуемом процессе. В частности, оказывается, что положение двухцентрового провала может сильно зависеть от формы молекулярного потенциала, что существенно влияет на точность определения межатомного расстояния в молекуле из обработки спектра высоких гармоник. На рис. 2 (а) – (в) представлена зависимость спектров гармоник от межъядерного расстояния (рис. 2 (а) – расчет с дальнодействующим потенциалом, рис. 2 (б) – с короткодействующим потенциалом при параметре сглаживания $a^2 = 1,6$ ат. ед., рис. 2 (в) – с короткодействующим потенциалом при эффективном заряде $V_0 = 1,065$ ат. ед.). Параметр экранировки в потенциале (8) выбран равным b=30 ат.ед.



На рисунках сплошные и штриховые линии соответствуют дисперсионным соотношениям $\Omega = \pi^2/_{2R^2} + I_p$ и $\Omega = \pi^2/_{2R^2}$ соответственно. Из расчетов видно, что положение провалов в спектрах зависит от вида молекулярного потенциала.

- [1] Corkum P.B. // Phys. Rev. Lett. 1993. Vol. 71, № 13. P. 1994.
- [2] Lein M., Hay N., Velotta R., Marangos J.P., Knight P. L. // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 88, № 18. P. 183903.
- [3] Silaev A.A, Ryabikin M.Yu, Vvedenskii N.V. // Phys. Rev. A. 2010. Vol. 82, № 3. P. 033416.

Секция «Общая физика»

Заседание секции проводилось 18 мая 2021 г. Председатель – М.И. Бакунов, секретарь – Е.З. Грибова. Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского.