

КОНФЕРЕНЦИИ И СИМПОЗИУМЫ

Современные проблемы физических наук

Научная сессия Отделения физических наук
Российской академии наук, 23 ноября 2011 г.

PACS number: 01.10.Fv

DOI: 10.3367/UFNr.0182.201207g.0773

23 ноября 2011 г. в конференц-зале Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (РАН) состоялась научная сессия Отделения физических наук РАН.

Объявленная на web-сайте ОФН РАН www.grad.ac.ru повестка заседания содержала следующие доклады:

1. **Ионин А.А.** (Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва). *Мощные инфракрасные и ультрафиолетовые лазерные системы и их применения.*

2. **Романовский М.Ю.** (Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва). *Ускорение запрещённых захватов орбитальных электронов ядрами под действием лазерного излучения.*

3. **Петрукович А.А.** (Институт космических исследований РАН, Москва). *Магнитосфера Земли как плазменная лаборатория.*

4. **Щур Л.Н.** (Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Черноголовка, Московская обл.). *Вычислительная физика и проверка теоретических предсказаний.*

Статьи, написанные на основе докладов 1, 2 и 4, публикуются ниже.

PACS numbers: 42.55.Lt, 42.60.Lh, 52.50.Jm
DOI: 10.3367/UFNr.0182.201207h.0773

Мощные системы инфракрасных и ультрафиолетовых лазеров и их применение

А.А. Ионин

1. Введение. Краткий исторический очерк исследований в лаборатории газовых лазеров ФИАН

Понятие "мощные лазеры" достаточно неопределённо, особенно для импульсных лазеров, характеризующихся пиковой мощностью. Для непрерывных и импульсно-периодических мощных лазеров довольно условной нижней границей может служить средняя мощность

~ 1 кВт, а для импульсных — пиковая мощность ~ 1 МВт. Максимальная средняя мощность реализована в лазерах мегаваттного класса [1], а пиковая — около 1 ПВт — в лазерных системах с фемтосекундной длительностью импульса [2]. В настоящее время создаются импульсные фемтосекундные лазерные системы с пиковой мощностью ~ 10 ПВт и обсуждается возможность создания экзаваттных импульсных лазерных систем [2]. В настоящей статье речь пойдёт в основном о лазерах инфракрасного (ИК) и ультрафиолетового (УФ) диапазонов спектра, разработанных, исследованных и используемых для изучения взаимодействия излучения с веществом в лаборатории газовых лазеров (ЛГЛ) Физического института им. П.Н. Лебедева РАН (ФИАН) с участием автора.

Лаборатория была основана Н.Г. Басовым (1922–2001) в начале 1980-х годов с целью исследования физических принципов создания мощных лазерных систем для промышленности и решения оборонных задач. Сотрудники лаборатории принимали участие в разработке CO_2 -лазера мегаваттного класса [1] и CO_2 - и СО-лазеров со средней мощностью ≈ 10 –30 кВт для промышленности. Основные направления исследований ЛГЛ: эксимерные лазеры, лазеры на атомных переходах, молекулярные лазеры и взаимодействие излучения с веществом.

В лаборатории были созданы [3] крупномасштабные лазерные установки, такие как КгF-лазер с электронно-пучковой накачкой (под руководством В.Д. Зворыкина): длина волны излучения $\lambda = 0,248$ мкм, активный объём ≈ 20 л, энергия излучения $Q \approx 100$ Дж, длительность импульса 100 нс; импульсные лазеры на атомных переходах с электронно-пучковой и электроионизационной накачкой (под руководством И.В. Холина): Ag/Xe-лазер ($\lambda = 1,73$ мкм, $Q = 80$ Дж), He/Ag-лазер ($\lambda = 1,27$ мкм, $Q = 4,5$ Дж), He/Kr-лазер ($\lambda = 2,52$ мкм, $Q = 4$ Дж), He/Ne-лазер ($\lambda = 0,58$ мкм, $Q = 1,5$ Дж); импульсные электроионизационные молекулярные лазеры (под руководством автора настоящей статьи): CO_2 -лазер ($\lambda = 10,6$ мкм, $Q = 500$ Дж), импульсный лазер на основных переходах молекулы CO ($\lambda \approx 5$ –6 мкм, $Q = 800$ Дж) и её обертоновых переходах ($\lambda \approx 3$ мкм, $Q = 50$ Дж), N_2O -лазер ($\lambda = 10,9$ мкм, $Q = 100$ Дж), квазинепрерывный сверхзвуковой (СЗ) СО-лазер мощностью 100 кВт (длительность работы ≈ 1 мс) [4]. Группой сотрудников лаборатории под руководством Б.И. Васильева предложена схема и разработана конструкция двухчастотного

А.А. Ионин. Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, РФ
E-mail: aion@sci.lebedev.ru

лидера дифференциального поглощения, в котором опорный пучок формируется из излучения CO_2 -лазера, а частота излучения рабочего пучка последовательно перестраивается по линиям спектра NH_3 -лазера [3].

Лаборатория газовых лазеров ФИАНа активно сотрудничала и продолжает сотрудничать с зарубежными организациями по развитию лазерных технологий. В 1992–1996 гг. совместно с коллегами из Великобритании и Франции сотрудники лаборатории участвовали в европейском проекте Eureka-113 "СО-Евролазер" [5], направленном на разработку мощных СО-лазеров для промышленности. В 1994 г. в Институте технической физики в Штутгарте (Германия) при участии ЛГЛ был запущен импульсно-периодический СО-лазер, действующий при комнатной температуре, со средней мощностью 1 кВт [6]. В 1995–1998 гг. лаборатория приняла участие в европейском проекте Eureka-1390 "Ультралаз" (Россия, Австрия, Германия и др.), целью которого являлась разработка принципов создания 100-киловаттного CO_2 -лазера для промышленности.

В 1995–1996 гг. совместно с коллегами из Управления прикладных технологий (Directorate of Applied Technology, Test and Simulation (DATTS)) (полигон Белые пески (White Sands), США) с применением привезённой ими аппаратуры на лазерных установках ЛГЛ были проведены исследования обращения волнового фронта излучения CO_2 - и СО-лазеров [7]. Эти же установки использовались в 1995–1997 гг. в совместных работах с компанией "Дюпон" (DuPont) (Вилмингтон, США) по лазерной модификации поверхности синтетических тканей посредством частотно-селективного воздействия излучения СО-лазеров с длиной волны ≈ 6 мкм на поверхность волокон нейлона и дакрона с целью устранения так называемого синтетического блеска [8] и в 1997–1999 гг. для совместных исследований с Горным университетом Колорадо (Colorado School of Mines) (г. Гольден, США) взаимодействия излучения мощных ИК-лазеров с горными породами, характерными для нефтеносных полей [9], в рамках проекта, направленного на анализ возможности создания лазерных буровых установок.

О более поздних проектах разработки совместно с Университетом Нью-Мексико и Научно-исследовательской лабораторией военно-воздушных сил США (Air Force Research Laboratory (AFRL)) (г. Альбукерке, США) сверхзвукового СО-лазера, действующего на основных и обертоновых переходах молекулы СО, об исследованиях, поддержанных партнёрскими (вместе с Европейской организацией аэрокосмических исследований (European Office of Aerospace Research & Development, EOARD)) проектами Международного научно-технического центра (МНТЦ), электроразрядных генераторов энергетического донора — синглетного кислорода для кислород-йодного лазера и электрического разряда, управляемого комбинированными фемтосекундными и наносекундными импульсами УФ-излучения гибридной КгF-лазерной системы, речь пойдёт в разделах 2–5.

2. Инфракрасные лазеры на оксиде углерода и их применение

Лазеры на оксиде углерода СО (которые следует отличать от лазеров на диоксиде углерода CO_2) представляют интерес как с точки зрения создания мощных источников

когерентного излучения в средней ИК-области спектра, так и с точки зрения молекулярной кинетики, поскольку создание инверсной населённости между колебательно-вращательными уровнями молекулы СО обусловлено колебательно-колебательным обменом между молекулами СО, являющимися ярко выраженными ангармоническими осцилляторами. СО-лазер может действовать на $\sim 10^3$ колебательно-вращательных спектральных линиях в основных колебательных полосах с изменением колебательного квантового числа на единицу в диапазоне длин волн 4,6–8,2 мкм и на первых обертонах в диапазоне длин волн 2,5–4,2 мкм. С историей создания, развития и физическими принципами работы СО-лазеров (в частности, с тем, зачем надо охлаждать активную среду этого лазера) можно ознакомиться в обзоре [10].

Спектральная область генерации обертонового СО-лазера перекрывает "окно прозрачности" атмосферы в области длин волн $\approx 3,3$ –4,0 мкм, поэтому его можно использовать для транспорта мощного излучения в атмосфере. Поскольку огромное число спектральных линий СО-лазера лежит в спектральных областях, в которых находятся линии поглощения многих взрывчатых и токсичных веществ, СО-лазеры, не обязательно мощные, можно использовать для многокомпонентного газового анализа этих и других веществ.

В последнее десятилетие усилия ЛГЛ по исследованию СО-лазеров были сосредоточены на следующих направлениях: создание и исследование совместно с коллегами из США сверхзвукового СО-лазера, в том числе обертонового; разработка перестраиваемого по частоте в 5-микрометровом диапазоне длин волн компактного СО-лазера, генерирующего на обертоновых переходах ($\lambda = 2,5$ –4,0 мкм), с накачкой высокочастотным (ВЧ) щелевым разрядом; разработка СО-лазерной системы, генерирующей наносекундные импульсы; оценка возможности применения СО-лазеров для лазерного разделения изотопов урана.

2.1. Сверхзвуковой обертоновый СО-лазер

Создание и исследование сверхзвукового обертонового СО-лазера, охлаждение активной среды которого происходило при её адиабатическом расширении в СЗ-сопле, проводилось в рамках партнёрских проектов МНТЦ 1865 и 2415 на основе рекомендаций, разработанных в ЛГЛ, где теоретически и экспериментально моделировались условия сверхзвукового СО-лазера AFRL. В процессе этих исследований в ЛГЛ впервые было показано, что обертоновый СО-лазер может действовать на высококорасположенных колебательных полосах, вплоть до перехода $38 \rightarrow 36$, на более чем 400 спектральных линиях в селективном режиме и с к.п.д. до 16 % в многочастотном режиме (см., например, [11]). Установка в AFRL первоначально была создана на базе сверхзвукового СО-лазера с накачкой ВЧ-разрядом и мощностью генерации 330 Вт (при однопроходном резонаторе), разработанного в Институте технической физики в Штутгарте. В результате совместных работ с американскими и немецкими коллегами [12] конструкция установки была значительно изменена при сохранении её активного объёма (активная длина 10 см, число Маха в сверхзвуковом потоке 2,7, температура газа в потоке ≈ 100 К, давление газа в СЗ-потоке 2–9 торр), а мощность генерации на основных (≈ 5 -микрометровых) переходах достигла 2,1 кВт с к.п.д. 21 % (при однопроходном резонаторе).

На обертоновых переходах с практически "глухими" зеркалами была получена мощность генерации 50 Вт. Оценки показали, что применение оптимального резонатора позволит достичь мощности излучения обертонового СО-лазера порядка 500 Вт.

2.2. Компактный щелевой СО-лазер с накачкой высокочастотным разрядом

В последнее время достигнут значительный прогресс в разработке капиллярных и щелевых газовых лазеров (в том числе проточных и отпаянных CO_2 - и СО-лазеров) с диффузионным охлаждением, возбуждаемых емкостным поперечным ВЧ-разрядом. В этих лазерах отвод тепла из газовой смеси производится через охлаждаемые электроды, к которым прикладывается возбуждающее ВЧ-напряжение. ВЧ-разряд обладает рядом преимуществ по сравнению с наиболее простым и часто используемым разрядом постоянного тока. Известно, что СО-лазер демонстрирует наилучшие выходные характеристики при криогенных температурах активной газовой смеси. Это особенно актуально для обертонового СО-лазера [13]. Важной практической задачей является создание компактного щелевого СО-лазера с ВЧ-возбуждением и диффузионным охлаждением его активной среды до низких температур. Такой лазер, сочетающий в себе относительную простоту и компактность, присущие щелевым ВЧ-конструкциям, а также высокую эффективность и широкий спектр генерации, характерные для электроразрядных СО-лазеров, может стать уникальным спектроскопическим инструментом для детектирования различных взрывчатых, ядовитых и других опасных веществ и материалов.

В ЛГЛ были созданы компактные щелевые СО-лазеры с накачкой емкостным ВЧ-разрядом и криогенным охлаждением электродов с различными длинами активной среды (250 и 400 мм) [14]. Определены оптимальные условия (состав и давление газовой смеси, параметры ВЧ-разряда) для реализации наилучших выходных лазерных характеристик. Максимальная полученная в экспериментах средняя мощность лазера на основных переходах молекулы СО (спектральный диапазон 5,1–5,4 мкм) составила ≈ 12 Вт, а его к.п.д. достигал $\approx 14\%$. Реализован также частотно-селективный режим работы этого лазера. Одночастотная генерация была получена на ≈ 100 лазерных линиях в спектральном диапазоне 4,9–6,5 мкм со средней выходной мощностью от нескольких милливатт до нескольких десятков милливатт. Впервые в щелевом криогенном СО-лазере с ВЧ-накачкой была реализована генерация излучения на обертоновых переходах молекулы СО в спектральном диапазоне 2,5–4,0 мкм [14].

В результате оптимизации экспериментальных параметров в режиме свободной многочастотной генерации автором настоящей статьи совместно с А.Ю. Козловым, Л.В. Селезнёвым и Д.В. Синицыным (ФИАН) недавно была достигнута средняя мощность $\approx 1,8$ Вт в спектральном диапазоне от 2,95 до 3,45 мкм с эффективностью до 1,5 %. Все результаты получены без принудительной замены газовой смеси. При фиксированных экспериментальных условиях стабильная генерация (с флуктуациями выходных характеристик не более 10 %) была реализована на временном интервале более одного часа, что позволяет говорить о том, что впервые осуществлён отпаянный режим работы криогенного СО-лазера. Диа-

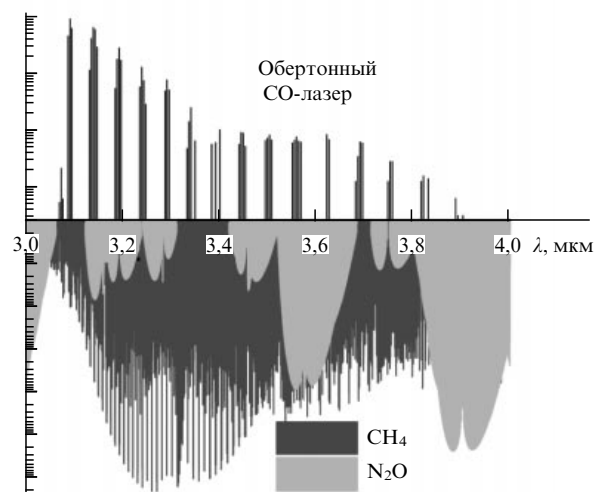


Рис. 1. Типичный спектр излучения обертонового СО-лазера и спектры поглощения метана (CH_4) и оксида диазота (N_2O).

пазон перестройки частоты излучения СО-лазера перекрывает спектральные диапазоны, в которых расположены линии и полосы поглощения как обычных веществ (H_2O , CO_2 , O_3 , N_2O , NO_2 , NO , SO_2 , NH_3 и др.) и органических соединений (таких как метан, ацетон, бензол, метанол, этанол и др.), так и сильных загрязнителей.

Благодаря большому числу спектральных линий СО-лазер является привлекательным источником излучения для решения задач спектрального анализа как многокомпонентных газовых смесей, так и отдельных веществ, присутствующих в составе атмосферы. При использовании обертонового СО-лазера проведены модельные эксперименты по измерению концентраций газов в двухкомпонентной смеси ($\text{N}_2\text{O} + \text{CH}_4$) в области перекрытия их спектров поглощения (рис. 1). Показано, что точность восстановления концентрации газов в многокомпонентной смеси возрастает при увеличении числа лазерных линий.

2.3. СО-лазерная система "задающий генератор – лазерный усилитель", генерирующая наносекундные импульсы

Заселение лазерных уровней молекулы СО происходит в результате сравнительно медленного обмена колебательной энергией между молекулами, поэтому до недавнего времени считалось, что СО-лазер, действующий на колебательно-вращательных переходах в режиме синхронизации мод, малоэффективен. Но мощные наносекундные импульсы излучения на длинах волн около 5 мкм потребовались для решения сложной научно-технической задачи — стохастического охлаждения релятивистских ионов в коллайдерах. В работе [15] было продемонстрировано, что при активной синхронизации мод криогенная СО-лазерная установка на основе электроионизационного (ЭИ) разряда может генерировать пуг импульсов излучения длительностью от ≈ 5 до 15 нс при частоте их следования 10 МГц, равной частоте следования ионных сгустков в коллайдере RHIC (Relativistic Heavy Ion Collider) Брукхейвенской национальной лаборатории (США). При этом пиковая мощность излучения достигала 120 кВт при генерации многочастотного излучения (≈ 20 спектральных линий) и

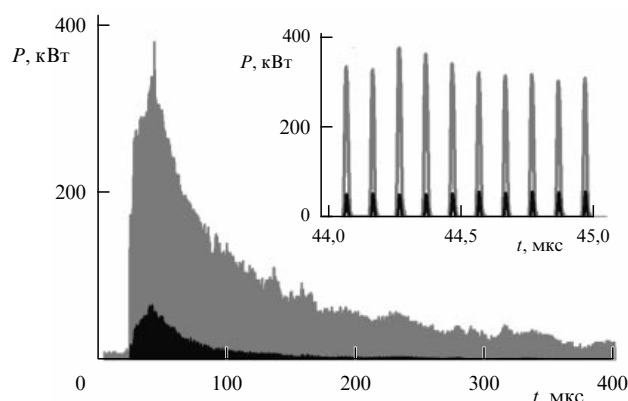


Рис. 2. Цуг наносекундных импульсов на входе (показан тёмным цветом) и выходе (более светлый) СО-лазерного усилителя.

70 кВт в частотно-селективном режиме при генерации излучения на одной линии, соответствующей колебательно-вращательному переходу $9 \rightarrow 8P(11)$. Для повышения пиковой мощности СО-лазерного излучения была разработана система "задающий генератор – лазерный усилитель", на выходе из которой пиковая мощность возрастала до 380 кВт в многочастотном режиме (рис. 2) и до 130 кВт в частотно-селективном режиме [16]. Исследование усиления коротких импульсов излучения показало, что благодаря высокой скорости вращательной релаксации интенсивность насыщения усиления излучения на одной спектральной линии в СО-лазерном усилителе составляла $\approx 14 \text{ кВт см}^{-2}$, что на несколько порядков превышало интенсивность насыщения усиления непрерывного многочастотного СО-лазерного излучения.

2.4. Разделение изотопов урана с помощью СО-лазеров

До недавних пор СО-лазер рассматривался лишь как перспективный лазер для возбуждения фотохимических реакций применительно к лазерному разделению изотопов урана, так как несколько линий излучения СО-лазера с длиной волны вблизи $\lambda = 5,3 \text{ мкм}$, которые находятся в полосе поглощения $3\nu_3$ молекул гексафторида урана (ГФУ) [17], способны изотопо-селективно инициировать химические реакции [18]. Однако ситуация кардинально изменилась, когда было показано, что в режиме синхронизации мод короткие импульсы излучения СО-лазера обладают высокой пиковой мощностью [15, 16], поскольку такое излучение можно преобразовать в нелинейных оптических кристаллах в другие спектральные диапазоны. Например, внутренний коэффициент преобразования в кристалле ZnGeP_2 во вторую гармонику излучения СО-лазера достигал 25 % [19, 20], что подтверждает возможность эффективного преобразования частоты излучения сложением и вычитанием частот излучения СО-лазера. Тем более что в частотно-селективном режиме СО-лазер способен действовать на ≈ 1000 спектральных линий в широком диапазоне длин волн, от 2,5 до 8,3 мкм. Благодаря столь уникальным свойствам излучения СО-лазера можно преобразовать в те полосы поглощения ГФУ, в которых имеется изотопический сдвиг, необходимый для лазерного разделения изотопов урана, включая полосу ν_3 с большим сечением поглощения вблизи $\lambda = 16 \text{ мкм}$ [17]. Таким

образом, СО-лазер с преобразованием излучения в нелинейных оптических кристаллах может стать эффективным источником излучения для разделения изотопов урана.

3. Проблема создания инфракрасного электроразрядного кислород-йодного лазера

В химических кислород-йодных лазерах (ХКИЛ) в качестве энергетического донора для излучающего атомарного йода выступает молекула синглетного кислорода $\text{O}_2(a^1\Delta_g)$. Однако применение ХКИЛ ограничено из-за необходимости использовать токсичные вещества для получения синглетного кислорода (СК) в химическом генераторе. Одним из альтернативных методов генерации СК является его получение в электрическом разряде. Впервые генерация в электроразрядном кислород-йодном лазере была получена при возбуждении кислородсодержащей газовой смеси и наработке СК в ВЧ-разряде с последующим смешиванием СК лазерной смеси с йодом и её охлаждением в сверхзвуковом потоке [21]. Получение СК осуществляется в электроразрядном генераторе синглетного кислорода. Далее СК транспортируется в зону смешивания с атомами йода, который поставляют йодсодержащие молекулы. Генерация излучения на длине волны 1,316 мкм происходит непосредственно после смешивания СК с атомарным йодом в лазерном резонаторе. Охлаждение газовой смеси до криогенных температур позволяет достичь положительного коэффициента усиления при существенно меньшем значении выхода СК $Y = [\text{O}_2(a^1\Delta_g)] / ([\text{O}_2(X^3\Sigma_g^-)] + [\text{O}_2(a^1\Delta_g)])$, $Y_{th} \approx 1\%$ при $T = 100 \text{ К}$. Для сравнения, $Y_{th} \approx 15\%$ при $T = 300 \text{ К}$. (Подробный обзор, посвящённый физике и технике получения СК в электрическом разряде, в том числе в высокочастотном, см. в [22].) В настоящее время максимальная мощность электроразрядного кислород-йодного лазера составляет $\approx 500 \text{ Вт}$ [23]. Агентство передовых оборонных исследовательских проектов Министерства обороны США (Defense Advanced Research Projects Agency, DARPA) поддерживает проект по созданию 100-киловаттного кислород-йодного лазера с к.п.д. генерации $\approx 10\%$ [24].

Экспериментальные исследования энергетических характеристик электрического генератора СК на основе импульсного ЭИ-разряда в кислородсодержащих газовых смесях показали, что добавление СО или H_2 в смесь газов O_2 и Ar позволяет существенно повысить устойчивость ЭИ-разряда и достичь высокого удельного энерговыклада (максимальное значение в пересчёте на молекулярные компоненты смеси достигало $\approx 6,5 \text{ кДж л}^{-1} \text{ атм}^{-1}$ ($\approx 150 \text{ кДж моль}^{-1}$) в газовой смеси $\text{O}_2 : \text{Ar} : \text{CO} (1 : 1 : 0,1)$ при полном давлении газа 30 торр и объёме возбуждения $\approx 18 \text{ л}$ [25]. Теоретически было показано, что при использовании смесей с молекулярными добавками СО, H_2 или D_2 в ЭИ-разряде можно ожидать выхода синглетного кислорода $\text{O}_2(a^1\Delta_g)$ около 25 %, превышающего значение, необходимое для работы кислород-йодного лазера при комнатной температуре [25].

Для исследования процессов образования и релаксации СК в дозвуковом потоке газа, возбуждаемом поперечным щелевым ВЧ-разрядом, в рамках партнёрского проекта МНТЦ 3835 была создана не имеющая аналогов экспериментальная установка (рис. 3). Результаты проведённых экспериментов и теоретического моделирова-

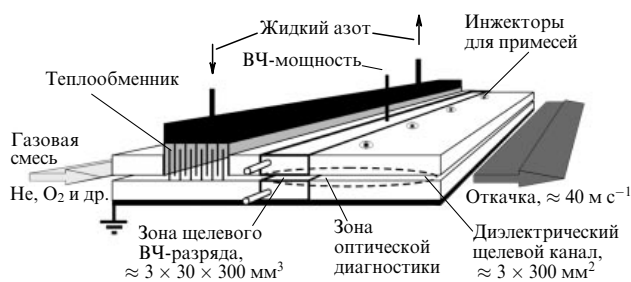


Рис. 3. Схема электроразрядного генератора синглетного кислорода на основе газопроводной щелевой установки с поперечным ВЧ-возбуждением и возможностью криогенного охлаждения электродов.

ния [26] дают основание рассчитывать на получение генерации в кислород-йодном лазере с электроразрядным генератором СК на основе поперечного ВЧ-разряда при охлаждении возбужденного газа до температур ≈ 220 К, что весьма реально даже без использования сверхзвукового расширения газового потока.

4. Гибридная система ультрафиолетовых Ti:Sa – KrF-лазеров

Для исследования процессов взаимодействия излучения фемтосекундной длительности с веществом в ЛГЛ была разработана гибридная (т.е. состоящая из газовых и твердотельных лазеров) лазерная система [27] на основе титан-сапфирового (Ti:Sa) лазерного стартового комплекса и ранее созданных электронно-пучковых KrF-лазерных усилителей (см. введение, а также [3]). Отличительной особенностью гибридных систем является прямое усиление генерируемых твердотельной лазерной системой фемтосекундных импульсов, прошедших через призмный стретчер с отрицательной дисперсией, в газообразных активных средах без использования сложных и дорогостоящих оптических компрессоров на основе дифракционных решеток с последующей компрессией плоскопараллельными пластинами с положительной дисперсией. Гибридная лазерная система состоит из твердотельного стартового комплекса, генерирующего фемтосекундные импульсы излучения, KrF-лазерного предусилителя и конечного усилителя.

Твердотельный стартовый комплекс, излучающий ультрафиолетовые фемтосекундные импульсы, был разработан и произведен российской компанией "Авеста-проект" совместно с ФИАНом. Этот комплекс, состоящий из Ti:Sa-лазера (длина волны излучения 744 нм, длительность импульса 30 фс), оптического стретчера, регенеративного усилителя, многопроходных усилителей, оптического компрессора и оптического преобразователя излучения в третью гармонику, излучает импульсы длительностью 60–100 фс на длине волны 248 нм с энергией излучения 0,5 мДж и частотой следования 10 Гц. Диаметр лазерного луча 8 мм. Максимальная энергия излучения на основной длине волны составляет 8 мДж. Этот комплекс может также генерировать фемтосекундные импульсы на второй гармонике с длиной волны 372 нм и энергией 2 мДж. KrF-лазерный предусилитель [27], накачиваемый электронным пучком, имеет активный объем $10 \times 10 \times 100$ см³. Конечный KrF-лазерный усилитель [27] с активным объемом

$16 \times 18 \times 100$ см³ накачивается двумя электронными пучками, распространяющимися навстречу друг другу. Эти пучки генерируются двумя электронными пушками и направляются в лазерную камеру через титановую фольгу.

На данной гибридной лазерной установке было исследовано усиление ультрафиолетовых ультракоротких импульсов (УКИ) в двух каскадах широкоапертурных KrF-усилителей с электронно-пучковой накачкой [28]. Полная энергия на выходе предусилителя достигала 23 мДж, при этом площадь пучка (38,5 см²) составляла около 60 % от апертуры предусилителя. Энергия УКИ на выходе конечного усилителя в режиме насыщения равнялась 0,62 Дж в пучке площадью 92,5 см², что составляло 43 % от апертуры. На вход предусилителя подавался импульс излучения длительностью ≈ 100 фс, т.е. после выхода из стартового комплекса стретчер не использовался. Длительность на выходе конечного усилителя не превышала 1 пс (измерение с помощью электронно-оптической камеры) и составляла не менее ≈ 330 фс (измерение длины когерентности). Таким образом, пиковая мощность достигала ≈ 1 ТВт. Угловая расходимость излучения равнялась 20 мкрад. Оценки показывают, что при факторе заполнения апертуры 1,0 энергия усиленного импульса достигнет $\sim 1,5$ Дж. Применение стретчера для импульса на выходе стартового комплекса длительностью ≈ 60 фс позволит получить на выходе системы импульс излучения с пиковой мощностью ~ 20 –30 ТВт.

5. Взаимодействие фемтосекундных инфракрасных и ультрафиолетовых импульсов излучения с веществом

5.1. Филаментация фемтосекундных импульсов излучения и ионизация газов под их воздействием

Задача усиления ультракоротких УФ-лазерных импульсов в электронно-пучковых KrF-усилителях оказалась неразрывно связана с процессами нелинейного распространения мощных УФ-лазерных импульсов в атмосфере, газах и проходных (прозрачных) элементах оптики. Эксперименты продемонстрировали существование нелинейного поглощения относительно низкоинтенсивного УФ-излучения, а исследования многофотонной ионизации чистых газов (аргон и азот) [29] показали, что увеличение интенсивности УФ-лазерного излучения (более 10^{12} Вт см⁻²) приводит к увеличению фотонности процесса от 3 до 4 квантов. Такое изменение, по видимому, связано с изменением процесса ионизации. Так, при малых интенсивностях (от $\approx 3 \times 10^{10}$ до 2×10^{11} Вт см⁻²) тремя квантами возбуждаются высоколежащие электронные состояния, после чего происходит одноквантовая ионизация. При увеличении интенсивности высоколежащие уровни смещаются вследствие динамического эффекта Штарка и "выходят" из трёхквантового резонанса. В результате наблюдается нерезонансная четырёхквантовая ионизация.

В ЛГЛ с помощью метода оптической микроскопии с временным разрешением было продемонстрировано существование в воздухе единичного или множественных коротких (до 100 мкм) и узких (до 5 мкм в диаметре) минифиламентов сильно сфокусированных ультракоротких лазерных импульсов в ИК-диапазоне спектра

[30]. Длина возникающих светящихся плазменных каналов многократно превосходила соответствующую длину перетяжки фокуса. Различными методами проведены оценки плотности плазмы, которая оказалась довольно высокой (вплоть до 10^{18} см $^{-3}$). Ранее возможность существования таких минифиламентов подвергалась сомнению ведущими специалистами в данной области, поскольку предшествующие экспериментальные измерения при мягких фокусировках УКИ давали существенно большие длины и диаметры газовых (воздушных) филаментов (до нескольких десятков метров и сотен микрометров соответственно). Теоретические численные расчёты для таких условий были проведены в Институте оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН [31]. Результаты численного моделирования подтвердили существование минифиламентов УКИ, а также дали систематическое описание фундаментальных механизмов формирования минифиламентов при жёсткой фокусировке УКИ и их основных размерных и энергетических параметров (максимальная интенсивность и плотность плазмы в филаменте).

В лаборатории был выполнен ряд работ по исследованию возможности применения минифиламентов. Так, были проведены эксперименты по генерации третьей гармоники в воздушных минифиламентах. В частности, было показано, что максимальная эффективность преобразования сильно сфокусированного излучения инфракрасных УКИ в излучение ультрафиолетовых УКИ (третья гармоника) может достигать 0,16 % [32]. Очень жёсткая фокусировка (численные апертуры фокусирующей оптики — до 0,65) лазерных импульсов применялась для разработки инновационной технологии микромасштабной объёмной маркировки природных алмазов (путём записи графитовых микроканалов; работа проводилась совместно с Производственным объединением "Кристалл" (г. Смоленск)) [33] и импортозамещающей медицинской технологии объёмной микроперфорации тканей глаза для микрохирургических задач коррекции зрения (роговица) и практически неинвазивного удаления недоброкачественных опухолей на склере (работа проводилась совместно с Центральной клинической больницей РАН) [34]. Следует отметить, что разработке практических технологий микромаркировки и микрохирургии глаза предшествовали фундаментальные исследования в области выяснения физических механизмов создания микроповреждений материалов, особенностей и параметров микрофиламентации в прозрачных средах.

5.2. Нанопотоника поверхности наноструктур и объёмных фотонных кристаллов

Несмотря на то что исследования по лазерной генерации одномерных периодических поверхностных наноструктур (ППНС) под действием ультракоротких (фемтосекундных) лазерных импульсов продолжают уже более десятилетия, механизмы генерации ППНС, в частности эффекты динамического изменения оптических свойств фотовозбуждённой поверхности материалов, распределения энергии электромагнитного (ЭМ) поля в результате интерференции УКИ–ПЭВ (где ПЭВ — поверхностная ЭМ-волна, возбуждаемая УКИ), механизмы массопереноса (удаления — абляции) вещества, оптики фотовозбуждённой наноструктурированной поверхности, появления субволновых ($\lambda \ll \lambda$, где λ и λ — длины

волн падающего излучения и возникающей периодической структуры соответственно) ППНС, до сих пор изучены недостаточно. Поэтому нами были исследованы следующие основные стадии генерации ППНС под действием УКИ [35–43]:

1) фотовозбуждение поверхности и интерференция УКИ–ПЭВ под действием инфракрасных УКИ и вперые — ультрафиолетовых УКИ [35–37, 42];

2) возникновение первичного, как правило, негармонического, околотовнового ($\lambda \approx \lambda$) периодического нанорельефа [35, 37];

3) запись ППНС (включая субволновые нанорешётки) в результате дифракции УКИ на первичном негармоническом нанорельефе [35, 37, 38, 40–43];

4) образование ППНС в ходе взаимодействия последующих множественных УКИ с развитым нанорельефом, вплоть до его деградации и формирования микро-рельефа [39–42].

Предложен простой и информативный метод изучения динамических оптических постоянных вещества в масштабе УКИ посредством измерения его собственного отражения (самоотражения) [35–37]. Впервые наблюдались высшие гармоники нанорельефа — до 7-й гармоники [35, 37], и предложено альтернативное объяснение появления таких субволновых ППНС в результате не маловероятного эффекта генерации высших оптических поверхностных гармоник, а дифракции УКИ на первичном негармоническом нанорельефе (суперпозиции гармоник нанорельефа), возникающем, как правило, в слабонадпороговом режиме наноструктурирования, с возбуждением совокупности ПЭВ с соответствующим спектром волновых чисел [35, 37].

Кроме того, в ходе исследований генерации ППНС под действием УКИ со слабонадпороговыми плотностями энергии впервые были обнаружены не регулярные последовательности бороздок нанорельефа, а двумерные массивы нанопичков (рис. 4), причём последние периодически возникают на линиях максимумов интерференции УКИ–ПЭВ в результате кавитационной неустойчивости поверхностного расплава [43] (ранее в рамках расчётов с помощью метода молекулярной динамики

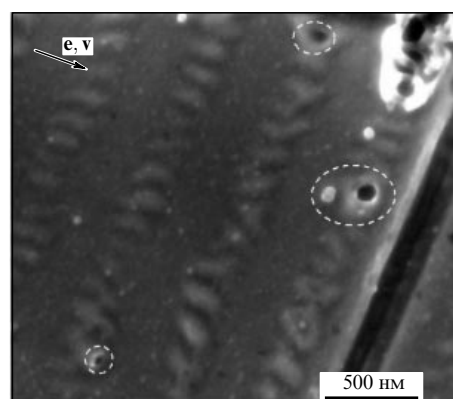


Рис. 4. Наноструктуры, образованные на поверхности алюминия при плотности энергии $F = 0,5$ Дж см $^{-2}$ и $N = 500$. Изображение получено с помощью сканирующей электронной микроскопии при увеличении 120000 раз. Стрелка показывает направление вектора поляризации лазерного поля e и вектора скорости движения мишени v . Штриховыми контурами выделены нанопички с кратерами вместо вершины и следами выноса материала.

была предсказана возможность формирования неперидического нанорельефа). Микроскопический механизм кавитационной динамики, предшествующей формированию нанопиков в результате частичного "замороженного" откола части поверхностной плёнки расплава, а также другие микроскопические механизмы откольной и фрагментационной абляции твёрдых материалов под действием УКИ впервые были изучены нами с помощью оптической микроскопии с временным разрешением [44].

Результаты данного исследования впервые показали возможность мониторинга движения фронта плавления в материале посредством наблюдения акустических ревербераций в поверхностной плёнке расплава с акустическим импедансом, отличным от импеданса твёрдого материала, а также движения области кавитации от поверхности в объём расплава в результате охлаждения поверхности при её адиабатическом расширении с последующим отколом-выталкиванием с поверхности мишени охлаждённого поверхностного слоя на субнаносекундных временах, по-видимому, в основном благодаря не циркулирующим в расплаве волнам напряжений (разрежения), а давлению пара в подповерхностной области кавитации (нанопене). При более высоких плотностях энергии УКИ отмечено необратимое фрагментационное удаление более высокотемпературного поверхностного слоя расплава вследствие его кавитации.

Фрагментационный механизм поверхностной абляции твёрдых материалов под действием УКИ, а также более высокоэнергетичный механизм их абляции через прямую ионизацию были также изучены с использованием метода бесконтактной широкополосной ультразвуковой диагностики, адаптированного для регистрации сверхмощных ударных волн (УВ), генерируемых при абляции под воздействием УКИ. Известно, что при пробеге сверхмощных УВ в материалах в результате ударно-волнового нагружения в последних происходят процессы пластической деформации (упругопластический переход) и полиморфных превращений, постепенно значительно трансформирующие профиль распространяющейся УВ даже в довольно тонких мишенях (с субмикрометровой и микрометровой толщиной), что оказывается особенно существенным при генерации сверхмощных УВ в процессе абляции мишеней под действием высокоинтенсивных УКИ с пиковыми интенсивностями $0,1 - 1 \text{ ПВт см}^{-2}$. Поэтому нами был предложен новый подход к исследованию сверхмощных УВ, генерируемых при абляции материалов высокоинтенсивными УКИ, — наблюдение за эволюцией УВ в граничащей с ней среде с высокой ударно-волновой и оптической прочностью, например в атмосфере воздуха [45].

Нами была реализована экспериментальная схема регистрации сверхмощных УВ с помощью метода бесконтактной широкополосной ультразвуковой диагностики посредством наблюдения распространения УВ в воздухе от аблируемой поверхности до широкополосного пьезоэлектрического приёмника [45–47]. Данная экспериментальная схема свободна от размерного эффекта толщины мишени, и, кроме того, она позволяет исследовать *in situ* с микрометровым пространственным разрешением совершенно разные материалы с различными рельефами поверхности. Были проведены настольные исследования сверхмощных ударных волн суб- и мультимегабарного уровня, возбуждаемых на поверхности алюминия при её абляции в атмосфере воздуха под

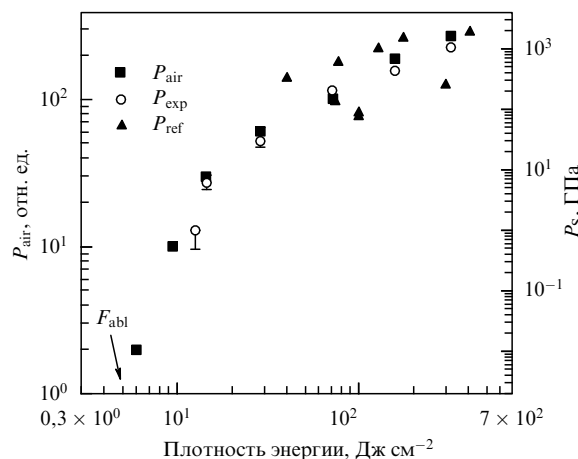


Рис. 5. Экспериментальные зависимости амплитуды волны давления P_{air} (левая ось, темные квадраты) и начального давления в лазерном факеле P_s (правая ось) от плотности энергии F : светлые кружки — полученные нами данные P_{exp} , темные треугольники — литературные значения P_{ref} . Стрелкой указан порог абляции материала F_{abl} .

воздействием высокоинтенсивных ($\leq 1 \text{ ПВт см}^{-2}$) линейно поляризованных УКИ [45]. Оценки начального давления и скорости ударной волны (абляционного факела) хорошо согласуются с литературными данными, полученными с использованием различных методов для УВ, распространяющихся *внутри* аблируемой мишени (рис. 5).

Наконец, в последние годы нами проводились исследования по генерации зольей химически "чистых" наночастиц посредством абляции твёрдых материалов: железа, золота, никеля, кремния, сверхпроводящей керамики YbCo — под действием УКИ в среде различных жидкостей. Полученные золи наночастиц использовались, в частности, для создания нанокмпозитов на основе диэлектрической матрицы трёхмерного фотонного кристалла — искусственного опала — с помощью заполнения её воздушных нанопустот квантовыми точками-наночастицами и последующего высушивания растворителя. Оптическая спектроскопия стоп-зоны (запрещённой зоны) опала демонстрирует благодаря высокой химической чистоте наночастиц правильные знаки и значительные предсказуемые амплитуды "синего" (для металлических наночастиц) и "красного" (для диэлектрических наночастиц) смещения зонного спектра нанокмполита [48].

5.3. Иницирование электрических разрядов комбинированными фемто- и наносекундными ультрафиолетовыми лазерными импульсами

Плазменные каналы, создаваемые лазерным излучением в атмосферном воздухе или некоторых других газах, представляют большой интерес для многих фундаментальных проблем и технических приложений. Среди них — иницирование молнии и активная молниезащита, направленная передача сверхвысокочастотного излучения для уменьшения его естественной расходимости, лазерное ускорение электронов. В противоположность более ранним экспериментам с CO_2 -лазерными импульсами субмикросекундной длительности [49], в которых поглощение в плотной плазме, образующейся в процессе лавинной ионизации, ограничивало длину и сплошность канала, новые подходы на основе использо-

вания длинных УФ-импульсов [50] или ультракоротких импульсов фемтосекундной длительности [51] позволяют создавать протяжённые слабоионизованные треки в газе благодаря процессам многофотонной ионизации и/или филаментации лазерного пучка. Так как первичные электроны быстро рекомбинируют с положительными ионами и за времена $\sim 10-50$ нс прилипают к молекулам кислорода, целесообразно использование дополнительного видимого или ультрафиолетового излучения, для того чтобы поддерживать электронную плотность в течение довольно длительного времени. Следовательно, комбинация пуга ультракоротких высокоинтенсивных УФ-лазерных импульсов с длинными УФ-импульсами представляется достаточно привлекательной для создания и дальнейшего поддержания плазменного канала.

Для многокаскадной гибридной Ti:Sa–Krf-лазерной установки в ЛГЛ автором совместно с В.Д. Зворыкиным, А.О. Левченко, С.И. Кудряшовым, Л.В. Селезнёвым, Д.В. Силиным и Н.Н. Устиновским в рамках партнёрского проекта МНТЦ 4073 была разработана новая оптическая схема, которая позволяет получать пуги УКИ с высокой пиковой мощностью, 0,2–0,3 ТВт, в комбинации со 100-наносекундными высокоэнергетичными импульсами [52]. В неустойчивый конфокальный резонатор основного широкоапертурного Krf-лазерного усилителя через полупрозрачный мениск инжектировались одиночные УКИ или пуги УКИ с интервалом следования около 5 нс, которые усиливались в процессе многократного прохождения резонатора и перекрывались с импульсом свободной генерации (рис. 6). Инжектируемые УКИ с длиной волны излучения 248,4 нм, энергией 0,5 мДж и длительностью 60 фс генерировались титан-сапфировым стартовым комплексом, и их энергия увеличивалась до ≈ 20 мДж в Krf-лазерном предусилителе. Инжектируемые УКИ усиливались по мере многократного обхода резонатора на фоне свободной генерации (их амплитуда на рис. 6 в 1000 раз меньше, чем в действительности, из-за ограниченного временного разрешения вакуумного фотодиода (≈ 1 нс), интегрирующего сигналы УКИ с длительностью ≈ 1 пс). Энергия комбинированных импульсов излучения составляла $\approx 10-30$ Дж. Была измерена проводимость плазменных каналов, образующихся в атмосферном воздухе при фокусировке комбинированных импульсов УФ-излучения сферическим зеркалом с фокусом $\approx 8,0$ м. Регистрировался сигнал фототока, обусловленный электронной компонентой фотоионизационной плазмы, которая создавалась в области переноса между двумя кольцевыми

электродами, расположенными на расстоянии 20 см друг от друга, при прикладываемом напряжении $U = 5-22$ кВ.

Характерные осциллограммы лазерного импульса, регистрировавшегося фотодиодом (верхний луч), и электронного фототока (нижний луч) показаны на рис. 6, из которого видно, что амплитуда тока, практически близкая к нулю на фронте импульса свободной генерации, резко возрастает в момент появления УКИ. Измерение электронного фототока в случае 100-наносекундного плавного импульса в режиме свободной генерации (при перекрытой инжекции УКИ) дало величины фототока на два порядка меньшие, чем в случае модулированного лазерного импульса. Объяснением этому служит нелинейный характер зависимости фотоионизации воздуха от интенсивности лазерного излучения. При перемещении геометрического фокуса зеркала в пределах $\approx 1,0$ м относительно межэлектродного промежутка сигналы фототока изменялись незначительно, что, очевидно, указывает на филаментацию лазерного пучка УКИ и позволяет оценить длину нелинейного распространения.

Предварительные эксперименты по инициированию пробоя разрядного промежутка с небольшой длиной показали [53], что импульс свободной генерации инициирует электрический пробой промежутка длиной 4,0 см при приложенном напряжении 50 кВ, причём импульс разряда развивается с задержкой ≈ 5 мкс относительно лазерного импульса и направление его распространения не определяется лазерным лучом. При том же приложенном напряжении комбинированный импульс с той же энергией обеспечивает распространение разряда вдоль луча на расстояние 7 см, причём с задержкой, как минимум, на два порядка меньшей. Формирование протяжённого проводящего канала со сравнительно высокой проводимостью, поддерживаемой комбинированными УФ-лазерными импульсами в течение нескольких десятков наносекунд, позволяет рассчитывать на эффективное управление высоковольтным пробоем длинных воздушных промежутков.

6. Заключение

В России разработаны мощные СО-лазеры, которые могут быть применены для решения многих практических задач, включая лазерное разделение изотопов урана. Для создания в России мощного электроразрядного кислород-йодного лазера необходима организация соответствующих научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ. В России создана гибридная фемтосекундная УФ-лазерная система тераваттного уровня мощности. Первые эксперименты демонстрируют перспективность этой системы для управления протяжёнными электрическими разрядами. В процессе создания данной системы начаты работы по применению фемтосекундного излучения в медицине, промышленности, а также изменению поверхностных и объёмных свойств твёрдых материалов.

Список литературы

1. Зарубин П В *Лазерное оружие — миф или реальность? Мощные лазеры в СССР и в мире* (Владимир: ООО "Транзит-Икс", 2009)
2. Коржиманов А В и др. *УФН* **181** 9 (2011) [Korzhimanolov A V et al. *Phys. Usp.* **54** 9 (2011)]
3. Ionin A et al. *AIP Conf. Proc.* **664** 697 (2003)

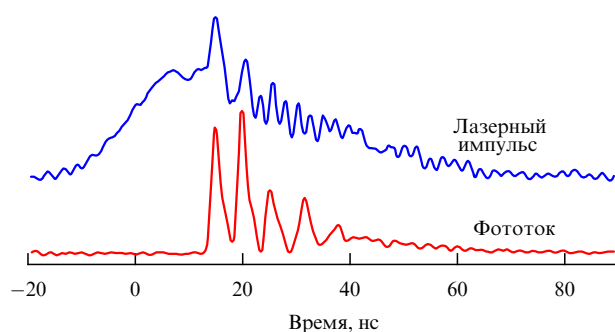


Рис. 6. Осциллограммы комбинированного лазерного импульса (верхняя кривая) и фототока (нижняя кривая) при инжекции в резонатор пуга УКИ [52].

4. Ionin A A et al. *Proc. SPIE* **1397** 453 (1991)
5. Spalding I J et al. *Proc. SPIE* **2713** 103 (1996)
6. Вальтер С и др. *Квантовая электроника* **22** 833 (1995) [Walter S et al. *Quantum Electron.* **25** 851 (1995)]
7. Биристо К и др. *Квантовая электроника* **24** 631 (1997) [Beairsto C et al. *Quantum Electron.* **27** 614 (1997)]
8. Ionin A A, Kleine K R F, Kobsa H *Proc. SPIE* **3092** 422 (1997)
9. Graves R M et al. *Proc. SPIE* **3885** 159 (2000)
10. Ionin A A, in *Gas Lasers* (Eds M Endo, R F Walter) (Boca Raton, FL: CRC Press/Taylor and Francis, 2007) p. 201
11. Basov N G et al. *IEEE J. Quantum Electron.* **36** 810 (2000)
12. Бон В и др. *Квантовая электроника* **35** 1126 (2005) [Bohn W et al. *Quantum Electron.* **35** 1126 (2005)]
13. Ionin A A et al. *Laser Phys.* **21** 500 (2011)
14. Ionin A A et al. *IEEE J. Quantum Electron.* **45** 215 (2009)
15. Ionin A A et al. *Opt. Commun.* **282** 294 (2009)
16. Антонюк Е А и др., в сб. *Лазеры. Измерения. Информация. 2011. Тезисы докладов 21-й международ. конф. 7–9 июня 2011 г. Т. 3* (Под ред. В Е Привалова) (СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2011) с. 8
17. Баранов В Ю и др., в сб. *Изотопы: свойства, получение, применение* Т. 1 (Под ред. В Ю Баранова) (М.: Физматлит, 2005) с. 474
18. Eerkens J W, in *Selected Papers on Laser Isotope Separation — Science and Technology* (Ed. J W Eerkens) (Bellingham, Wash.: SPIE Opt. Eng. Press, 1995) p. 531
19. Ionin A A et al. *Laser Phys. Lett.* **8** 723 (2011)
20. Андреев Ю М и др. *Опт. журн.* **78** (2) 26 (2011) [Andreev Y M et al. *J. Opt. Technol.* **78** 102 (2011)]
21. Carroll D L et al. *Appl. Phys. Lett.* **86** 111104 (2005)
22. Ionin A A et al. *J. Phys. D Appl. Phys.* **40** R25 (2007)
23. Carroll D L et al. *Proc. SPIE* **8238** 823803 (2012)
24. Hecht J *Laser Focus World* (9) 41 (2011)
25. Ionin A A et al. *J. Phys. D Appl. Phys.* **36** 982 (2003)
26. Ionin A A et al. *Proc. SPIE* **7581** 758103 (2010)
27. Zvorykin V D et al. *Laser Part. Beams* **25** 435 (2007)
28. Zvorykin V D et al. *J. Phys. Conf. Ser.* **244** 032014 (2010)
29. Ionin A A et al. *Opt. Commun.* **282** 45 (2009)
30. Голосов Е В и др. *Письма в ЖЭТФ* **90** 116 (2009) [Goloso V E et al. *JETP Lett.* **90** 107 (2009)]
31. Гейнц Ю Э и др. *ЖЭТФ* **138** 822 (2010) [Geints Yu É et al. *JETP* **111** 724 (2010)]
32. Ionin A A et al. *Laser Phys.* **21** 500 (2011)
33. Ionin A A et al. *Laser Phys.* **20** 1778 (2010)
34. Alekhin A A et al. *Laser Phys. Lett.* **7** 463 (2010)
35. Голосов Е В и др. *ЖЭТФ* **140** 21 (2011) [Goloso V E et al. *JETP* **113** 14 (2011)]
36. Голосов Е В и др. *Российские нанотехнологии* **6** (3–4) 82 (2011) [Goloso V E et al. *Nanotechnol. Russia* **6** 237 (2011)]
37. Goloso V E et al. *Phys. Rev. B* **83** 115426 (2011)
38. Голосов Е В и др. *Письма в ЖЭТФ* **90** 116 (2009) [Goloso V E et al. *JETP Lett.* **90** 107 (2009)]
39. Голосов Е В и др. *Физика и химия обработки материалов* (2) 10 (2010)
40. Goloso V E et al. *Appl. Phys. A* **104** 701 (2011)
41. Ионин А А и др. *Квантовая электроника* **41** 829 (2011) [Ionin A A et al. *Quantum Electron.* **41** 829 (2011)]
42. Корольков В П и др. *Квантовая электроника* **41** 387 (2011) [Korol'kov V P et al. *Quantum Electron.* **41** 387 (2011)]
43. Ионин А А и др. *Письма в ЖЭТФ* **94** 289 (2011) [Ionin A A et al. *JETP Lett.* **94** 266 (2011)]
44. Ионин А А и др. *Письма в ЖЭТФ* **94** 816 (2011) [Ionin A A et al. *JETP Lett.* **94** 753 (2011)]
45. Ионин А А и др. *Письма в ЖЭТФ* **94** 35 (2011) [Ionin A A et al. *JETP Lett.* **94** 34 (2011)]
46. Ionin A A, Kudryashov S I, Seleznev L V *Phys. Rev. E* **82** 016404 (2010)
47. Ионин А А, Кудряшов С И, Селезнев Л В *Краткие сообщения по физике ФИАН* **38** (6) 13 (2011) [Ionin A A, Kudryashov S I, Seleznev L V *Bull. Lebedev Phys. Inst.* **38** 161 (2011)]
48. Горелик В С и др. *Краткие сообщения по физике ФИАН* **38** (11) 20 (2011) [Gorelik V S et al. *Bull. Lebedev Phys. Inst.* **38** 328 (2011)]
49. Koopman D V, Wilkenson T D J. *Appl. Phys.* **42** 1883 (1971)
50. Zhao X M et al. *IEEE J. Quantum Electron.* **31** 599 (1995)
51. Tzortzakis S et al. *Phys. Rev. E* **60** R3505 (1999)
52. Ionin A A et al. *Appl. Phys. Lett.* **100** 104105 (2012)
53. Ionin A A et al., in *High-Power Laser Ablation Conf. HPLA 2012, 28 April–30 May 2012, Santa Fe, NM, USA, 2012*, HPLA Online Book of Proc.

PACS numbers: 14.60.St, **23.40.**–s, **31.10.**+z
DOI: 10.3367/UFNr.0182.201207i.0781

Ускорение запрещённых захватов орбитальных электронов и двойных безнейтринных захватов электронов ядрами под действием лазерного излучения

М.Ю. Романовский

1. Введение

Ускорение процесса бета-распада частиц (процесса, обратного электронному захвату) под действием внешнего электромагнитного поля изучается уже более 40 лет со времён пионерских работ [1, 2]. Ускорение бета-распада ядер объяснялось трансформацией волновой функции свободного вылетевшего электрона в электромагнитном (сильном) поле [3–7]¹. Необходимые для кратного ускорения напряжённости внешнего электрического поля при этом составляли порядка $E_{\text{crit}} = m_e^2 c^3 / e \hbar \sim 1,3 \times 10^{16}$ В см^{–1} (m_e — масса электрона, e — его заряд, c — скорость света, \hbar — постоянная Планка).

Ускорение процесса захвата орбитальных электронов, обратного бета-распаду, не привлекало такого пристального внимания отчасти потому, что было давно и хорошо известно: например, скорость процесса ${}^7\text{Be} \rightarrow {}^7\text{Li}$ зависит от химической связи, в которой находится атом бериллия (см. [8]). Кроме того, теоретически и экспериментально изученный спектр воздействия на волновые функции орбитальных электронов был весьма широк: воздействие, обусловленное теми же химическими связями, высоким давлением [9], температурными эффектами, в том числе сверхпроводимостью, внутренними электрическими и магнитными полями среды, плазменными эффектами (см. обзор [10]). В основном рассматривался К-захват, степень возможного ускорения процесса не превышала 10^{-2} . Прими-кали к этому и известные работы (см., например, [11–14]) по ядерному возбуждению при электронных переходах соответствующего атома.

Электронный захват не из К-оболочки, а из более высоколежащих оболочек атома также хорошо известен [15–17], в том числе захват электронов с ненулевым орбитальным квантовым числом l [18, 19]. Именно последний процесс может быть ускорен действием внешнего электрического поля. При запрещённом электронном захвате пара связанный электрон–свободное нейтрино должна компенсировать изменение полного момента ядра, т.е. либо он должен быть изменён за счёт захватываемого орбитального электрона, либо его должно "унести" нейтрино. Вероятность процесса пере-

¹ Мы не упоминаем здесь большого количества не совсем точных работ, предсказывавших ускорение бета-распада при сравнительно умеренных внешних полях.

М.Ю. Романовский. Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, РФ
E-mail: slon@kapella.gpi.ru

дачи орбитального момента электрона ядру или унесения его нейтрино определяется двумя факторами. Первый из них — соотношение между радиусом ядра, характерным радиусом волновой функции электрона и длиной волны де Бройля нейтрино. Вероятность унесения орбитального момента свободным нейтрино определяется отношением радиуса ядра r_n и де-бройлевской длины волны нейтрино в степени $2l$ (l — уносимый орбитальный момент). В то же время вероятность передачи момента от орбитального электрона ядру определяется отношением радиуса ядра и характерного радиуса волновой функции орбитального электрона в той же степени $2l$. Вторым фактором является то обстоятельство, что орбитальный электрон имеет уже "готовый" момент для передачи ядру, а вылетающее нейтрино ещё только должно его набрать в процессе распада. Тогда из соотношения неопределённостей следует, что этот процесс происходит достаточно быстро при больших энергиях вылетающего нейтрино E_ν . Оба эти фактора и приводят к вышеуказанному замедлению запрещённого захвата орбитального электрона. Таким образом, при $E_\nu < 1$ МэВ запрещённый электронный захват осуществляется в основном с соответствующими электронами в p -, d -, ...-состояниях, т.е. захват происходит из оболочек L_{III} , M_V , N_{VII} и т.д. Характерным примером служит электронный захват ядра ^{205}Pb : отношение скоростей K - и L -захватов оценивается на уровне 10^{-4} [18].

Теория захвата орбитальных электронов (см. последовательное изложение в [20]) гласит, что вероятности процесса разрешённых и уникальных захватов первого, второго и т.д. запрещённых пропорциональны квадрату матричного элемента соответствующего перехода между материнским и дочерним ядром, квадрату волновой функции (ВФ) захватываемого электрона на ядре, энергии нейтрино — в квадрате для разрешённого, в 4-й степени для захвата первого запрещения, в 6-й степени — второго и т.д., а также квадрату постоянной Ферми слабого взаимодействия. Мы будем интересоваться в первую очередь уникальными переходами первого и второго запрещения, которые выражаются через один ядерный матричный элемент². Такие электронные захваты хорошо известны — достаточно назвать вышеупомянутый процесс первого запрещения в ^{205}Pb . Существуют и другие примеры, наиболее интересные из которых с нашей точки зрения приведём ниже.

2. Действие внешнего электрического поля на электронный захват

Из перечисленных множителей, входящих в вероятность процесса, мы по-настоящему можем воздействовать внешним электрическим полем только на величину волновой функции связанного электрона на ядре. Действительно, внешнее электрическое поле поляризует атом, при этом волновые функции всех электронов атома "сдвигаются" относительно ядра. Очевидно, что для электронов в s -состоянии это может привести только к уменьшению волновой функции на ядре, так как ВФ таких электронов имеет там максимум. В то же время

волновые функции электронов в p -, d -, ...-состояниях внутри ядра имеют точку, в которой они обращаются в нуль. Это происходит как в дираковском описании одноэлектронных ВФ в атоме, так и при описании в простом слэтеровском приближении [21, 22]. При поляризационном сдвиге плотность электронных состояний этих ВФ может только возрастать: за счёт этого возрастания электронной плотности с необходимым орбитальным моментом на ядре и возможно ускорение электронного захвата.

В настоящее время в теории бета-процессов [20] принято описание одноэлектронного состояния релятивистским уравнением Дирака (см, например, [23, 24]) с самосогласованным потенциалом Хартри–Фока. Ранее (до 1960-х годов включительно) пользовались электронными волновыми функциями в упомянутом слэтеровском приближении [25], основная неточность которого заключается как раз в неучёте релятивистских эффектов. Для наших целей — демонстрации возможности осуществления ускорения электронного захвата лазерным полем — вполне достаточно и слэтеровского приближения.

Волновые функции слэтеровского приближения записаны для чисто кулоновского взаимодействия электрона с ядром в уравнении Шрёдингера. Однако их сверхтонкое взаимодействие приводит к появлению некоторой постоянной добавки к ВФ на ядре. Легко показать, что для $l = 1$ и 2 , т.е. для электронного захвата первого и второго запрещённых, эта добавка не влияет на ускорение рассмотренных электронных захватов лазерным излучением, а сверхтонкое взаимодействие снизит рассматриваемый эффект ускорения захвата уже третьего запрещения.

Корректный расчёт эффекта захвата электронов из p -, d -, ...-состояний должен включать в себя расчёт волновых функций этих электронов вблизи ядра с учётом воздействия квазистационарного электрического поля. Возможно использование теории возмущений, так как внешнее лазерное поле в рассматриваемых условиях может полагаться малым при $I < Z_{\text{eff}}^6 I_0 \sim (10^8 - 10^{10}) I_0$, т.е. в негиперрелятивистском случае; здесь Z_{eff} — эффективный экранированный заряд.

3. Волновые функции электронов на ядре во внешнем электрическом поле

С помощью теории возмущений Гейзенберга–Шрёдингера рассмотрим, как внешнее электрическое поле влияет на одночастичные водородоподобные слэтеровские волновые функции электронов. Нам в конечном счёте будут нужны только ВФ на ядре, т.е. при r порядка нескольких r_n . Для этого запишем уравнение Шрёдингера с эффективным кулоновским зарядом и внешним электрическим полем:

$$\Delta\psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{Z_{\text{eff}} e^2}{r} - eAr \right) \psi = 0. \quad (1)$$

Здесь ψ и E — волновая функция и энергия соответствующего электронного состояния. Как обычно для задач с внешним электрическим полем, перейдём в (1) к параболическим координатам ξ , η , φ (см. наилучшее описание в [26]). В этих координатах переменные разделяются, нормированная ВФ, зависящая от параболических квантовых чисел n_1 , n_2 и магнитного числа m ,

² Для простоты рассмотрения влияния электрического поля на процесс электронного захвата мы не будем учитывать эффекты обмена и перекрывания. Их влияние является заметным, но не определяющим [20].

выражается в виде

$$\psi_{n_1 n_2 m} = \sqrt{2} \varepsilon^{2/3} f_{n_1 m}(\varepsilon \xi) f_{n_2 m}(\varepsilon \eta) \frac{\exp(im\varphi)}{\sqrt{2\pi}}. \quad (2)$$

Здесь ε , в отличие от такового в [20], имеет смысл размерной постоянной — обратного эффективного боровского радиуса r_B , $\varepsilon = Z_{\text{eff}}/nr_B$, $n = n_1 + n_2 + |m| + 1$ — главное квантовое число, функции $f_{n_1 m}$ и $f_{n_2 m}$ удовлетворяют уравнениям

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{d}{d\xi} \right) f_{n_1 m} + \left(\frac{m_e E}{2\hbar^2} \xi - \frac{m_e e A}{4\hbar^2} \xi^2 - \frac{m^2}{4\xi} \right) f_{n_1 m} &= -\beta_1 f_{n_1 m}, \\ \frac{d}{d\eta} \left(\eta \frac{d}{d\eta} \right) f_{n_2 m} + \left(\frac{m_e E}{2\hbar^2} \eta - \frac{m_e e A}{4\hbar^2} \eta^2 - \frac{m^2}{4\eta} \right) f_{n_2 m} &= -\beta_2 f_{n_2 m}, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \beta_1 + \beta_2 &= \frac{Z_{\text{eff}} e^2 m_e}{2\hbar^2}, \quad \beta_1 = \left(n_1 + \frac{|m| + 1}{2} \right) \frac{Z_{\text{eff}} e^2 m_e}{2\hbar^2}, \\ \beta_2 &= \left(n_2 + \frac{|m| + 1}{2} \right) \frac{Z_{\text{eff}} e^2 m_e}{2\hbar^2}. \end{aligned}$$

Член с полем в (3) можно считать, как указывалось, малым возмущением при амплитудах величиной вплоть до амплитуд лазерного поля $A < Z_{\text{eff}}^3 E_{\text{at}}$, т.е. для всех ныне существующих лазерных систем. Тогда поправка первого порядка к волновой функции $f_{n,m}^{(1)}(x)$ [27] записывается в виде

$$f_{n,m}^{(1)}(x) = \frac{A}{4Ze\varepsilon^2} \sum_{n_i \neq n_j} \frac{\langle x \rangle_{n_i n_j}^2}{n_i - n_j} f_{n_j m}^{(0)}(x), \quad (4)$$

где $f_{n,m}^{(0)}(x)$ — решение уравнений (3) с $A = 0$, а матричный элемент $\langle x \rangle_{n_i n_j}^2$ — среднее от квадрата ξ или η по соответствующей невозмущённой ВФ $f_{n,m}^{(0)}(x)$ (значения этих матричных элементов см. в [26]). Поправка второго порядка $f_{n,m}^{(2)}(x)$ [27] имеет аналогичный вид:

$$\begin{aligned} f_{n,m}^{(2)}(x) &= \frac{A^2}{16Z^2 e^2 \varepsilon^4} \left[\sum_{n_i \neq n_k} \sum_{n_i \neq n_l} \frac{\langle x \rangle_{n_i n_l}^2}{n_k - n_l} \frac{\langle x \rangle_{n_i n_k}^2}{n_l - n_i} f_{n_k m}^{(0)}(x) - \right. \\ &\quad \left. - \sum_{n_i \neq n_s} \frac{\langle x \rangle_{n_i n_i}^2 \langle x \rangle_{n_i n_s}^2}{(n_s - n_i)^2} f_{n_s m}^{(0)}(x) - \frac{1}{2} \sum_{n_i \neq n_s} \frac{(\langle x \rangle_{n_i n_s}^2)^2}{(n_s - n_i)^2} f_{n_i m}^{(0)}(x) \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

Очевидно, что для полной ВФ (2) поправка первого порядка

$$\begin{aligned} \psi_{n_1 n_2 m}^{(1)} &= \sqrt{2} \varepsilon^{3/2} [f_{n_1 m}^{(1)}(\varepsilon \xi) f_{n_2 m}^{(0)}(\varepsilon \eta) + f_{n_1 m}^{(0)}(\varepsilon \xi) f_{n_2 m}^{(1)}(\varepsilon \eta)] \times \\ &\quad \times \frac{\exp(im\varphi)}{\sqrt{2\pi}}, \end{aligned} \quad (6)$$

а поправка второго порядка

$$\begin{aligned} \psi_{n_1 n_2 m}^{(2)} &= \sqrt{2} \varepsilon^{3/2} [f_{n_1 m}^{(2)}(\varepsilon \xi) f_{n_2 m}^{(0)}(\varepsilon \eta) + f_{n_1 m}^{(1)}(\varepsilon \xi) f_{n_2 m}^{(1)}(\varepsilon \eta) + \\ &\quad + f_{n_1 m}^{(0)}(\varepsilon \xi) f_{n_2 m}^{(2)}(\varepsilon \eta)] \frac{\exp(im\varphi)}{\sqrt{2\pi}}. \end{aligned} \quad (7)$$

Нас интересует, собственно говоря, поведение возмущённых лазерным полем волновых функций в сферических координатах вблизи нуля. Малым r соответствуют малые ξ и η , так что функции $f_{n_1 m}$ и $f_{n_2 m}$ могут быть разложены в ряд Тейлора. Выраженная поляризация ВФ лазерным полем происходит только для состояний с

$|m| = 0^3$. Тогда

$$\psi_{n_1 n_2 0}^{(1)}(\xi, \eta \sim 0) = \frac{3(n_1 - n_2)n^{1/2} A r_B^{1/2}}{8\sqrt{\pi} Z_{\text{eff}}^{3/2} e}, \quad (8)$$

т.е. поправка первого порядка пропорциональна разности параболических квантовых чисел; при их равенстве она обращается в нуль [26, 27]. Соответственно поправка второго порядка к ВФ (2)

$$\begin{aligned} \psi_{n_1 n_2 0}^{(2)}(\xi, \eta \sim 0) &= \\ &= \frac{n^{5/2} A^2 r_B^{5/2}}{8\sqrt{\pi} Z_{\text{eff}}^{9/2} e^2} \left(n_1^3 + n_2^3 - n_1^2 - n_2^2 + 2n_1 + 2n_2 - \frac{3}{2} \right) \end{aligned} \quad (9)$$

не равна нулю и при одинаковых параболических квантовых числах.

Перейдём теперь к вычислению ВФ в лазерном поле. Так как точные водородоподобные ВФ в сферических координатах являются линейными комбинациями ВФ в параболических координатах [26], то

$$\psi_{2,1,0}(r, \theta, 0) = \frac{1}{2\sqrt{2}} [\psi_{1,0,0}(\xi, \eta) - \psi_{0,1,0}(\xi, \eta)], \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \psi_{3,2,0}(r, \theta, 0) &= \\ &= \frac{1}{2\sqrt{3}} [\psi_{2,0,0}(\xi, \eta) + \psi_{0,2,0}(\xi, \eta) - 2\psi_{1,1,0}(\xi, \eta)]. \end{aligned} \quad (11)$$

Подставляя (8) в (10), видим, что уже поправка первого порядка к первой ВФ в нуле не равна нулю и

$$\begin{aligned} \psi_{2,1,0}(r \rightarrow 0, \theta, \varphi) &\simeq \\ &\simeq \frac{Z_{\text{eff}}^{5/2}}{4\sqrt{2}\pi r_B^{5/2}} r \cos \theta + \frac{3A\sqrt{3}r_B}{8\sqrt{\pi} Z_{\text{eff}}^{3/2} e} \cos(\theta - \gamma), \end{aligned} \quad (12)$$

где γ — угол между направлением вектора электрического поля лазера и полярным углом ВФ, $Z_{\text{eff}} = Z_{\text{Lин}}$. Аналогичный расчёт поправки первого порядка к второй ВФ в нуле даёт для неё нулевое значение, и должна быть учтена уже поправка второго порядка. Имеем

$$\begin{aligned} \psi_{3,2,0}(r \rightarrow 0, \theta, \varphi) &\simeq \frac{\sqrt{3} Z_{\text{eff}}^{7/2}}{324\sqrt{2}\pi r_B^{7/2}} r^2 \left(\cos^2 \theta - \frac{1}{3} \right) + \\ &+ \frac{9\sqrt{3} A^2 r_B^{5/2}}{2\sqrt{\pi} Z_{\text{eff}}^{9/2} e^2} \left[\cos^2(\theta - \gamma) - \frac{1}{3} \right]^2. \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь $Z_{\text{eff}} = Z_{\text{Mv}}$. Для электронного захвата третьего запрещения нужно рассчитывать поправку 3-го порядка к ВФ $\psi_{4,3,0}(r \rightarrow 0, \theta, \varphi)$.

Для того чтобы получить фактор ускорения электронного захвата α , необходимо, как указывалось, взять модуль квадратов ВФ (12), (13), усреднённый по времени и ориентации электрического вектора лазерного поля, и

³ Действие постоянного однородного электрического поля на одно-электронные ВФ с $m \neq 0$ другое. Так как эти ВФ, кроме неравенства нулю в аксиально-симметричных областях, меняют знак, то нулевое значение ВФ не перемещается из точки $r = 0$. Происходит только электроиндуцированное изменение коэффициента в (1) при r для ВФ с $l = 1$, при r^2 для $l = 2$ и т.д.

проинтегрировать по объёму ядра. Далее полученная величина должна быть отнесена к интегралу по объёму ядра от невозмущённых ВФ. Интересны большие α , когда поляризационный сдвиг ВФ много больше r_n . Таким образом, для электронного захвата первого запрещения

$$\alpha_1 = \alpha_{L_{III}} \approx \frac{25}{4Z_{L_{III}}^8} \left(\frac{r_B}{r_n} \right)^2 \frac{I_0}{I_0}. \quad (14)$$

Фактор ускорения электронного захвата второго запрещения при аналогичных условиях

$$\alpha_2 = \alpha_{M_V} \approx \frac{3^{15}\pi}{8Z_{L_{III}}^{16}} \left(\frac{r_B}{r_n} \right)^4 \frac{I_0^2}{I_0^2}. \quad (15)$$

Рассмотрим конкретные примеры. Распад долгоживущего (период полураспада $1,53 \times 10^7$ лет) изотопа свинца $^{205}\text{Pb} \rightarrow ^{205}\text{Tl}$ идёт с изменением полного момента ядра на 2 и изменением чётности — это уникальный электронный захват первого запрещения. Ускорение $\alpha_1 \simeq 1,7 \times 10^{-6} I_0/I_0$. Для ощутимых ускорений этого электронного захвата ($\alpha_1 \sim 10$) необходима интенсивность лазерного излучения $\sim 6 \times 10^6 I_0 \sim 10^{23}$ Вт см $^{-2}$. Такие интенсивности в настоящее время ещё не достигнуты. Другим примером аналогичного процесса является электронный захват в также долгоживущем изотопе ^{81}Kr (период полураспада $2,29 \times 10^5$ лет [17]). Для процесса $^{81}\text{Kr} \rightarrow ^{81}\text{Br}$ $\alpha_1 \simeq 0,35 I_0/I_0$. Десятикратное ускорение достигается уже при интенсивностях $I_0 \sim 10^{18}$ Вт см $^{-2}$.

Экспериментальные возможности наблюдения ускорения электронного захвата второго запрещения в лазерном поле гораздо более очевидны: эффективный заряд меньше, поляризуемость выше. Электронный захват второго запрещения, например, изотопа ^{133}Ba (период полураспада 10,51 лет) $^{133}\text{Ba} \rightarrow ^{133}\text{Cs}$ имеет $\alpha_2 \simeq 300(I_0/I_0)^2$, т.е. $\alpha_2 \sim 10$ при $I_0 \sim 10^{16}$ Вт см $^{-2}$.

Наиболее интересно рассмотреть процессы между стабильными ядрами. Для электронного захвата второго запрещения $^{123}\text{Te} \rightarrow ^{123}\text{Sb}$ $\alpha_2 \simeq 1000(I_0/I_0)^2$, т.е. $\alpha_2 \sim 10$ при $I_0 \sim 10^{15}$ Вт см $^{-2}$. До недавнего времени этот процесс интерпретировался как К-захват, согласно имевшему место излучению с энергией кванта в области 28 кэВ — K_α -линии ^{123}Sb [28] со временем жизни более 10^{13} лет. Это же значение фигурирует в [17]. Однако впоследствии более точные исследования показали, что такого излучения нет и распад $^{123}\text{Te} \rightarrow ^{123}\text{Sb}$ не может быть интерпретирован как К-захват [29]. Для периода полураспада было получено ограничение $t_{1/2} > 9,2 \times 10^{16}$ лет [29].

4. Возможности экспериментальной реализации

Необходимые интенсивности лазерного излучения для ускорения процесса электронного захвата первого запрещения довольно велики: в настоящее время они реализуются в коротких сверхмощных лазерных импульсах длительностью менее 1 пс и небольшой частотой повторения. Тем не менее наблюдение усиления характеристического рентгеновского излучения с переходами из L_{III} -оболочки, по-видимому, возможно, хотя бы и в режиме счёта рентгеновских фотонов. Значительная ионизация исследуемых атомов будет сопровождать возможный процесс ускорения электронного захвата.

Проще реализация ускорения электронного захвата второго запрещения. Необходимые интенсивности ла-

зерного излучения могут быть достигнуты даже при фокусировке мощных непрерывных лазеров. Для предотвращения образования высокоионизованной плазмы эксперимент может заключаться в фокусировке лазерного излучения в сильно разрежённые "облака" пара исследуемых атомов. Общее количество "рабочих" ядер будет невелико, что, однако, компенсируется непрерывностью лазерного воздействия. Заметим, что за рамками приближения остались многие интересные ядра, в первую очередь лёгкие. Можно ожидать, например, что десятикратное ускорение электронного захвата $^{54}\text{Mn} \rightarrow ^{54}\text{Cr}$ ($t_{1/2} = 312$ сут) 4 будет достигнуто уже при интенсивности лазерного излучения $\sim 10^{11} - 10^{12}$ Вт см $^{-2}$. Эксперимент здесь может быть проведён посредством облучения твердотельной мишени с большим количеством распадающихся ядер. Ещё проще условия для электронного захвата 3-го запрещения [30].

5. Ускорение двойного безнейтринного захвата орбитальных электронов

Приведём некоторые физические соображения, как приложением к атомам сильного электрического (в том числе лазерного) поля можно добиться ускорения (значительного) гипотетического (всё ещё) двойного безнейтринного электронного захвата орбитальных электронов стабильными ядрами. Такой процесс, который был предложен ещё в 1955 г. [31], возможен, если нейтрино совпадает со своей античастицей (гипотеза Э. Майораны). В этом случае для ядра с массовым числом $A + 2$ следует просуммировать два последовательно идущих процесса электронного захвата:

$$\begin{aligned} &[(A + 2) + e \rightarrow (A + 1) + \nu_e] + \\ &+ [(A + 1) + e + \bar{\nu}_e \rightarrow A + \gamma] = \\ &= (A + 2) + 2e \rightarrow A + \gamma. \end{aligned} \quad (16)$$

Формально в этих процессах нейтрино первого процесса сокращается с антинейтрино второго (физически оно в первом процессе излучается, а во втором — поглощается) и получается результирующий процесс (с испусканием гамма-кванта). Такого рода переходы происходят между ядрами $0^+ \rightarrow 0^+$, всего таких пар с чистым электронным захватом без испускания позитронов 12 [17].

Очевидно, что время между первым и вторым процессом невелико — менее времени пробега нейтрино в рассматриваемом ядре, а расстояние, пробегаемое нейтрино, меньше радиуса ядра. С этим обстоятельством связана величина ядерного матричного элемента перехода между материнским ядром ($A + 2$) и дочерним (A): по-видимому, она меньше для таких переходов, в которых меньше момент промежуточного ядра. Действительно, соотношение неопределённостей для величин угла φ и углового момента L_z [23, 24]

$$\langle (\Delta L_z)^2 \rangle \langle (\Delta \varphi)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

⁴ Поскольку пробойное напряжение чистых солей Mn достигает 10^9 В см $^{-1}$ (такая амплитуда поля соответствует интенсивности излучения 10^{15} Вт см $^{-2}$), эксперимент может быть поставлен помещением образца подобной соли в постоянное электрическое поле ~ 10 МВ см $^{-1}$.

при малых угловых перемещениях $\Delta\varphi$ (так как и пространственные перемещения протонов, захвативших электрон внутри ядра, малы) определяет довольно большие величины ΔL_z , которые должны возникать при первом захвате, т.е. в промежуточном ядре $A+1$. Поэтому упомянутый ядерный матричный элемент должен быть больше (значительно) для таких двойных безнейтринных захватов, в которых захват в промежуточное ядро является запрещённым. Очевидно, однако, что при этом величина волновой функции захватываемого электрона на ядре меньше (в $Z_{\text{eff}}r_n/r_B$ соответствующей степени раз) и результат для скоростей двойных запрещённых и разрешённых захватов будет примерно одинаковым (во всяком случае, не настолько различным, как для одноэлектронных захватов [20, 25]). При смещении электрическим полем волновой функции захватываемого электрона с ненулевым орбитальным квантовым числом относительно ядра величина этой волновой функции на ядре возрастает, что даёт ускорение двойного электронного захвата. При переходах между ядрами $0^+ \rightarrow 0^+$ фактором ускорения будет просто квадрат соответствующего ускорения одноэлектронного запрещённого захвата (14), (15).

6. Двойной безнейтринный захват в резонансные состояния дочерних ядер и возможности экспериментальной реализации

"Лишняя" энергия при двойном безнейтринном электронном захвате должна быть удалена γ -квантом с соответствующей энергией. При отсутствии близкорасположенных резонансных уровней в дочернем ядре к основному состоянию (за минусом энергии связи захватываемых электронов) в материнском ядре основной процесс генерации таких γ -квантов — тормозной [32]. Наличие таких близкорасположенных возбуждённых уровней резко увеличило бы вероятность двойного захвата, так как он мог бы происходить в резонансное состояние с последующим резонансным высвечиванием соответствующего γ -кванта. Расчёт таких резонансных процессов выполнен для ряда ядер [33–36]; предлагается использовать синхротронное излучение для реализации вынужденных переходов в возбуждённое состояние дочернего ядра [37]. Резонансный параметр F в вероятности двойного захвата в возбуждённое состояние имеет вид [38]

$$F = \frac{\Gamma_{2h}}{\Delta^2 + \Gamma_{2h}^2/4}, \quad (17)$$

где $\Delta = Q - B_{2h} - E_\gamma$, Γ_{2h} и B_{2h} — энергия и ширина двойной электронной дырки в электронной оболочке атома дочернего ядра, Q — разница энергий связи материнского и дочернего ядер, E_γ — энергия возбуждённого уровня дочернего ядра.

Наименьшее Δ среди известных ядер — у ^{74}Se : для захвата электронов из L_{III} - и L_I -оболочек $\Delta_{Se} = 2,6$ кэВ (данные [33], величина Q для пары $^{74}\text{Se} - ^{74}\text{Ge}$ измерена с точностью 2,3 кэВ [33]). Первым происходит захват первого запрещения в основное состояние виртуального ядра $2^- ^{74}\text{As}$, вторым — разрешённый захват в возбуждённое состояние $2^+ ^{74}\text{Se}$. По данным [33], при такой расстройке Δ_{Se} период полураспада (при первом захвате из оболочки не L_{III} , а L_{II}) оценивается сверху величиной $0,55 \times 10^{19}$ лет, вышеприведённые соображения показы-

вают, что двойной захват из оболочек L_{III} и L_I должен быть более быстрым.

По мере ионизации атома энергия связи электронов в оставшихся оболочках становится по модулю больше, так как экранирование ядра в этом случае уменьшается. Кроме того, при переходе между электронными оболочками энергия ионизации испытывает значительный скачок (у неонподобного Se^{24+} энергия ионизации 2542 эВ, в то время как энергия ионизации предыдущего иона Se^{23+} 1036,3 эВ); это обстоятельство использовалось, например, при создании плазменных лазеров рентгеновского диапазона [39, 40]. В неонподобном $^{74}\text{Se}^{24+}$ энергия связи электронов в оболочке L_{III} примерно равна энергии ионизации 2542 эВ, энергия связи электронов в оболочке L_I на 15 % больше (как в исходном атоме [41]), что составляет 2923 эВ. Таким образом, в ионе $^{74}\text{Se}^{24+}$ $B_{2h}^i \approx 5,5$ кэВ, что даёт $\Delta_{Se}^i \approx 0!$ (см. рисунок). Можно оценить на этом основании порядок величины Δ_{Se}^i иона $^{74}\text{Se}^{24+}$ в несколько десятков электронвольт. Поскольку и Γ_{2h}^i в ионе $^{74}\text{Se}^{24+}$ также отлична от атомарной величины Γ_{2h} (примерно в 1,5 раза больше), то это должно быть учтено в факторе ускорения.

Таким образом, факторов ускорения двойного безнейтринного электронного захвата из оболочек L_{III} и L_I ^{74}Se в сильном лазерном поле оказывается два. Самый сильный из них — это приведение в резонанс величины (17) вследствие шарковского сдвига уровней энергии внутренних электронов в ионе по сравнению с таковыми в атоме. При этом ускорение электронного захвата первого запрещения в виртуальное ядро из оболочки L_{III} (ускорения захвата из оболочки L_I нет (см. выше)) может быть невелико. Для того чтобы получить результирующее ускорение α_1^{res} , нужно взять отношение резонансных факторов (17) для иона и атома и при необходимости умножить на α_1 . Тогда, если

$$\frac{25}{4Z_{L_{III}}^8} \left(\frac{r_B}{r_n} \right)^2 \frac{I_{I0}}{I_0} > 1,$$

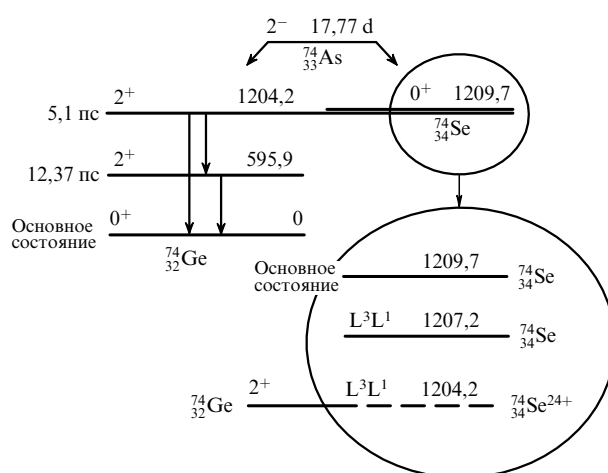


Рисунок. Схема уровней энергии при безнейтринном захвате $^{74}\text{Se} \rightarrow ^{74}\text{Ge}$. В левой части рисунка показаны нижние возбуждённые уровни ^{74}Ge с соответствующими временами жизни. В эллипсе показаны уровни энергии основного состояния ^{74}Se , двойной дырки в электронных оболочках L_I и L_{III} атома ^{74}Se и неонподобного иона $^{74}\text{Se}^{24+}$. Переход $1204,2 \rightarrow$ основное состояние ^{74}Ge примерно вдвое менее вероятен, чем переход $1204,2 \rightarrow 595,9$ [13] (все энергии приведены в килоэлектронвольтах).

то

$$\alpha_1^{\text{res}} \approx \frac{25}{4Z_{\text{LIII}}^8} \left(\frac{r_B}{r_n} \right)^2 \frac{I_{I0}}{I_0} \frac{\Delta^2 \Gamma_{2h}}{(\Delta^i)^2 \Gamma_{2h}^i}, \quad (18a)$$

в противном случае

$$\alpha_1^{\text{res}} \approx \frac{\Delta^2 \Gamma_{2h}}{(\Delta^i)^2 \Gamma_{2h}^i}. \quad (18b)$$

Подставляя параметры L_{III} и L_I ^{74}Se и $\Gamma_{2h} \sim 1$ эВ и учитывая, что ускорения электронного захвата из оболочки L_{III} на этот раз нет (лазерное поле имеет интенсивность, обеспечивающую только поддержание плазмы с ионами нужной степени ионизации, и реализуется случай (18b)), получим $\alpha_1^{\text{res}} \sim 10^4$, что даст время такого процесса в лазерном поле упомянутой интенсивности $\sim 5 \times 10^{14}$ лет.

Поддержание плотной горячей плазмы $^{74}\text{Se}^{24+}$ производится различными способами [39, 40]. Возможно, например, удержание её в ловушке (см. [42, 43] и описание там ловушек), созданной импульсными пучками одного или нескольких CO_2 -лазеров. При удержании системой лазерных пучков [42, 43] количества ионов, соответствующего 1 г вещества ^{74}Se , минимально необходимое время эксперимента по детектированию γ -квантов излучающего ядра ^{74}Ge с энергией 608,35 и 595,85 кэВ может составить несколько секунд.

7. Заключение

Необходимые интенсивности лазерного излучения для ускорения процесса электронного захвата первого запрещения довольно велики: в настоящее время они реализуются в коротких сверхмощных лазерных импульсах длительностью менее 1 пс и небольшой частотой повторения. Тем не менее наблюдение усиления характеристического рентгеновского излучения с переходами из L_{III} -оболочки, по-видимому, возможно, хотя бы в режиме счёта рентгеновских фотонов.

Проще реализация ускорения электронного захвата второго запрещения. Необходимые интенсивности лазерного излучения могут быть достигнуты даже при фокусировке мощных непрерывных лазеров. По-видимому, эксперименты могут быть поставлены и в постоянном электрическом поле с напряжённостью $10\text{--}100$ МВ см^{-1} , которое ниже напряжённости пробойного поля многих чистых диэлектриков, содержащих интересные нас ядра.

Возможны значительное ускорение безнейтринного двойного электронного захвата и проверка гипотезы Э. Майораны о природе нейтрино в эксперименте с плазмой, состоящей из электронов и неонподобных ионов $^{74}\text{Se}^{24+}$. Перспективен здесь также тяжёлый ион ^{168}Er .

Работа выполнена при поддержке грантом фонда А. фон Гумбольдта.

Список литературы

1. Никишов А И, Ритус В И *ЖЭТФ* **46** 1768 (1964) [Nikishov A I, Ritus V I *Sov. Phys. JETP* **19** 1191 (1964)]
2. Ритус В И *ЖЭТФ* **56** 986 (1969) [Ritus V I *Sov. Phys. JETP* **29** 532 (1969)]
3. Тернов И М и др. *Письма в ЖЭТФ* **37** 288 (1983) [Ternov I M et al. *JETP Lett.* **37** 342 (1983)]
4. Тернов И М, Родионов В Н, Дорофеев О Ф *ЖЭТФ* **84** 1225 (1983) [Ternov I M, Rodionov V N, Dorofeev O F *Sov. Phys. JETP* **57** 710 (1983)]
5. Ахмедов Е Х *ЖЭТФ* **85** 1521 (1983) [Akhmedov E Kh *Sov. Phys. JETP* **58** 883 (1983)]
6. Никишов А И, Ритус В И *ЖЭТФ* **85** 24 (1983) [Nikishov A I, Ritus V I *Sov. Phys. JETP* **58** 14 (1983)]
7. Becker W, Schlicher R R, Scully M O *Nucl. Phys. A* **426** 125 (1984)
8. Ray A et al. *Phys. Rev. C* **66** 012501(R) (2002)
9. Kusaba M et al., *Annu. Rept. Jan. – Dec. 1989* (Tokyo: Inst. Nucl. Study Univ. Tokyo, 1990)
10. Emery G T *Annu. Rev. Nucl. Sci.* **22** 165 (1972)
11. Morita M *Prog. Theor. Phys.* **49** 1574 (1973)
12. Иванов Л Н, Летохов В С *ЖЭТФ* **68** 1748 (1975) [Ivanov L N, Letokhov V S *Sov. Phys. JETP* **41** 877 (1975)]
13. Иванов Л Н, Летохов В С *ЖЭТФ* **93** 396 (1987) [Ivanov L N, Letokhov V S *Sov. Phys. JETP* **66** 227 (1987)]
14. Letokhov V S *Opt. Commun.* **106** 227 (1994)
15. Pontecorvo B, Kirkwood D H W, Hanna G C *Phys. Rev.* **75** 982 (1949)
16. Hubbard W M *Phys. Rev.* **137** B245 (1965)
17. Firestone R B, Baglin C M, Chu S Y F (Eds) *Table of Isotopes* (New York: Wiley, 1999)
18. Wing J, Stevens C M, Huizenga J R *Phys. Rev.* **111** 590 (1958)
19. Hopke P K, Naumann R A *Phys. Rev. C* **4** 606 (1971)
20. Джелепов Б С, Зырянова Л Н, Сулов Ю П *Бета-процессы. Функции для анализа бета-спектров и электронного захвата* (Л.: Наука, 1972)
21. Zener C *Phys. Rev.* **36** 51 (1930)
22. Slater J C *Phys. Rev.* **36** 57 (1930)
23. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* 2-е изд. (М.: Физматгиз, 1963) [Landau L D, Lifshitz E M *Quantum Mechanics. Non-Relativistic Theory* (Oxford: Pergamon Press, 1977)]
24. Давыдов А С *Квантовая механика* 2-е изд. (М.: Наука, 1973) [Davydov A S *Quantum Mechanics* (Oxford: Pergamon Press, 1976)]
25. Wapstra A H, Nijgh G J, Van Lieshout R *Nuclear Spectroscopy Tables* (Amsterdam: North-Holland, 1959) [Ванстра А Х, Нийх Г И, Ван Лишут Р *Таблицы по ядерной спектроскопии* (М.: Госатомиздат, 1960)]
26. Bethe H A, Salpeter E E *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms* (Berlin: Springer, 1957) [Бете Г, Солпитер Э *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами* (М.: Физматгиз, 1960)]
27. Елютин П В, Кривченко В Д *Квантовая механика с задачами* 2-е изд. (М.: Физматлит, 2001)
28. Watt D T, Glover R N *Philos. Mag.* **7** 105 (1962)
29. Alessandrello A et al. *Phys. Rev. C* **67** 014323 (2003)
30. Романовский М Ю *Письма в ЖЭТФ* **94** 460 (2011) [Romanovskii M Yu *JETP Lett.* **94** 425 (2011)]
31. Winter R G *Phys. Rev.* **100** 142 (1955)
32. Sujkowski Z, Wycech S *Phys. Rev. C* **70** 052501(R) (2004)
33. Barabash A S et al. *Nucl. Phys. A* **785** 371 (2007)
34. Vergados J D *Phys. Rev. C* **84** 044328 (2011)
35. Eliseev S et al. *Phys. Rev. C* **83** 038501 (2011)
36. Eliseev S et al. *Phys. Rev. C* **84** 012501(R) (2011)
37. Goncharov M *Phys. Rev. C* **84** 028501 (2011)
38. Bernabeu J, De Rujula A, Jarlskog C *Nucl. Phys. B* **223** 15 (1983)
39. Matthews D L et al. *Phys. Rev. Lett.* **54** 110 (1985)
40. MacGowan B J J. *Appl. Phys.* **61** 5243 (1987)
41. Григорьев И С, Мейлихов Е З (Ред.) *Физические величины* (М.: Энергоатомиздат, 1991) [Grigoriev I S, Meilikhov E Z (Eds) *Handbook of Physical Quantities* (Boca Raton, NY: CRC Press, 1996)]
42. Korobkin V V, Romanovsky M Yu *Phys. Rev. E* **49** 2316 (1994)
43. Korobkin V V, Romanovsky M Yu *Laser Part. Beams* **16** 235 (1998)

PACS numbers: 02.70.-c, 05.10.-a, 05.50.+q
DOI: 10.3367/UFNr.0182.201207j.0787

Вычислительная физика и проверка теоретических предсказаний

Л.Н. Щур

1. Введение

Вычислительная физика зародилась одновременно с созданием первых электронно-вычислительных машин¹. ЭВМ использовались физиками для достижения практической на то время цели по созданию термоядерного оружия. Одной из первых вычислительных задач мирного использования были исследования Ферми, Паста и Улама [1] по моделированию динамики одномерной нелинейной цепочки, проведённые на ЭВМ MANIAC 1 [2] в Лос Аламосе. В начале 1950-х годов было общепринято мнение о том, что нелинейность должна приводить к равномерному распределению энергии по степеням свободы, т.е. к стохастизации. Напротив, проведённые численные эксперименты выявили квазипериодическое поведение. Объяснение этому явлению было дано в 1965 г. Забуски и Крускалом [3], которые численно идентифицировали солитоны (и ввели в оборот термин "солитон") и обнаружили их неупругое рассеяние. Этот результат послужил толчком к открытию метода обратной задачи рассеяния [4], который, в свою очередь, стал ключом для точного решения нелинейных задач (см., например, монографию [5]). Это яркий пример успеха вычислительной физики и, в частности, вычислительного эксперимента — впервые численный эксперимент привёл к получению нового знания.

Другой важный метод, родившийся примерно в то же самое время, — это метод Монте-Карло, разработанный Метрополисом в сотрудничестве с Розенблютом и Теллером для моделирования термодинамических явлений [6]. Метод Монте-Карло лежит в основе практически всех современных исследований в области статистической вычислительной физики.

Отличительная характеристика вычислительной физики состоит в использовании вычислительной техники для исследования физических явлений. Важными аспектами успешного применения ЭВМ являются алгоритмы и методы расчётов и моделирования, а также методы обработки полученных при этом результатов для извлечения нового знания.

В докладе излагается опыт автора по применению методов вычислительной физики для проверки теоретических предсказаний и гипотез. В качестве иллюстрации выбрано несколько конкретных примеров решения задач нелинейной физики и статистической механики, которые развивают и демонстрируют современное состояние этих первых областей вычислительной физики.

¹ Мы будем применять русский термин "электронно-вычислительная машина" (ЭВМ) наравне с общепринятым сегодня термином "компьютер" в тех разделах текста, где это исторически оправдано.

2. Проверка интегрируемости нелинейных моделей

Развитие метода обратной задачи рассеяния привело в 1960–1980-е годы к взрывному росту числа точно решённых моделей теоретической и математической физики. В частности, были попытки точно решить уравнения двумерной гидродинамики, уравнения Янга–Миллса, космологические задачи и т.п. Применение вычислительной физики может дать наводящие аргументы в пользу интегрируемости модели или дать определённый ответ о неинтегрируемости рассматриваемой модели, а в ряде случаев достичь результата уровня "computer assistant proof", т.е. строгости на уровне теоремы.

2.1. Неинтегрируемость двумерной гидродинамики

На вопрос об интегрируемости двумерной гидродинамики можно ответить элегантно способом [7]. Энергия двумерного вихря расходится логарифмически. Составим пару из вихрей разной по знаку, но равной по модулю завихрённости κ . Энергия такой вихревой пары конечна, у неё сохраняется импульс (обе проекции), т.е. вихревая пара имеет свойства частицы. Эта частица не покоится, в одиночестве она движется по прямой с постоянной скоростью $v = \kappa/a$, где a — расстояние между вихрями. Исследуем численно задачу рассеяния друг на друге вихревых частиц завихрённости κ и $\kappa + \epsilon$, $\epsilon \ll \kappa$. Полученная зависимость угла рассеяния от прицельного расстояния нерегулярная, имеются точки накопления. Вблизи этих точек накопления растёт время жизни захваченного состояния, в котором все четыре вихря находятся по отношению друг к другу на конечном расстоянии порядка $\kappa a/\epsilon$. Расходимость времени захвата аналогична известному явлению захвата трёх тел в небесной механике, неинтегрируемость которой доказал Пуанкаре [8]. Надежда на существование дополнительных интегралов движения (в дополнение к упомянутым выше энергии и импульсам) в рассеянии вихревых пар несовместима с фактом стохастичности их рассеяния. Заметим, что работа [7] — по-видимому, первая вычислительная работа по стохастическому рассеянию.

2.2. Неинтегрируемость классических полей Янга–Миллса

Вопрос об интегрируемости классических полей Янга–Миллса был поставлен В.Е. Захаровым и широко обсуждался в научной литературе, в том числе с помощью численного решения уравнений. Чёткий ответ на этот вопрос был получен в работе [9]. Исходные уравнения Янга–Миллса с помощью допустимой подстановки можно свести к динамической системе, описываемой гамильтонианом с двумя степенями свободы. Фазовое пространство динамической системы (x, \dot{x}, y, \dot{y}) , где (x, y) — две координаты и (\dot{x}, \dot{y}) — соответствующие им импульсы, четырёхмерное. Фиксированное значение интеграла энергии $E = -(1/2)\{\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + x^2 y^2\} = \text{const}$ определяет в четырёхмерном пространстве трёхмерную гиперповерхность. Численно строится фазовый портрет системы в сечении Пуанкаре, т.е. сечении трёхмерной гиперповерхности полуплоскостью $y = 0$, $\dot{y} > 0$. Если бы существовал дополнительный интеграл движения I_1 , то начальные значения задавали бы его значение $I_1 = \text{const}$ и точки сечения Пуанкаре были бы изолированы или

лежали бы на замкнутых кривых, определяемых этим значением $I_1 = \text{const}$. Численное исследование выявило, что инвариантные кривые (или сепаратрисы) неподвижных точек пересекаются под ненулевым углом. Например, тривиальным периодическим решениям $x = y = +F$ и $x = y = -F$, где $F = \text{cn}(t, 1/\sqrt{2})$ — эллиптический косинус Якоби, соответствуют неподвижные точки в сечении Пуанкаре с координатами $(0; 1/\sqrt{2})$ и $(0; -1/\sqrt{2})$. Линеаризованное отображение в окрестности этих точек гиперболическое, с собственными значениями $\lambda_1 = 129,647014\dots$ и $\lambda_2 = 1/\lambda_1$. Построенные численно сепаратрисы этих точек пересекаются под углом примерно 72° . При условиях вычислений полученное значение угла намного превышает возможные погрешности его вычисления, что является доказательством неинтегрируемости уравнений Янга–Миллса в стиле computer assistant proof.

2.3. Точное решение задачи смены казнеровских эпох

Следующий пример относится к изучению статистических свойств колебательной эволюции [10] вакуумной однородной космологической модели типа IX по Бианки [11]. Длина эры n измеряется в числе колебаний эры k_n . Бесконечная последовательность k_n ($n = 0, 1, 2, \dots$) определяется числами $x_{-1}, x_0, x_1, x_2, \dots$ ($0 < x_s < 1$), связанными друг с другом преобразованием $x_{s+1} = \{1/x_s\}$, где фигурные скобки обозначают дробную часть числа. При этом длины $k_s = [1/x_{s-1}]$, где квадратные скобки обозначают целую часть числа. Можно написать выражение для x_s через k_s в виде цепной дроби $x_{s-1} = 1/(k_s + 1/(k_{s+1} + 1/(k_{s+2} + \dots \equiv x_s^+))$. Такой закон смены длин эпох приводит к стохастизации поведения модели при её эволюции к особенностям. Плотность распределения вероятностей на отрезке $(0, 1)$ значений $x_s \equiv x$ задаётся формулой Гаусса $w(x) = 1/(1+x) \ln 2$. Обозначим через Ω_s момент начала s -й эры, тогда можно получить следующие рекуррентные формулы, связывающие характеристики двух последовательных эр

$$\frac{\Omega_{s+1}}{\Omega_s} = 1 + \delta_s k_s \left(k_s + x_s + \frac{1}{x_s} \right),$$

$$\frac{\delta_{s+1}}{\delta_s} = 1 - \frac{k_s/x_s + 1}{\Omega_{s+1}/\Omega_s}.$$

Численное решение этих уравнений показало [12], что величина $\delta_s \equiv \delta$ имеет устойчивое распределение $P(\delta)$, график которой хорошо аппроксимируется функцией $P(\delta) = 1/(|1 - 2\delta| + 1) \ln 2$. Аналитические исследования показали, что задача может быть решена с помощью введения цепной дроби с обратной последовательностью знаменателей $x_s^- = 1/(k_{s-1} + 1/(k_{s-2} + 1/(k_{s-3} + \dots$. Оказывается, что совместное распределение вероятностей x_s^+ и x_s^- задаётся формулой $P(x^+, x^-) = 1/(1 + x^+ x^-)^2 \ln 2$, с помощью которой исходная задача решается точно и подтверждает, что выше приведённая аппроксимирующая функция является решением задачи, причём точным решением.

Это пример показателен тем, что аккуратное решение задачи может привести к открытию точного результата [12]. В своё время он существенно изменил отношение теоретиков к работам по вычислительной физике.

3. Методы Монте-Карло

Как отмечалось во введении, уже на заре применения ЭВМ для решения физических задач был разработан метод Монте-Карло для решения задач статистической физики. Само название указывает на то, что в методе используется случайность (например, при выборе значения случайной величины из определённого распределения). На ЭВМ выполняются строго детерминированные алгоритмы, поэтому случайность достичь невозможно в ходе выполнения программы. Напрашиваются два подхода, оба из которых применялись с первых дней использования ЭВМ: алгоритмический подход по генерации псевдослучайной последовательности и подход по использованию внешнего источника настоящего шума. В первом подходе поначалу применялся метод середины квадрата, предложенный фон Нейманом. Целое число из n бит возводится в квадрат. В общем случае получается $2n$ бит, из которых крайние $n/2$ бит отбрасываются, а средние n бит используются как следующее псевдослучайное число. Довольно скоро обнаружилось, что этот метод не даёт последовательности, удовлетворяющей интуитивно ожидаемой случайности. По сути, алгоритмы генерации случайного числа задают некоторое отображение некоторого количества равномерно распределённых точек единичного отрезка в себя. То есть алгоритм генерации случайного числа эквивалентен некоторой динамической системе на множестве рациональных чисел единичного отрезка. Памятуя урок первого вычислительного эксперимента Ферми, Паста и Улама по стохастизации, не следует удивляться тому, что разработка алгоритмических методов генерации псевдослучайных чисел является серьёзной научной проблемой, требующей специального внимания. В настоящем докладе мы не будем специально обсуждать эту проблему, поскольку она скорее математическая, и отошлём читателя за деталями обсуждения проблемы к нашим работам [13–15]. Второй способ состоит в использовании устройства, генерация случайности в котором основана на физическом принципе. Недавно предложен, например, метод оцифровывания флуктуирующей интенсивности хаотического полупроводникового лазера [16].

Мы уделим внимание в этом разделе методике численного анализа моделей статистической физики. При этом основная цель численного анализа моделей состоит в проверке теоретических гипотез и предсказаний.

3.1. Двумерная модель Изинга с примесями

Вопрос о влиянии примесей на критическое поведение систем является одним из наиболее интересных как с теоретической, так и с практической точек зрения. Критическое поведение двумерной модели Изинга было исследовано точно Онзагером в одной из наиболее красивых теоретических работ [17], опубликованной в 1944 г. В начале 1980-х годов братья Владимир и Виктор Доценко обнаружили, что критическое поведение теплоёмкости модифицируется логарифмической поправкой [18]. В течение длительного времени их теория была предметом интенсивных обсуждений с противоречивыми утверждениями. Было решено провести интенсивные численные исследования.

3.2. Специализированные процессоры SPP-1 и SPP-2

В 1980-е годы мощности суперкомпьютеров не было достаточно для численного исследования тонкого логарифмического поведения. Группой сотрудников Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау (ИТФ) были построены два специализированных процессора для атаки столь сложной на то время проблемы.

В 1990 г. был построен процессор [19], реализующий метод Монте-Карло с алгоритмом Метрополиса [6] и генератором псевдослучайных чисел типа сдвигового регистра R250 [20]. Был применён метод программирования с помощью паяльника. Алгоритм был проанализирован, сформулирован в виде логических операций над целыми числами и операций записи и чтения памяти. В результате удалось реализовать идеальную по эффективности архитектуру ЭВМ — все операции одного шага Монте-Карло выполнялись за один цикл памяти. Это позволило превзойти производительность суперкомпьютера Cray 1. Однако методические ошибки, связанные с порядком использования случайных чисел, не позволили получить сколь-либо значимых результатов.

В 1994 г. был построен второй специализированный процессор [21], в котором был впервые реализован кластерный метод Монте-Карло, позволяющий избежать явления критического замедления, свойственного методу Метрополиса. С помощью этого процессора было исследовано критическое поведение намагниченности, магнитной восприимчивости и теплоёмкости с достаточной точностью для уверенного подтверждения логарифмических поправок ко всем упомянутым величинам [22]. Результаты можно интерпретировать следующим образом. Корреляционная длина чистой модели Изинга $\xi \propto 1/|\tau|$, где $\tau = (T - T_c)/T$ — приведенная температура, модифицируется примесями таким образом

$$\xi \propto \frac{\sqrt{1 + (4/\pi)g_0 \ln(1/|\tau|)}}{|\tau|}.$$

При этом термодинамические величины, такие как намагниченность, восприимчивость и теплоёмкость, имеют одинаковую функциональную зависимость от корреляционной длины как в чистой модели, так и в примесной модели.

Применение специализированного процессора за счёт высокой производительности, по мощности превосходящей суперкомпьютер Cray 2, позволило впервые исследовать численно корреляционную функцию как чистой, так и примесной модели Изинга [23] в полном соответствии с упомянутой выше интерпретацией.

Таким образом, применение специализированной вычислительной техники позволило закрыть длительно существовавшую проблему проверки наличия логарифмических поправок к термодинамическим функциям двумерной модели Изинга с примесями.

3.3. Центральный заряд модели Изинга с примесями

Для модели Изинга с примесными немагнитными узлами Плечко [24] вычислил (см. также работу [25]) зависимость центрального заряда теории $g = 4,843q/(1-q)$, где q — концентрация примесных узлов. Центральный заряд входит в зависимость магнитной восприимчивости в критической области от приведенной температуры $\tau = (T - T_c)/T$ как коэффициент

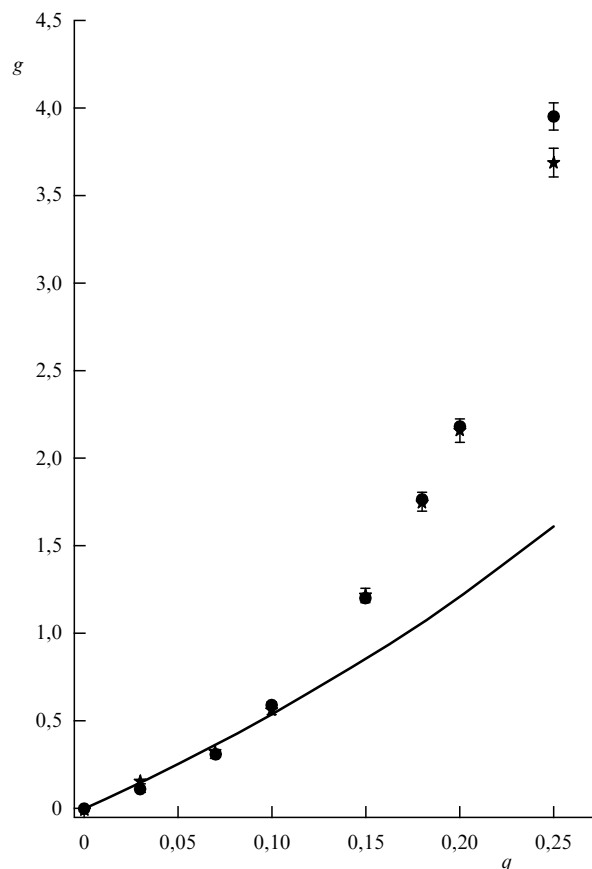


Рис. 1. Значение центрального заряда g в зависимости от концентрации примесей q . Линия — теоретическое предсказание Плечко [24]. Крестики (звёздочки) соответствуют аппроксимации численных данных для восприимчивости в низкотемпературной (высокотемпературной) области.

перед логарифмом

$$\chi(\tau) = \Gamma |\tau|^{-7/4} (1 + 0,07790315\tau)(1 - g \ln |\tau|)^{7/8}.$$

Аппроксимируя численные данные для зависимости магнитной восприимчивости от температуры этим выражением, можно получить значения двух параметров, амплитуды Γ и центрального заряда g . На рисунке 1 сплошной линией показана теоретическая зависимость центрального заряда, а также результаты аппроксимации магнитной восприимчивости по обе стороны критической точки. Обе аппроксимации дают совпадающие в пределах погрешности значения центрального заряда. При этом оба они совпадают с теоретическим предсказанием вплоть до значения концентрации примесей $q \approx 0,1$. Это значение можно оценить следующим образом. В дополнение к двум масштабам чистой модели Изинга, корреляционной длине $\xi \propto 1/|\tau|$ и размеру системы L , примесная модель имеет ещё два масштаба, среднее расстояние между примесями $l_i \propto \exp(-1/g)$ [18] и перколяционную длину $\xi_p \propto (q_c - q)^{4/3}$ [26]. Интересно, что эти две последние длины совпадают при значении $q \approx 0,1$. Физически это можно интерпретировать так, что размер кластера из немагнитных примесей достигает среднего расстояния между примесями, после чего примеси нельзя считать независимыми, т.е. беспорядок уже не слабый.

3.4. Трёхмерная модель Изинга и специализированные процессоры

Попытки точного решения трёхмерной модели Изинга пока не привели к успеху. Исследования проводятся приближёнными аналитическими методами и с помощью методов численного моделирования. Для проверки теоретических гипотез необходимы оценки критической температуры и критических индексов. Численные методы моделирования трёхмерной модели Изинга аналогичны тем, которые обсуждались выше для двумерной модели. Оценка критических индексов с помощью ренорм-групповых методов [27] $y_t = 1,587(4)$ и $y_h = 2,485(2)$ даёт значения с меньшей точностью, чем, например, полученные с помощью численного анализа высокотемпературных рядов [28] $y_t = 1,5869(4)$ и $y_h = 2,48180(15)$. Ранние оценки с помощью метода Монте-Карло [29] $y_t = 1,590(2)$ и $y_h = 2,482(7)$ находились в не очень хорошем согласии с предсказаниями аналитической ренормгрупповой теории.

В середине 1990-х годов сотрудниками ИТФ совместно с Х. Блете из университета в Дельфте был разработан кластерный процессор для исследования трёхмерной модели Изинга [30]. Был реализован однокластерный алгоритм Вольфа, с успехом ранее использованный нами в реализации процессора для исследования примесной модели Изинга [21]. Для генерации случайных чисел был разработан программируемый блок, который позволял реализовывать алгоритмы генератора типа сдвиговый регистр длиной до 16384. Каждый процессор имеет два таких блока (на рис. 2 слева сверху в два слоя), работающих параллельно, причём случайное число получается в результате операции сложения по модулю 2. Такой приём позволяет избежать практически наблюдаемых систематических ошибок [13, 31]. Спиновая память содержит 16777216 спинов, граничные условия программируемые. Всего было изготовлено 12 процессоров, которыми управляли три сервера. Полученные с их помощью оценки критической температуры трёхмерной модели Изинга и значений критических индексов [32] $y_t = 1,5865(14)$ и $y_h = 2,4814(5)$ и критической температуры $1/T_c = 0,62358(15)$ являются рекордными по точности расчётами методом Монте-Карло до настоящего времени.

3.5. Критическая перколяция

В 1995 г. Айзенман [33] на конференции по статистической физике высказал гипотезу о том, что в критической перколяции вероятность наблюдения двух бесконечных протекающих кластеров конечна в термодинамическом пределе. Этот факт противоречил интуиции. Однако численное моделирование показало, что на самом деле это имеет место, хотя это и относительно редко наблюдаемое событие. Например, из тысячи квадратных образцов *бесконечного* линейного размера в среднем 13 образцов имеют два протекающих кластера. Из одного миллиона образцов три образца имеют три протекающих кластера. Нами были проведены численные эксперименты, в которых для каждого размера образца было сгенерировано по 100 миллионов кластеров, и был рассмотрен предел решёток бесконечного размера. Полученные численные оценки были опубликованы [34] до аналитического решения проблемы Джоном Карди [35]. Совпадение оценок и аналитического решения оказалось весьма хорошим.

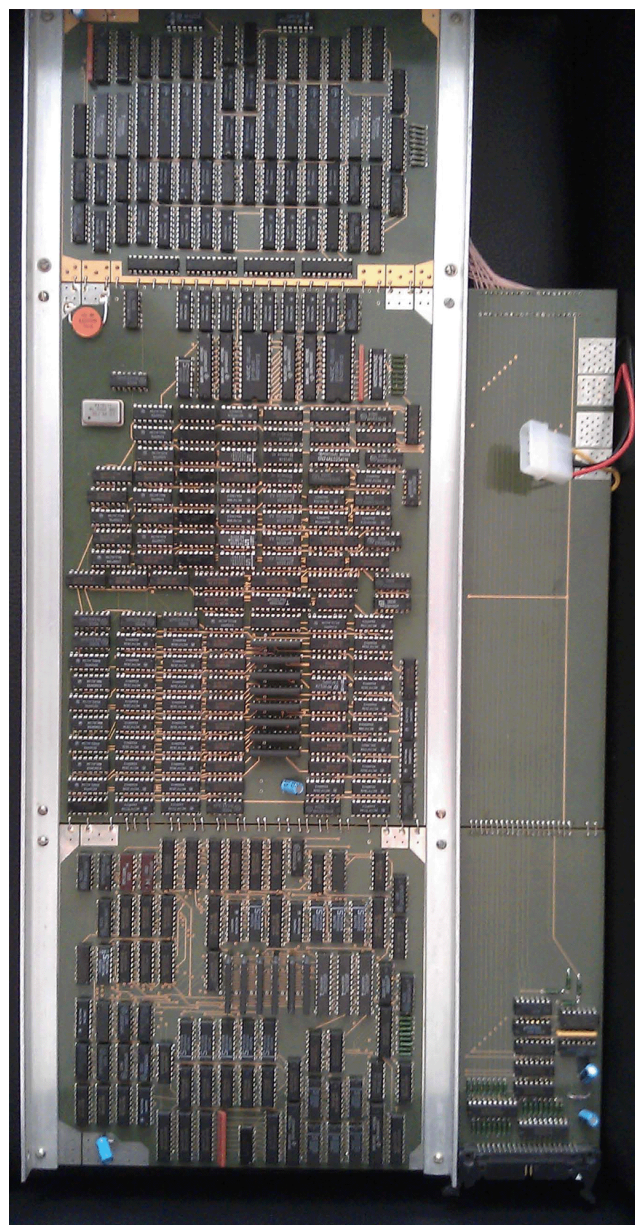


Рис. 2. Фотография платы одного из специализированных процессоров для численного исследования трёхмерной модели Изинга. Слева сверху вниз: блок генератора случайных чисел, блок однокластерного алгоритма, память спинов. Справа: блок ввода/вывода с разъёмами подключения к серверной ЭВМ.

Проведённое позднее моделирование критической перколяции [36] подтвердило полную гипотезу Айзенмана по зависимости критического индекса множественности протекания кластеров ζ_d от размерности пространства $2 < d < 6$: $\zeta_d = d/(d-1)$.

3.6. Дуальность критических интерфейсов

Критические кластеры являются фрактальными объектами [37]. Конформная теория поля [38] даёт предсказание для критических индексов двумерных объектов [39]. На основе этой теории можно вычислить фрактальные размерности критических кластеров двумерных моделей Поттса, $O(N)$ модели и т.п. Метод аналитического вычисления фрактальной размерности границ таких кластеров (так называемых критических интерфейсов) был развит сравнительно недавно [40], и уже получены

точные результаты для некоторых моделей [41]. В то же самое время Дуплантье высказал гипотезу о дуальности критических интерфейсов [42], основанную на некоторых качественных рассуждениях и аналогиях.

Проверка гипотезы дуальности критических интерфейсов с помощью численного эксперимента требует идентификации интерфейсов на решётке. Как показал анализ [43] численных результатов для моделей Поттса с числом компонент от 1 до 4 (причём не только целых!), дуальными являются границы кластеров двух типов. Первый — это геометрический кластер, который состоит из соседних спинов, имеющих один и тот же цвет. Второй — это кластер Фортуина–Кастеляйна, который содержит меньше спинов и является более разреженным, чем геометрический кластер, поскольку некоторые ближайшие спины разориентированы (нескоррелированы) в силу воздействия теплового резервуара. Их определение на медиальной решётке даётся однозначно и чётко алгоритмизируется [43]. В литературе по случайным фрактальным кластерам обсуждалось много вариантов определения границ кластеров на решётке. По сути, все они сводятся к упомянутым выше границам двух кластеров.

3.7. Критические амплитуды

Кратко упомяну весьма активно развивающееся в последние годы направление по вычислению универсальных соотношений критических амплитуд. Эта область требует отдельного обзора. Краткий обзор современного состояния численных исследований можно найти в работе [44].

3.8. Задача случайного роста за счёт диффузии

Задача роста структур за счёт диффузии хорошо определена в двумерном случае. Её можно сформулировать как случайное блуждание в бесконечной плоскости с прилипанием частицы к растущему зародышу. Вероятность ухода частицы на бесконечность нулевая, т.е. частица за время случайного блуждания (которое может быть сколь угодно велико) в конечном счёте коснётся границы кластера, за счёт чего он вырастет на одну частицу. Такая постановка позволяет построить алгоритм, при котором точность соблюдения граничных условий может быть сколь угодно хороша. Это важно, поскольку такое блуждание описывается решением двумерного уравнения Лапласа с двумя граничными условиями: на границе растущего кластера и на бесконечности, и известно, что такое решение может приводить к взрывной неустойчивости. В работе [45] был предложен алгоритм, точно реализующий такие граничные условия для моделирования случайной агрегации за счёт диффузии (в англоязычной литературе DLA — diffusion limited aggregation [46]).

Для получения фрактальной размерности таких кластеров требуется анализ большого количества кластеров с большими размерами. Такое моделирование можно с успехом провести на специально построенном для такого круга задач вычислительном кластере, каждый узел которого обладает большой оперативной памятью (по 4 гигабайта на одну нить), что позволяет всю расчётную структуру кластера до миллиарда частиц держать в памяти. При каждом значении параметра было построено по тысяче кластеров размером по сто миллионов частиц в каждом. Анализ таких кластеров с помощью специально разработанного метода пробных

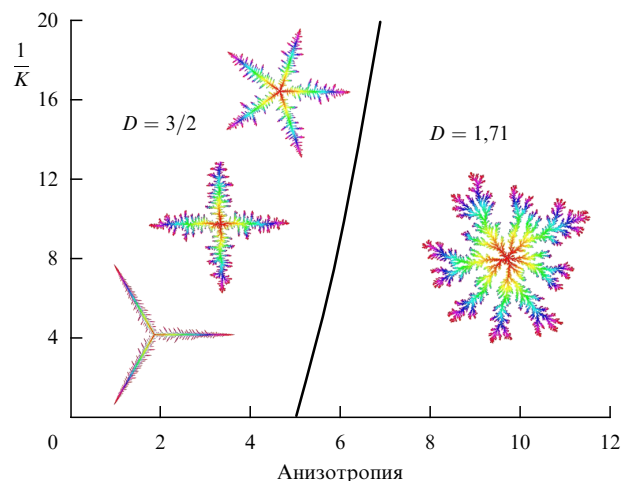


Рис. 3. Морфологическая диаграмма роста случайных структур за счёт диффузии. Горизонтальная ось — симметрия внешнего кристаллического поля. Вертикальная ось — обратный коэффициент адгезии частиц. Сплошная линия — линия фазового перехода первого рода. D — значения фрактальной размерности кластеров в термодинамическом пределе.

частиц [47] позволил построить морфологическую гистограмму, показанную на рис. 3 и качественно описывающую фазовый переход первого рода между кластерами с симметрией и случайными кластерами в плоскости двух параметров — коэффициента адгезии и симметрии внешнего кристаллического поля (например, кристаллической подложки, на которой происходит диффузия) [48].

Исследование вероятности роста построенных кластеров позволило опровергнуть гипотезу о мультискейлинге кластеров случайного роста в рамках теории DLA и обнаружить масштабно инвариантную форму вероятности присоединения частиц к кластеру [49].

4. Заключение

Приведённые примеры убедительно показывают, что вычислительная физика может быть с успехом применена для проверки теоретических гипотез и предсказаний в различных областях физики.

В ряде случаев оказывается весьма успешным применение специализированных вычислительных устройств. Следует при этом отметить, что повышенный уровень специализации ведёт к созданию устройств, полезность которых для научных исследований ограничена во времени при относительно высоких затратах интеллектуального труда. Хотя их применение во времени ограничено 5–6 годами, в течение которых они превосходят мощность других вычислительных систем, они могут привести к получению научных результатов за счёт значительного опережения во времени возможностей других подходов.

Международный союз физиков IUPAP (International Union of Pure and Applied Physics) в 1996 г. основал комиссию по вычислительной физике C20 [50]. Её задача состоит в ежегодном проведении конференций по вычислительной физике. Конференция проводится поочерёдно в трёх географических секторах — Северной и Южной Америке, Азии и Океании, Европе и Африке. В следующем, 2013 году конференция будет проводиться Российской академией наук в Москве, что даст возмож-

ность российским учёным представить международной общественности свои достижения в области вычислительной физики.

Автор благодарен Министерству образования и науки РФ за поддержку работы по государственному контракту 07.514.11.4032.

Список литературы

1. Fermi E, Pasta J, Ulam S "Studies of nonlinear problem", Los Alamos Sci. Lab. Rep. LA-1940 (Los Alamos: Los Alamos Sci. Lab., 1955)
2. Harlow F H, Metropolis N "Computing & computers: Weapons simulation leads to the computer era" *Los Alamos Science* (Winter/Spring) 132 (1983); <http://library.lanl.gov/cgi-bin/getfile?07-15.pdf>
3. Zabusky N J, Kruskal M D *Phys. Rev. Lett.* **15** 240 (1965)
4. Gardner C S et al. *Phys. Rev. Lett.* **19** 1095 (1967)
5. Захаров В Е и др. *Теория солитонов: метод обратной задачи рассеяния* (М.: Наука, 1980)
6. Metropolis N et al. *J. Chem. Phys.* **21** 1087 (1953)
7. Манаков С В, Щур Л Н *Письма в ЖЭТФ* **37** 45 (1983) [Manakov S V, Shchur L N *JETP Lett.* **37** 54 (1983)]
8. Poincaré H *Les méthodes nouvelles de la mécanique céleste* (Paris: Gauthier-Villars et fils, 1899) [*New Methods of Celestial Mechanics* (Washington: NASA, 1960); Пуанкаре А *Избранные труды* Т. 1 *Новые методы небесной механики* (М.: Наука, 1971)]
9. Николаевский Е С, Щур Л Н *Письма в ЖЭТФ* **36** 176 (1982) [Nikolaevskii E S, Shchur L N *JETP Lett.* **36** 218 (1982)]
10. Белинский В А, Лифшиц Е М, Халатников И М *УФН* **102** 463 (1970) [Belinskii V A, Lifshitz E M, Khalatnikov I M *Sov. Phys. Usp.* **13** 745 (1971)]
11. Лифшиц Е М, Лифшиц И М, Халатников И М *ЖЭТФ* **59** 322 (1970) [Lifshitz E M, Lifshitz I M, Khalatnikov I M *Sov. Phys. JETP* **32** 173 (1971)]
12. Лифшиц Е М и др. *Письма в ЖЭТФ* **38** 79 (1983) [Lifshitz E M et al. *JETP Lett.* **38** 91 (1983)]
13. Shchur L N *Comput. Phys. Commun.* **121**–**122** 83 (1999)
14. Barash L, Shchur L N *Phys. Rev. E* **73** 036701 (2006)
15. Barash L Yu, Shchur L N *Comput. Phys. Commun.* **182** 1518 (2011)
16. Reidler I et al. *Phys. Rev. Lett.* **103** 024102 (2009)
17. Onsager L *Phys. Rev.* **65** 117 (1944)
18. Dotsenko Vik S, Dotsenko V S *Adv. Phys.* **32** 129 (1983)
19. Талапов А Л, Андрейченко В Б, Доценко Вл С, Щур Л Н *Письма в ЖЭТФ* **51** 161 (1990) [Talapov A L, Andreichenko V B, Dotsenko V I S, Shchur L N *JETP Lett.* **51** 182 (1990)]
20. Kirkpatrick S, Stoll E P *J. Comput. Phys.* **40** 517 (1981)
21. Talapov A L, Shchur L N, Andreichenko V B, Dotsenko V I S *Mod. Phys. Lett. B* **6** 1111 (1992)
22. Talapov A L, Shchur L N *J. Phys. Condens. Matter* **6** 8295 (1994)
23. Talapov A L, Shchur L N *Europhys. Lett.* **27** 193 (1994)
24. Plechko V N *Phys. Lett. A* **239** 289 (1998)
25. Andreichenko V B et al. *Nucl. Phys. B* **344** 531 (1990)
26. Shchur L N, Vasilyev O A *Phys. Rev. E* **65** 016107 (2002)
27. Le Guillou J C, Zinn-Justin J *J. Physique* **48** 19 (1987)
28. Campostrini M et al. *Phys. Rev. E* **65** 066127 (2002)
29. Landau D P *Physica A* **205** 41 (1994)
30. Talapov A L, Blöte H W J, Shchur L N *Письма в ЖЭТФ* **62** 157 (1995) [*JETP Lett.* **62** 174 (1995)]
31. Shchur L N, Blöte H W J *Phys. Rev. E* **55** R4905 (1997)
32. Blöte H W J, Shchur L N, Talapov A L *Int. J. Mod. Phys. C* **10** 1137 (1999)
33. Aizenman M, in *Statphys 19. Proc. of the 19th IUPAP Intern. Conf. on Statistical Physics, Xiamen, China, July 31 – August 4, 1995* (Ed. H Bai-Lin) (Singapore: World Scientific, 1996)
34. Shchur L N, Kosyakov S S *Int. J. Mod. Phys. C* **8** 473 (1997)
35. Cardy J J *Phys. A Math. Gen.* **31** L105 (1998)
36. Shchur L N, Rostunov T *Письма в ЖЭТФ* **76** 553 (2002) [*JETP Lett.* **76** 475 (2002)]
37. Mandelbrot B B *Physica A* **191** 95 (1992)
38. Belavin A A, Polyakov A M, Zamolodchikov A B *Nucl. Phys. B* **241** 333 (1984)
39. Dotsenko V I S, Fateev V A *Nucl. Phys. B* **240** 312 (1984)
40. Schramm O *Isr. J. Math.* **118** 221 (2000)
41. Smirnov S, in *Proc. of the Intern. Congress of Mathematicians (ICM), Madrid, Spain, August 22–30 Vol. II* (Helsinki: The European Mathematical Soc., 2006) p. 1421; http://www.icm2006.org/proceedings/Vol_II/contents/ICM_Vol_2_68.pdf
42. Duplantier B *Phys. Rev. Lett.* **84** 1363 (2000)
43. Zatelepin A, Shchur L, arXiv:1008.3573
44. Shchur L N, Janke W *Nucl. Phys. B* **840** 491 (2010)
45. Menshutin A Yu, Shchur L N *Phys. Rev. E* **73** 011407 (2006)
46. Witten T A (Jr.), Sander L M *Phys. Rev. Lett.* **47** 1400 (1981)
47. Menshutin A Yu, Shchur L N, Vinokur V M *Phys. Rev. E* **75** 010401(R) (2007)
48. Menshutin A Yu, Shchur L N *Comput. Phys. Commun.* **182** 1819 (2011)
49. Menshutin A *Phys. Rev. Lett.* **108** 015501 (2012)
50. Commission on Computational Phys. (C20), <http://www.iupap.org/commissions/c20/members/index.html>