



НАНОСТРУКТУРЫ

математическая физика и моделирование



Nanostructures. Mathematical physics & modelling

НАНОСТРУКТУРЫ

математическая физика и моделирование

Nanostructures.
Mathematical Physics & Modelling

2016, volume 15(2)

Наноструктуры. Математическая физика и моделирование

Редколлегия:

И.В. Волович, **В.Л. Голо**, В.В. Гусаров, П.Н. Дьячков, Р.Г. Ефремов,
М.В. Карасев (*зам. главного редактора*), Ю.Е. Лозовик, М.А. Мазо,
В.П. Маслов (*главный редактор*), А.В. Махиборода (*ответственный секретарь*),
А.Ю. Морозов, С.А. Никитов, Р.А. Сурис, **А.Н. Тихонов**,
В.А. Тулин, В.Е. Фортов, А.С. Холево, А.Р. Хохлов, А.В. Чаплик,
Л.А. Чернозатонский, К.В. Шайтан

Электронная версия журнала размещается на сайте
<http://nano-journal.ru>

Адрес редакции:

123458, Москва, ул. Таллинская, д. 34, каб. 429
+7 (495) 916-88-76
nanostructures@hse.ru

Москва

© 2016, Европейский центр по качеству

Содержание

Е.В. Выборный

**О методе ВКБ для разностных уравнений: вейлевский символ
и фазовая геометрия** 5

Н.А. Дюжев, Е.Э. Гусев, М.А. Махиборода, М.В. Катеев, К.В. Понкратов

**Математическое моделирование и исследование условий работы
датчика потока мембранного типа** 20

Н.А. Дюжев, М.А. Махиборода, Т.А. Грязнева, Е.А. Агарков, Г.Д. Демин

**Моделирование влияния масштабирования технологических норм
на электрические и частотные характеристики планарного
автоэмиссионного триода с лезвийным полевым эмиттером** 39

О.В. Кравченко

**Моделирование пространственно локализованных пылевых структур
в комплексной плазме** 51

А.Ф. Лихоносова, А.О. Чугунов, Р.Г. Ефремов

**Структурно-динамическое поведение пептида α -гарпинина
Tk-hefu2 в воде по данным компьютерного моделирования** 63

Е.М. Новикова

**Спектральные кластеры планарной ловушки Пеннинга
с резонансным нарушением аксиальной симметрии** 75

Информация и правила для авторов 99

Contents

E.V. Vybornyi On the WKB method for difference equations: Weyl symbol and the phase geometry	5
N.A.Djuzhev, E.E. Gusev, M.A. Makhaboroda, M.V. Kateev, K.V. Ponkratov Mathematical modeling and study of operation conditions of membrane type flow sensor	20
N.A. Diuzhev, M.A. Makhaboroda, T.A. Gryazneva, E.A. Agarkov1, G.D. Demin The simulation of scaling topological design rules impact on electrical and frequency characteristics of planar field-emission triode with the edge field emitter	39
O.V. Kravchenko Simulation of spatially localized dusty plasma structures in complex plasma	51
A.F. Lihonosova, A.O. Chugunov, R.G. Efremov Structure and dynamics of α-hairpinin peptide Tk-hefu2 in water: computer simulations	63
E.M. Novikova Spectral clusters in planar Penning trap with resonance breaking of axial symmetry	75
The information and rules for authors	99

О МЕТОДЕ ВКБ ДЛЯ РАЗНОСТНЫХ УРАВНЕНИЙ: ВЕЙЛЕВСКИЙ СИМВОЛ И ФАЗОВАЯ ГЕОМЕТРИЯ

Е.В. Выборный

*Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”,
Лаборатория “Математические методы естествознания”, Москва, Россия*

evgeniy.bora@gmail.com

Поступила 11.07.2016

В работе рассматривается задача о построении асимптотик решений разностных (рекуррентных) уравнений с медленно меняющимися коэффициентами. Как известно, в этом случае локальная асимптотика решений строится по аналогии с ВКБ приближением для линейных дифференциальных уравнений. В отличие от непрерывного случая, одним из существенных препятствий для широкого применения дискретного метода ВКБ является отсутствие геометрической интерпретации полученных асимптотических формул. В работе показано, что если рассматривать разностное уравнение, как псевдодифференциальное и ввести соответствующий вейлевский гамильтониан, то можно построить простую геометрическую интерпретацию локальных асимптотик, точек поворота, правила Бора-Зоммерфельда и других базовых элементов квазиклассического приближения.

УДК 517.9

1 Введение

Широко известно, что существует полное соответствие между методами построения решений для однородных линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами и методами построения решений для аналогичных разностных уравнений

$$\sum_{k=0}^n a_k y_{m+k} = 0, \quad (1)$$

где n — порядок уравнения ($a_0, a_n \neq 0$), а m — целочисленная переменная (см., например, обзор в книгах [1–3]). При построении решений ключевую роль играет характеристический многочлен:

$$P(\lambda) = \sum_{k=0}^n a_k \lambda^k. \quad (2)$$

Например, в случае, когда все корни λ_k , $k = 1, \dots, n$, характеристического многочлена $P(\lambda)$ различны, общее решение разностного уравнения имеет простой вид:

$$y_m = C_1 e^{i\varphi_1 m} + \dots + C_n e^{i\varphi_n m}, \quad e^{i\varphi_k} = \lambda_k.$$

В настоящей работе рассматриваются разностные уравнения вида (1), где коэффициенты не являются постоянными $a_k = a_k(m)$, но медленно меняются в зависимости от m . В этом случае для разностного уравнения можно построить дискретный аналог метода ВКБ, хорошо разработанного для непрерывного случая. Тогда фундаментальная система решений может быть составлена из решений вида:

$$y_m = e^{i\Phi(m)},$$

где показатель экспоненты $\Phi(m)$ в главном определяется из уравнения

$$e^{i\Phi'(m)} = \lambda_k(m)$$

для одного из корней $\lambda_k(m)$ характеристического многочлена (2).

Общие идеи и строгое обоснование дискретного метода ВКБ, насколько нам известно, впервые появились в работе [4] для систем разностных уравнений, когда все корни характеристического многочлена различны. Затем в [5] была представлена асимптотика фундаментальной системы решений при наличии простой точки поворота, то есть в случае, когда пара корней характеристического многочлена вырождается для некоторого фиксированного m_0 . Данные результаты в несколько иной форме были открыты заново в работах [6, 7], см. также [8, 9]. Заметим, что в работе [7] вопрос о поведении решения вблизи простой точки поворота был исследован значительно полнее, чем в [5]: так, в [7] была построена равномерная асимптотика фундаментальной системы решений на большом промежутке, содержащем одну простую точку поворота, а в работе [5] рассматривалась лишь малая окрестность точки поворота.

Дискретный метод ВКБ успешно применяется в различных областях математики, например, в задачах построения асимптотики зонного спектра для уравнения Хилла (см. обзор в [10, 11]), в задачах о построении асимптотик семейств ортогональных полиномов (см. обзор в [7, 12, 13]), или в теории узлов [8].

Дискретный метод ВКБ также нашел широкое применение в различных задачах квантовой механики, см. обзор в [14]. Мы отметим в первую очередь работы П.А. Брауна [14–16] (см. также ссылки в [14]), в которых дискретный метод ВКБ был развит для эрмитовых трехчленных рекуррентных соотношений и применялся в различных задачах квантовой механики. Стоит отметить также серию работ А. Гарга (A. Garg) [17–21] по спиновому туннелированию, где возникает необходимость рассматривать разностные уравнения более высоких порядков.

В работах Брауна теория дискретного метода ВКБ была развита для трехчленного рекуррентного уравнения

$$a_1(m)y_{m+1} + a_0(m)y_m + a_{-1}(m)y_{m-1} = 0, \quad (3)$$

в предположении, что коэффициенты $a_i(m)$ являются действительными и уравнение (3) является эрмитовым, то есть $\overline{a_1(m)} = a_{-1}(m+1)$. В этом случае уравнение (3) можно интерпретировать как матричное уравнение с симметричной трехдиагональной бесконечной матрицей (якобиева матрица).

Эрмитовы трехчленные действительные разностные уравнения наиболее часто встречаются в различных задачах и являются простейшей моделью для применения дискретного метода ВКБ. В работах Брауна [14, 15] были в явном виде представлены правила согласования ВКБ решений с разных сторон от простой точки поворота и аналог правила дискретизации энергетических уровней Бора-Зоммерфельда для уравнения (3).

С другой стороны, в приложениях также часто встречается случай разностных уравнений высшего порядка и уравнений с комплексными коэффициентами a_i . Отметим, что даже при рассмотрении простейшего трехчленного уравнения (3) возникают простые точки поворота двух различных типов и простые выкладки, свойственные непрерывному методу ВКБ, существенно усложняются. Так, например, правило дискретизации Бора-Зоммерфельда, представленное в [14], имеет четыре возможных варианта, в зависимости от комбинации типов точек поворота. Как показано в работе [19], для уравнений высших порядков возникают новые типы простых точек поворота, которые требуют дополнительного анализа.

Подобное усложнение теории, по сравнению с непрерывным случаем, во многом связано с потерей простой геометрической интерпретации результатов дискретного метода ВКБ в терминах класси-

ческой гамильтоновой механики. Данная проблема также существенно затрудняет качественный физический анализ полученных результатов (см. обсуждение в [17]). В работах Брауна и Гарга предлагались различные варианты формально сопоставлять классический Гамильтониан $H(x, p)$ с соответствующим разностным уравнением, но данные подходы не были развиты.

В данной работе показано, что разностному уравнению можно естественным образом сопоставить классический гамильтониан $H(x, p)$, если рассматривать его как псевдодифференциальное уравнение и ввести соответствующий вейлевский символ. Тогда локальные ВКБ асимптотики решений разностного уравнения приобретают стандартный ВКБ вид:

$$\frac{c}{\sqrt{v}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p dx\right), \quad (4)$$

где $v = \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}$ — классическая скорость. Простую геометрическую интерпретацию приобретают также точки поворота, правило Бора-Зоммерфельда и другие базовые элементы квазиклассического приближения.

Во втором разделе данной работы представлены явные формулы для гамильтониана $H(x, p)$ в случае эрмитового разностного уравнения (см. (9)). Доказано, что в случае отсутствия точек поворота решения разностного уравнения имеют асимптотику вида (4).

Далее (см. раздел 3) в работе детально рассмотрен случай уравнения второго порядка. Построены явные формулы для асимптотик решения уравнений (теорема 3.1). Представлена асимптотика решения в окрестности простой точки поворота и правила согласования ВКБ асимптотик с разных сторон от точки поворота (см. раздел 4). Представлено правило дискретизации Бора-Зоммерфельда в инвариантной форме, вне зависимости от типов точек поворота (теорема 5.1).

2 Классический гамильтониан и локальная асимптотика решений

Существенным условием применимости дискретного метода ВКБ является предположение, что коэффициенты уравнения (1), хотя и не являются постоянными, но медленно меняются при изменении целочисленной переменной m . Тогда можно считать, что в задаче присутствует малый параметр $\hbar > 0$ и коэффициенты a_k являются функциями “медленной” переменной $x = \hbar m$.

Предположим, что $a_k = a_k(x, \hbar)$ — гладкие функции при $x = \hbar m \in I$ и $0 < \hbar < \hbar_0$, где I — некоторый фиксированный отрезок действительной оси. Тогда, обозначив $y_m = y(\hbar m) = y(x)$, можно переписать разностное уравнение в виде:

$$\sum_{k=0}^n a_k(x, \hbar) y(x + \hbar k) = 0. \quad (5)$$

Уравнение (6) называют $\hbar$ -разностным уравнением [6–8] или уравнением с малым запаздыванием [4].

Мы предполагаем, что $y(x)$ является гладкой функцией непрерывной переменной x , но уравнение (5) рассматривается не для любых $x \in I$, а только при $x = \hbar m \in I$, где m — некоторое целое число. Данное ограничение позволяет говорить о конечной фундаментальной системе решений уравнения (5).

В дальнейшем, для простоты, мы будем рассматривать задачу только для эрмитового разностного уравнения

$$\sum_{k=-n}^n a_k(x, \hbar) y(x + \hbar k) = 0, \quad (6)$$

где условие эрмитовости имеет вид:

$$\overline{a_k(x, \hbar)} = a_{-k}(x + \hbar k, \hbar), \quad k = 0, \dots, n. \quad (7)$$

В этом случае уравнение (6) можно интерпретировать как матричное уравнение с бесконечной эрмитовой матрицей.

Введя операторы координаты $\hat{x} = x$ и импульса $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ и учитывая, что

$$e^{i\hat{p}} y(x) = y(x + \hbar),$$

уравнение (6) можно записать в операторном виде:

$$\hat{H}y(x) = 0, \quad \hat{H} = \sum_{k=-n}^n a_k(x, \hbar) e^{ik\hat{p}}. \quad (8)$$

Идея рассмотрения разностных уравнений с точки зрения операторных методов была представлена, например, в [22].

Несложно видеть, что условие эрмитовости уравнения (7) означает формальную самосопряженность оператора $\hat{H}$.

Существуют различные способы сопоставления классического гамильтониана $H(x, p)$ оператору $\hat{H}$, см., например, обзор в [23, 24]. Оказывается, что асимптотические формулы дискретного метода ВКБ приобретают наиболее простой вид, если в качестве классического гамильтониана выбрать вейлевский символ оператора $\hat{H}$, то есть символ, симметризованный по переменным x и p .

Предложение 2.1.

1. Вейлевский символ оператора $\hat{H}$ имеет вид:¹

$$H(x, p) = \sum_{k=-n}^n a_k \left(x - \frac{\hbar k}{2}, \hbar \right) e^{ikp}, \quad (9)$$

$H(x, p)$ — гладкая функция на цилиндре $I \times \mathbb{T}^1$.

2. Условие эрмитовости разностного уравнения (6) приобретает вид:

$$H(x, p) = \overline{H(x, p)},$$

то есть гамильтониан H должен быть действительной функцией.

3. Если коэффициенты a_k эрмитового разностного уравнения (6) действительны, то имеет место симметрия $H(x, -p) = H(x, p)$, и гамильтониан можно записать в виде разложения по косинусам:

$$H(x, p) = a_0(x, \hbar) + 2a_1 \left(x - \frac{\hbar}{2}, \hbar \right) \cos(p) + \dots + 2a_n \left(x - \frac{\hbar n}{2}, \hbar \right) \cos(np). \quad (10)$$

Доказательство. Воспользуемся известным (см. [23, 24]) операторным тождеством, отражающим связь вейлевского и упорядоченного квантования:

$$H \left(\overset{w}{\hat{x}}, \overset{w}{\hat{p}} \right) = H \left(\overset{2}{\hat{x}}, \overset{1}{\hat{p}} + \overset{3}{\hat{p}} \right),$$

где номера над операторами означают порядок их действия, а символ w означает вейлевскую симметризацию операторов. Тогда для символа (9) получаем:

$$H \left(\overset{w}{\hat{x}}, \overset{w}{\hat{p}} \right) = \sum_{k=-n}^n \exp \left(\frac{ik\hat{p}}{2} \right) a_k \left(\hat{x} - \frac{\hbar k}{2}, \hbar \right) \exp \left(\frac{ik\hat{p}}{2} \right) = \sum_{k=-n}^n a_k(\hat{x}, \hbar) \exp(ik\hat{p}) = \hat{H}.$$

Таким образом, вейлевский символ оператора $\hat{H}$ — это $H(x, p)$, что и требовалось доказать.

Второй пункт данного предложения является простым следствием того, что оператор $\hat{H}$ является самосопряженным, а вейлевский символ самосопряженных операторов является действительным [23].

Третий пункт данного предложения проверяется непосредственно. □

Заметим, что гамильтониан $H(x, p)$ является 2π -периодической функцией от импульса p . Фазовое пространство соответствующей классической гамильтоновой системы является цилиндром $I \times \mathbb{T}^1$, где x и p — координаты Дарбу.

¹Здесь и далее опущено явное обозначение зависимости гамильтониана H от малого параметра $\hbar$.

Подобный нестандартный вид гамильтониана приводит к ряду важных отличий по сравнению с привычным случаем $H = p^2/2 + V(x)$. Например, точки поворота, то есть точки, в которых скорость $v = \dot{x}$ равна нулю, определяемые из уравнений:

$$\frac{\partial H}{\partial p}(x, p) = 0, \quad H(x, p) = 0, \quad (11)$$

не обязательно соответствуют импульсу $p = 0$, а могут отвечать произвольному, в том числе и комплексному, импульсу p .

Будем говорить, что x_0 — точка поворота, если точка (x_0, p_0) является решением уравнений (11) для некоторого $p_0 \in \mathbb{C}$.

Уравнение

$$H(x, p) = 0, \quad (12)$$

определяет импульс p как многозначную комплексную функцию переменной x . В окрестности каждой точки, за исключением точек поворота, уравнение (12) определяет $2n$ различных гладких ветвей $p_1(x), \dots, p_{2n}(x)$, с точностью до сдвига на 2π . В случае уравнения с действительными коэффициентами (10) всегда можно считать, что $p_{k+n}(x) = -p_k(x)$.

В точках поворота возникает пересечение ветвей многозначной функции $p(x)$. Точку поворота называют простой, если в этой точке не равно нулю ускорение $\ddot{x}$:

$$\ddot{x} = \frac{d}{dt} \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{\partial^2 H}{\partial p^2} \dot{p} + \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial p} \dot{x} = -\frac{\partial^2 H}{\partial p^2} \frac{\partial H}{\partial x}.$$

Следовательно, точка поворота (x_0, p_0) является простой, если $H''_{pp}(x_0, p_0) \neq 0$ и $H'_x(x_0, p_0) \neq 0$. Тогда в окрестности точки поворота (x_0, p_0) гамильтониан H имеет вид:

$$H(x, p) = \frac{H''_{pp}(x_0, p_0)}{2} (p - p_0)^2 + H'_x(x_0, p_0) (x - x_0) + \dots$$

В таких точках происходит не более чем попарное пересечение ветвей импульса p .

Заметим, что гамильтониан $H(x, p)$, а следовательно, и ветви функции $p(x)$ зависят от малого параметра $\hbar$, для сокращения записи мы опускаем явное указание $\hbar$. Из условий гладкости следует, что справедливо асимптотическое разложение по $\hbar$:

$$p_k(x) = p_k^0(x) + \hbar p_k^1(x) + \dots$$

Известно, что в случае отсутствия точек поворота асимптотика решений уравнения (6) имеет ВКБ вид. Общая теорема была доказана в работе [6]. Для полноты изложения приведем формулировку соответствующей теоремы для эрмитового уравнения (6) в обозначениях, применяемых в настоящей работе.

Теорема 2.1 (О. Costin, R. Costin).

Пусть выполнены условия:

1. Коэффициенты $a_k(x, \hbar)$ являются гладкими функциями на $I \times [0, \hbar_0]$.
2. Уравнение (6) не является сингулярным, то есть

$$a_n(x, 0) \neq 0, \quad \forall x \in I.$$

3. На отрезке I отсутствуют точки поворота:

$$\inf_{x \in I} |p_k^0(x) - p_l^0(x)| > 0, \quad \forall k \neq l.$$

4. Ветви функции $p(x)$ можно упорядочить так, что

$$\operatorname{Im} p_{\sigma(1)}^0(x) \leq \operatorname{Im} p_{\sigma(2)}^0(x) \leq \dots \leq \operatorname{Im} p_{\sigma(2n)}^0(x), \quad \forall x \in I,$$

где σ — некоторая перестановка индексов $\{1, 2, \dots, 2n\}$.

Тогда существует $\hbar_1 \in (0, \hbar_0]$ и гладкие функции $\Phi_k(x, \hbar)$ на $I \times [0, \hbar_1]$ такие, что функции $y_k(x, \hbar)$ вида:

$$y_k(x, \hbar) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \Phi_k(x, \hbar)\right), \quad k = 1, \dots, 2n, \quad (13)$$

являются линейно независимыми решениями уравнения (6) для каждого $\hbar \in (0, \hbar_1]$. Таким образом, функции (13) образуют фундаментальную систему решений уравнения (6).

Замечание 1. Условие 2 можно ослабить, считая, что точки поворота отсутствуют не в главном при $\hbar = 0$, а хотя бы для некоторого порядка N , то есть

$$\inf_{x \in I} |p_k(x) - p_l(x)| \geq \text{const } \hbar^N, \quad \forall l \neq m.$$

Тогда, как показано в работе [6], теорема 2.1 сохраняет силу.

Замечание 2. Отметим, что в работе [6] не вводилось понятие классического гамильтониана системы $H(x, p)$ и ветвей функции $p(x)$, а теорема была сформулирована в терминах корней характеристического многочлена.

Явный вид разложения функций $\Phi_k(x, \hbar)$ по степеням $\hbar$ можно найти, подставляя (13) в уравнение (6) и приравнявая коэффициенты при равных степенях $\hbar$. Следовательно, если

$$\Phi_k(x, \hbar) = \Phi_k^0(x) + \hbar \Phi_k^1(x) + \dots, \quad (14)$$

то в главном получаем уравнение на $\Phi_k^0(x)$:

$$\frac{d\Phi_k^0(x)}{dx} = p_k^0(x).$$

Таким образом, если $\text{Im } p_k^0(x) \neq 0$, то соответствующие решение $y_k(x)$ экспоненциально растет или убывает по модулю.

Условие 4 теоремы 2.1 связано с так называемым эффектом Стокса (см., например, [25, 26]). Переход через точки, в которых меняется порядок мнимых частей ветвей импульса, но сами ветви не пересекаются, можно интерпретировать как аналог перехода через линию Стокса в теории комплексного метода ВКБ. В этом случае доминирующее решение с одной стороны от такой точки может оказаться доминируемым с другой стороны. Как будет показано далее, для уравнений второго порядка с действительными коэффициентами условие 4 является следствием отсутствия точек поворота (условие 3) и данный эффект не проявляется.

Оказывается, что наиболее простое асимптотическое разложение (14) приводит к сложным формулам для амплитудного члена $\Phi_k^1(x)$. Вопрос о выборе вида асимптотического разложения для функции (14) и для решения в целом не является столь однозначным. Например, в работе [4] и [6] предлагались различные способы записи асимптотического разложения для решений y_k , основанные на асимптотике корней характеристического многочлена, а в работах [15] и [17] предлагались асимптотические формулы, основанные на различном эвристическом выборе классического гамильтониана H .

Одним из существенных преимуществ использования вейлевского символа $H(x, p)$ состоит в том, что асимптотика решений разностного уравнения (6) имеет стандартный ВКБ вид.

Теорема 2.2. Пусть выполнены условия теоремы 2.1. Тогда для решений $y_k(x, \hbar)$ справедливы асимптотические формулы:

$$y_k(x, \hbar) = \frac{1}{\sqrt{v_k(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p_k(x) dx\right) [1 + O(\hbar)], \quad k = 1, \dots, 2n, \quad (15)$$

где $p_k(x) = p_k(x, \hbar)$ — гладкая при $x \in I$ ветвь импульса, $v_k(x) = H'_p(x, p_k(x)) \neq 0$ — классическая скорость на данной траектории, а x_0 — произвольная фиксированная точка из I .

Существенное отличие асимптотики (15) от асимптотик, основанных на корнях характеристического многочлена, которые были представлены в работах [4, 6], состоит в возникновении сдвига $\frac{\hbar k}{2}$ для аргумента коэффициента $a_k(x, \hbar)$ в гамильтониане (9). Наличие этих сдвигов приводит к тому,

что даже если коэффициенты уравнения a_k не зависели явно от параметра $\hbar$, то гамильтониан (9) все равно будет явно зависеть от $\hbar$, а следовательно, и импульс p в формуле (15). Таким образом, зависимость от $\hbar$ возникает уже в главном члене разложения фазы Φ_k , что принципиально отличает асимптотику ВКБ вида (15) от простого разложения фазы Φ_k по степеням $\hbar$.

В работах [14, 15] было замечено, что полуцелый сдвиг в аргументе коэффициентов разностного уравнения приводит к упрощению асимптотических формул для решений, но происхождение данного эффекта не было выявлено.

3 Асимптотика решений уравнения второго порядка

Рассмотрим подробнее спектральную задачу для эрмитового уравнения второго порядка с действительными коэффициентами. Записывая рекуррентное соотношение в виде $\hbar$ -разностного уравнения, получаем:

$$a(x + \hbar, \hbar)y(x + \hbar) + u(x, \hbar)y(x) + a(x, \hbar)y(x) = Ey(x), \quad (16)$$

где $a(x, \hbar)$ и $u(x, \hbar)$ — гладкие действительные функции, $x = \hbar m \in I$ — медленная переменная, а E — спектральный параметр (энергия).

Мы предполагаем, что уравнение (16) не является сингулярным, то есть

$$a(x, 0) \neq 0, \quad \forall x \in I.$$

В конкретных задачах уравнение (16) дополняется либо краевыми условиями на границах в случае конечного интервала I , либо условиями ограниченности решений $y(x)$ для неограниченного интервала I .

Как следует из предложения 2.1, гамильтониан уравнения (16) имеет вид:

$$H(x, p) = u(x, \hbar) + 2a\left(x + \frac{\hbar}{2}, \hbar\right) \cos(p). \quad (17)$$

Действительно, $a_1(x - \hbar/2, \hbar) = a(x + \hbar - \hbar/2, \hbar) = a(x + \hbar/2, \hbar)$.

Тогда уравнение $H(x, p) = E$ принимает вид:

$$u(x, \hbar) + 2a\left(x + \frac{\hbar}{2}, \hbar\right) \cos(p) = E. \quad (18)$$

Данное уравнение определяет две ветви импульса $p_{1,2} = \pm p(x)$ как неявно заданные функции. Из условий эрмитовости также следует, что для каждого решения $p(x)$ уравнения (18) комплексно сопряженная функция $\bar{p}(x)$ также является решением.

Найдем явный вид зависимости импульса от координаты. Для этого перепишем уравнение (18), определив вспомогательную функцию $b(x, \hbar)$:

$$\cos(p) = b(x, \hbar), \quad b(x, \hbar) = \frac{E - u(x, \hbar)}{2a(x + \hbar/2, \hbar)}.$$

Возможны три различных случая:

I Классически допустимая зона, где импульс p принимает действительные значения. Возникает при условии

$$|b(x, \hbar)| < 1.$$

Тогда

$$p(x) = \arccos(b(x, \hbar)) = \arccos\left(\frac{E - u(x, \hbar)}{2a(x + \hbar/2, \hbar)}\right).$$

II Классически запрещенная зона, где импульс p принимает чисто мнимые значения. Возникает при условии

$$b(x, \hbar) > 1.$$

Тогда

$$p(x) = i \operatorname{arccch}(b(x, \hbar)) = i \operatorname{arccch}\left(\frac{E - u(x, \hbar)}{2a(x + \hbar/2, \hbar)}\right),$$

где $\operatorname{arcch}(b) = \ln(b + \sqrt{b^2 - 1}) > 0$.

III Классически запрещенная зона, где импульс p принимает комплексные значения и действительная часть p равна π . Возникает при условии

$$b(x, \hbar) < -1.$$

Тогда

$$p(x) = \pi + i \operatorname{arcch}(-b(x, \hbar)) = \pi + i \operatorname{arcch}\left(\frac{u(x, \hbar) - E}{2a(x + \hbar/2, \hbar)}\right).$$

Наличие данного решения не противоречит условиям эрмитовости, поскольку сопряженное решение $\overline{p(x)}$ отличается от второй ветви $p_2 = -p(x)$ на 2π , а мы отождествляем соответствующие точки.

Таким образом, область I изменения координаты x разбивается на зоны трех типов. Подобная классификация впервые была рассмотрена в работе [15]. Будем называть соответствующие зоны — зонами I, II и III типа.

Точки поворота определяются из уравнения

$$v = \frac{\partial H}{\partial p} = -2a(x + \hbar/2, \hbar) \sin p = 0.$$

Следовательно, точки поворота соответствуют значениям импульса $p = 0$ или $p = \pi$. Подставляя в уравнение (18) импульс $p = 0$ и $p = \pi$, получаем уравнение на координаты точек поворота:

$$V_{\pm}(x) = u(x, \hbar) \pm 2a\left(x + \frac{\hbar}{2}, \hbar\right) = E,$$

где V_+ и V_- отвечают $p = 0$ и $p = \pi$ соответственно. Функции $V_{\pm}$ называют потенциальными кривыми уравнения (16) (см. [15]). В терминах функции $b(x, \hbar)$, получаем, что точки поворота отвечают решениям уравнения

$$b(x, \hbar) = \pm 1,$$

где знак “+” соответствует $p = 0$, а знак “−” соответствует $p = \pi$.

Нарисовав графики функций $V_{\pm}$ на плоскости (x, E) , можно видеть, как изменяется положение точек поворота в зависимости от спектрального параметра E . Во многом анализ данной картины напоминает рассмотрение графика потенциала $V(x)$ для гамильтониана $p^2/2 + V(x)$, который также можно интерпретировать, как кривую зависимости точек поворота от энергии E . Так например, точка поворота с $p = 0$ или $p = \pi$ является простой, если в этой точке не равна нулю производная $V'_+ \neq 0$ или соответственно $V'_- \neq 0$. Действительно, величина ускорения $\ddot{x}$ в точках поворота имеет вид:

$$\ddot{x} = -\frac{\partial^2 H}{\partial p^2} \frac{\partial H}{\partial x} = \pm 2a(x + \hbar/2, \hbar) V'_{\pm}(x).$$

Простые точки поворота, отвечающие $p = 0$, то есть решения уравнения $V_+ = E$ или $b(x, \hbar) = 1$, отделяют классически разрешенную зону I и классически запрещенную зону II, в которой действительная часть импульса равна нулю. Аналогично, простые точки поворота, отвечающие $p = \pi$, отделяют классически разрешенную зону I и классически запрещенную зону III, в которой $\operatorname{Re} p = \pi$. Классически запрещенные зоны II и III не имеют общих границ, если в задаче присутствуют только простые точки поворота.

Заметим, что в каждой из трех зон выполнены все условия теоремы 2.1, в том числе автоматически выполняется условие 4, поскольку мнимые части импульсов либо равны нулю, либо имеют разные знаки.

Простым следствием представленного анализа и общей теоремы 2.2 является следующая теорема.

Теорема 3.1.

Пусть разностное уравнение (16) с действительными гладкими коэффициентами не является сингулярным:

$$a(x, 0) \neq 0.$$

Тогда на любом отрезке, не содержащем точек поворота ($|b(x, 0)| \neq 1$) существует фундаментальная система решений $y_1(x)$, $y_2(x)$ уравнения (16) такая, что справедливы асимптотические формулы:

$$y_{1,2}(x) = \frac{1}{\sqrt{v(x)}} \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx\right) [1 + O(\hbar)], \quad (19)$$

где x_0 и $x = \hbar t$ принадлежат рассматриваемому отрезку.

Явный вид зависимости скорости v от координаты x с точностью $O(\hbar)$ имеет вид:

$$v = \sqrt{4a^2(x, 0) - (E - u(x, 0))^2} + O(\hbar) = \sqrt{D(x)} + O(\hbar),$$

где величина $D(x) = 4a^2(x, 0) - (E - u(x, 0))^2$ положительна в классически допустимой области и отрицательна в запрещенных областях.

В зависимости от рассматриваемой зоны, явные формулы для асимптотики фундаментальной системы решений примут вид:

I В классически допустимой зоне I ($|b| < 1$) существуют решения с асимптотикой:

$$y_1(x) = \frac{1}{(D(x))^{1/4}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \arccos\left(\frac{E - u(x, \hbar)}{2a(x + \hbar/2, \hbar)}\right) dx\right) + O(\hbar),$$

$$y_2(x) = \frac{1}{(D(x))^{1/4}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \arccos\left(\frac{E - u(x, \hbar)}{2a(x + \hbar/2, \hbar)}\right) dx\right) + O(\hbar).$$

В данной области решения разностного уравнения быстро осциллируют.

II В классически запрещенной зоне II ($b > 1$) существуют решения с асимптотикой:

$$y_{1,2}(x) = \frac{1 + O(\hbar)}{(-D(x))^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \operatorname{arcch}\left(\frac{E - u(x, \hbar)}{2a(x + \hbar/2, \hbar)}\right) dx\right).$$

В данной области решения разностного уравнения экспоненциально растут или убывают.

III В классически запрещенной зоне III ($b < -1$) существуют решения с асимптотикой:

$$y_{1,2}(x) = \frac{(-1)^m + O(\hbar)}{(-D(x))^{1/4}} \exp\left(\pm \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \operatorname{arcch}\left(\frac{u(x, \hbar) - E}{2a(x + \hbar/2, \hbar)}\right) dx\right),$$

где $x = \hbar t$. В данной области решения разностного уравнения быстро осциллируют как $(-1)^m$ и экспоненциально растут или убывают по модулю.

4 Асимптотика вблизи точек поворота и правила согласования решений

Теоремы предыдущих разделов дают представление о локальной асимптотике решений разностного уравнения на отрезке, не содержащем точек поворота. Следующим базовым шагом ВКБ приближения является построение асимптотики решений в окрестности простой точки поворота и построение правил согласования ВКБ асимптотик с разных сторон от простой точки поворота. Данный результат позволяет строить глобальные асимптотики решений в задачах с несколькими простыми точками поворота.

Строгие результаты об асимптотике фундаментальной системы решений на отрезке, содержащем одну простую точку поворота были представлены в работах [5–7, 27]. Для наших целей наиболее удобной является формулировка, представленная в работе [6]. Приведем соответствующую теорему в обозначениях, применяемых в настоящей работе.

Теорема 4.1 (O. Costin, R. Costin).

Рассмотрим уравнение (16) при $x \in I$, предполагая, что на отрезке I присутствует единственная простая точка поворота $x_0 = x_0(\hbar) \in I$. Предположим, что

$$b(x_0(\hbar), \hbar) = 1, \quad \left. \frac{\partial b}{\partial x} \right|_{x=x_0} > 0.$$

Зафиксируем два числа α и β так, что $1/2 < \alpha < \beta < 2/3$. Тогда:

1. Для $|x - x_0| > \hbar^\beta$ уравнение (16) имеет по два линейно независимых решения ВКБ вида (19) с каждой стороны от точки x_0 .
2. Для $|x - x_0| < \hbar^\alpha$ уравнение (16) имеет два линейно независимых решения вида

$$y_\pm(x) = \exp \left\{ \Phi_\pm(\hbar^{-2/3}(x - x_0), \hbar^{1/3}) \right\},$$

где $\Phi_\pm$ — гладкие функции, $\exp(\Phi_\pm(z, 0)) = Ai(\Theta z) \pm Bi(\Theta z)$, Ai и Bi — это функции Эйри [26]. Константа Θ и следующие члены разложения функции $\Phi_\pm$ могут быть найдены при подстановке асимптотики решений в исходное уравнение.

Кроме того, у уравнения (16) существует частное решение y_0 вида:

$$y_0(x) = Ai(\Theta \hbar^{-2/3}(x - x_0)) \left[1 + O(\hbar^{1/3}) \right], \quad (20)$$

при $|x - x_0| < \hbar^\alpha$.

Теорема 4.1 показывает, что ВКБ решения вида (19) применимы достаточно близко к простым точкам поворота, вплоть до $\hbar^\beta$ окрестности точки поворота x_0 , а в малой окрестности порядка $\hbar^\alpha$ решения приближаются функциями Эйри, как и в непрерывном случае. Оба асимптотических представления решений справедливы при $\hbar^\beta < |x - x_0| < \hbar^\alpha$, что позволяет согласовать ВКБ асимптотики решений с разных сторон от точки поворота.

Заметим, что в теореме 4.1 рассмотрен только случай точек поворота с $p = 0$, когда слева от точки x_0 расположена классически допустимая зона I, а справа — классически запрещенная зона II. Основываясь на теореме 4.1, можно получить следующие правила согласования ВКБ асимптотик.

Предложение 4.1.

Пусть выполнены все условия теоремы 4.1. Тогда, если решение $y(x)$ уравнения (16) имеет в классически запрещенной зоне ($x > x_0$) асимптотику вида

$$y(x) = \frac{1}{\sqrt{|v|}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p| dx \right) [1 + O(\hbar)], \quad (21)$$

то в классически разрешенной зоне ($x < x_0$) решение имеет вид:

$$y(x) = \frac{2}{\sqrt{v}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p dx - \frac{\pi}{4} \right) + O(\hbar). \quad (22)$$

Важно отметить, что обратное утверждение неверно, то есть, если решение в классически допустимой зоне имеет вид (22), то вообще говоря, оно не обязательно экспоненциально убывает в классически запрещенной зоне. В действительности, подобное решение будет экспоненциально расти в классически запрещенной зоне с амплитудой порядка $O(\hbar)$. Таким образом, правила перехода принципиально применимы только в одну сторону.

Аналогичное правило согласования решений для случая, когда классически запрещенная зона находится слева от точки поворота x_0 , получается при замене x на $-x$. Тогда экспоненциально убывающее решение в классически запрещенной зоне

$$y(x) = \frac{1}{\sqrt{|v|}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} |p| dx \right) [1 + O(\hbar)],$$

переходит в

$$y(x) = \frac{2}{\sqrt{v}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x p dx - \frac{\pi}{4} \right) + O(\hbar),$$

в классически разрешенной зоне.

Правила перехода (21)–(22) полностью совпадают с правилами перехода в непрерывном методе ВКБ для уравнения Шредингера (см., например, [28]). Различия возникают при рассмотрении точек

поворота, в которых $p = \pi$. Данный случай можно свести к исходному сдвигом по импульсам на π , то есть умножением волновой функции $y(x)$ на плоскую волну $e^{i\pi x/\hbar}$.

Предложение 4.2.

Пусть $y(x)$ решение уравнения (16) с простой точкой поворота x_0 :

$$b(x_0(\hbar), \hbar) = -1, \quad \left. \frac{\partial b}{\partial x} \right|_{x=x_0} < 0$$

и $y(x)$ экспоненциально убывает вглубь классически запрещенной зоны ($x > x_0$):

$$y(x) = \frac{(-1)^m}{\sqrt{|v|}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \operatorname{arccch}(-b(x, \hbar)) dx \right) [1 + O(\hbar)],$$

где $x = \hbar t$.

Тогда в классически разрешенной зоне ($x < x_0$) решение имеет вид:

$$y(x) = \frac{2}{\sqrt{v}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} \arccos(b(x, \hbar)) dx - \frac{\pi}{\hbar} x_0 + \frac{\pi}{4} \right) + O(\hbar). \quad (23)$$

Доказательство. Пусть $\tilde{y}(x) = e^{i\pi x/\hbar} y(x)$. Тогда $\tilde{y}$ удовлетворяет уравнению

$$-a(x + \hbar, \hbar) \tilde{y}(x + \hbar) + u(x, \hbar) \tilde{y}(x) - a(x, \hbar) \tilde{y}(x) = E \tilde{y}(x),$$

то есть уравнению аналогичного вида с гамильтонианом, сдвинутым на π по импульсам:

$$\tilde{H}(x, p) = u(x, \hbar) - 2a(x + \hbar/2, \hbar) \cos(p) = H(x, \pi - p).$$

Следовательно, если x_0 — точка поворота H с импульсом $p = \pi$, то x_0 — точка поворота гамильтониана $\tilde{H}$ с импульсом $p = 0$.

Функция $\tilde{y}(x) = e^{i\pi x/\hbar} y(x)$ в классически запрещенной зоне имеет вид:

$$\tilde{y}(x) = \frac{1}{\sqrt{|v|}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x \operatorname{arccch}(\tilde{b}(x, \hbar)) dx \right) [1 + O(\hbar)],$$

где $\tilde{b}(x, \hbar) = -b(x, \hbar)$.

Применяя предложение 4.1, получаем, что слева от точки x_0 в классически разрешенной зоне решение $\tilde{y}$ имеет вид:

$$\tilde{y}(x) = \frac{2}{\sqrt{v}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} \arccos(\tilde{b}(x, \hbar)) dx - \frac{\pi}{4} \right) + O(\hbar).$$

Сделав обратную замену, получаем:

$$\begin{aligned} y(x) &= \frac{2(-1)^m}{\sqrt{v}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} \arccos(-b(x, \hbar)) dx - \frac{\pi}{4} \right) + O(\hbar) = \\ &= \frac{2(-1)^m}{\sqrt{v}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} (\pi - \arccos(b(x, \hbar))) dx - \frac{\pi}{4} \right) + O(\hbar) = \\ &= \frac{2(-1)^m}{\sqrt{v}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} \arccos(b(x, \hbar)) dx - \frac{\pi}{\hbar} (x_0 - x) + \frac{\pi}{4} \right) + O(\hbar) = \\ &= \frac{2}{\sqrt{v}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} \arccos(b(x, \hbar)) dx - \frac{\pi}{\hbar} x_0 + \frac{\pi}{4} \right) + O(\hbar). \end{aligned}$$

Что и требовалось доказать. □

В случае, когда классически допустимая зона расположена справа от классически запрещенной зоны III, решение, экспоненциально убывающее в классически запрещенной зоне ($x < x_0$):

$$y(x) = \frac{(-1)^m}{\sqrt{|v|}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p dx \right) [1 + O(\hbar)],$$

в классически допустимой зоне ($x > x_0$) будет иметь вид:

$$y(x) = \frac{2}{\sqrt{v}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x p dx + \frac{\pi}{\hbar} x_0 + \frac{\pi}{4} \right) + O(\hbar). \quad (24)$$

Таким образом, в правилах согласования решения в простых точках поворота с импульсом $p = \pi$ возникает необычный сдвиг в фазе косинуса, не возникающий в задачах непрерывного метода ВКБ.

5 Правило дискретизации Бора-Зоммерфельда

Рассмотрим задачу об определении асимптотики решения, локализованного в классические допустимой области между двумя простыми точками поворота $x_1 < x_2$, и экспоненциально убывающее вглубь классически запрещенных областей.

Возможны 4 случая, в зависимости от значений импульса p в точках поворота x_1 и x_2 :

1. Классически запрещенные области относятся ко II типу:

$$p(x_1) = 0, \quad p(x_2) = 0.$$

2. Классически запрещенные области относятся к III типу:

$$p(x_1) = \pi, \quad p(x_2) = \pi.$$

3. Смешанный случай:

$$p(x_1) = 0, \quad p(x_2) = \pi.$$

4. Смешанный случай:

$$p(x_1) = \pi, \quad p(x_2) = 0.$$

Во всех случаях, применяя правила перехода, получаем, что решение $y_1(x)$, экспоненциально убывающее вглубь классически запрещенной зоны $x < x_1$, имеет вид:

$$y(x) = \frac{2C_1}{(-D)^{1/4}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x \arccos(b(x, \hbar)) dx + \phi_1 \right) + O(\hbar),$$

а решение $y(x)$, экспоненциально убывающее вглубь классически запрещенной зоны $x > x_2$, имеет вид:

$$y_2(x) = \frac{2C_2}{(-D)^{1/4}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} \arccos(b(x, \hbar)) dx + \phi_2 \right) + O(\hbar),$$

где смещения фазы ϕ_i^s для случая $s = 1, 2, 3, 4$ имеют вид:

$$\begin{aligned} \phi_1^1 &= -\pi/4, & \phi_2^1 &= -\pi/4, \\ \phi_1^2 &= \pi/4 + x_1/\hbar, & \phi_2^2 &= \pi/4 - x_2/\hbar, \\ \phi_1^3 &= -\pi/4, & \phi_2^3 &= \pi/4 - x_2/\hbar, \\ \phi_1^4 &= \pi/4 + x_1/\hbar, & \phi_2^4 &= -\pi/4. \end{aligned}$$

Сопоставляя два вида представления решения, получаем, что:

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \arccos(b(x, \hbar)) dx = \pi n - \phi_1^s - \phi_2^s + O(\hbar),$$

где n — целое число.

Таким образом, для различных комбинаций типов точек поворота получаем следующие правила дискретизации энергетических уровней.

1. Если $p(x_1) = 0$, $p(x_2) = 0$, то

$$\int_{x_1}^{x_2} \arccos(b(x, \hbar)) dx = \hbar \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) + O(\hbar^2).$$

2. Если $p(x_1) = \pi$, $p(x_2) = \pi$, то

$$\int_{x_1}^{x_2} \arccos(b(x, \hbar)) dx = \hbar \pi \left(n + \frac{1}{2} + \frac{x_2 - x_1}{\hbar} \right) + O(\hbar^2).$$

3. Если $p(x_1) = 0$, $p(x_2) = \pi$, то

$$\int_{x_1}^{x_2} \arccos(b(x, \hbar)) dx = \hbar \pi \left(n + \frac{x_2}{\hbar} \right) + O(\hbar^2).$$

4. Если $p(x_1) = \pi$, $p(x_2) = 0$, то

$$\int_{x_1}^{x_2} \arccos(b(x, \hbar)) dx = \hbar \pi \left(n - \frac{x_1}{\hbar} \right) + O(\hbar^2).$$

Введение гамильтониана H и соответствующей классической механической системы позволяет записать правило дискретизации энергетических уровней Бора-Зоммерфелда в простой форме.

Заметим, что классически допустимая зона, ограниченная двумя простыми точками поворота, является проекцией на ось координат x траектории периодического движения классической гамильтоновой системы с гамильтонианом $H(x, p)$ на цилиндре. Траектории, у которых значения импульса в точках поворота x_1 и x_2 не совпадают, охватывают цилиндр фазового пространства, а траектории, у которых значения импульсов совпадают, могут быть стянуты в точку. Сопоставим каждому значению энергии E соответствующую траекторию периодического движения $\gamma = \gamma(E)$.

Теорема 5.1. *Правило дискретизации энергетических уровней на траекториях периодического движения с гамильтонианом H может быть записано в стандартном виде, не зависящем от типов точек поворота:*

$$\frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma} x dp = \hbar(n + \sigma) + O(\hbar^2), \quad (25)$$

где индекс $\sigma = 0$, если траектория γ охватывает цилиндр, и $\sigma = 1/2$ в противном случае.

Доказательство. В случае, когда $p(x_1) = p(x_2) = 0$, теорема очевидна. Разберем случай $p(x_1) = p(x_2) = \pi$. Тогда

$$\int_{x_1}^{x_2} \arccos(b(x, \hbar)) dx = \hbar \pi \left(n + \frac{1}{2} + \frac{x_2 - x_1}{\hbar} \right) + O(\hbar^2).$$

Если одна ветвь импульса $p(x) = \arccos(b(x, \hbar))$, то вторая ветвь импульса, которая непрерывно соединяется с первой в точках поворота имеет вид $2\pi - p(x)$. Следовательно,

$$\frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma} p dx = \frac{1}{2\pi} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx - \frac{1}{2\pi} \int_{x_1}^{x_2} (2\pi - p(x)) dx = \frac{1}{\pi} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx - (x_2 - x_1) = \hbar(n + 1/2) + O(\hbar^2).$$

Аналогично разбираются и оставшиеся случаи. $\square$

Данное правило квантования полностью согласуется с результатами, которые могут быть получены общими методами канонического оператора [29]. Применение дискретного метода ВКБ позволяет получить не только асимптотику спектра трехчленного рекуррентного уравнения, но и асимптотику соответствующих собственных функций.

Можно показать, что правило дискретизации энергетических уровней (25) носит универсальный характер для систем, заданных на цилиндре. Подобной задачей является, например, задача об уравнении Шредингера для квантовой частицы, движущейся по окружности (см., например, в [11]). Представленное правило дискретизации (25) также без изменений переносится на случай разностных эрмитовых уравнений высших порядков.

Заметим, что интеграл в формуле (25) берется от дифференциальной формы $x dp$. Для траекторий, охватывающих цилиндр, замена на интеграл от $p dx$ не является корректной, поскольку

координата p не определена глобально на цилиндре. В случае траекторий, не охватывающих цилиндр, правило дискретизации (25) может быть переписано как правило дискретизации фазовой площади:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\Sigma} dp \wedge dx = \hbar(n + 1/2) + O(\hbar^2),$$

где Σ — область фазового пространства, ограниченная траекторией γ .

Если в исходной задаче переменная x , принимающая дискретные значения, определена не на целочисленной сетке значений, кратных $\hbar$, т.е. $x = \hbar m$, а принимает значения вида $x = \varkappa + \hbar m$, где $\varkappa \in (0, \hbar)$, а m — целые числа, то величина $\varkappa$ должна быть учтена в правиле дискретизации для траекторий, охватывающих цилиндр:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\gamma} x dp = \hbar n + \varkappa + O(\hbar^2).$$

Данное правило получается простым сдвигом по переменной x . Заметим, что это правило является точным, если в качестве гамильтониана $H(x, p)$ на цилиндре рассмотреть саму координату x .

Благодарности

Данная работа выполнена при поддержке программы фундаментальных исследований ВШЭ в 2016 году.

Список литературы

- [1] Agarwal R. P. Difference equations and inequalities: theory, methods, and applications // CRC Press, 2000.
- [2] Graham R. L., Knuth D. E. and Patashnik O. Concrete Mathematics: A Foundation for Computer Science // Addison-Wesley Longman Publishing Co., 1994.
- [3] Elaydi S. An introduction to difference equations // Springer Science & Business Media, 2005.
- [4] Васильева А. Б. О соответствии между некоторыми свойствами решений линейных разностных систем и обыкновенных дифференциальных уравнений // Труды семинара по теории дифференциальных уравнений с отклоняющимся аргументом. УДН., 1967 **5**, 21–44.
- [5] Цыганов Г. А. Асимптотика решения линейной разностной системы с малой разностью при наличии “точки поворота” // Дифф. уравн. 1974, **10** (7), 1312–1321.
- [6] Costin O. and Costin R. Rigorous WKB for finite-order linear recurrence relations with smooth coefficients // SIAM J. Math. Anal., 1996, **27** (1), 110–134.
- [7] Geronimo J. S., Bruno O. and Van Assche W. WKB and turning point theory for second-order difference equations // In book: J. Janas (et al. eds), Spectral methods for operators of mathematical physics, Birkhäuser Basel, 2004, 101–138.
- [8] Garoufalidis S. and Geronimo J. S. Asymptotics of q-difference equations // In book: T. Kohno (et al. eds), Primes and knots, volume 416 of Contemporary mathematics, American Mathematical Soc., 2006, 83–114.
- [9] Geronimo J. S. and Smith D. T. WKB (Liouville-Green) analysis of second order difference equations and applications // J. Approx. Theory, 1992, **69** (3), 269–301.
- [10] Выборный Е. В. Расщепление энергий при динамическом туннелировании // ТМФ, 2014, **181** (2), 337–348.
- [11] Выборный Е. В. Координатное и импульсное туннелирование в одномерных квантовых системах с дискретным спектром // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование, 2015, **12** (1), 5–84.

- [12] Wong R. Asymptotics of linear recurrences // Analysis and Applications, 2014, **12** (4), 463–484.
- [13] Aptekarev A., Geronimo J. S. and Van Assche W. Varying weights for orthogonal polynomials with monotonically varying recurrence coefficients // J. Approx. Theory, 2008, **150** (2), 214–238.
- [14] Braun P. Discrete semiclassical methods in the theory of rydberg atoms in external fields // Rev. Modern Phys., 1993, **65** (1), 115–161.
- [15] Браун П. А. Метод ВКБ для трехчленных рекуррентных соотношений и квазиэнергии ангармонического осциллятора // ТМФ, 1978, **37** (3), 355–370.
- [16] Браун П. А. К теории квадратичного эффекта Зеемана для высоковозбужденных состояний атома водорода // ЖЭТФ, 1983, **84** (3–4), 850–864.
- [17] Garg A. Application of the discrete Wentzel–Kramers–Brillouin method to spin tunneling // J. Math. Phys., 1998, **39** (10), 5166–5179.
- [18] Garg A. Oscillatory tunnel splittings in spin systems: a discrete wentzel-kramers-brillouin approach // Phys. Rev. Lett., 1999, **83** (21), 4385–4388.
- [19] Garg A. Discrete phase integral method for five-term recursion relations // arXiv preprint math-ph/0003005, 2000.
- [20] Garg A. Quenched spin tunneling and diabolical points in magnetic molecules. I. Symmetric configurations // Phys. Rev. B, 2001, **64** (9), 094413.
- [21] Garg A. Quenched spin tunneling and diabolical points in magnetic molecules. II. Asymmetric configurations // Phys. Rev. B, 2001, **64** (9), 094414.
- [22] Маслов В. П. Операторные методы // Наука, М., 1973.
- [23] Березин Ф. А., Шубин М. А. Уравнение Шредингера // Изд-во моск. ун-та, 1983, 392 с.
- [24] Карасев М. В., Маслов В. П. Нелинейные скобки Пуассона. Геометрия и квантование // Наука, М., 1991.
- [25] Федорюк М. В. Асимптотические методы для линейных обыкновенных дифференциальных уравнений // Наука, М., 1983.
- [26] Olver F. W. Asymptotics and special functions // Academic press, 2014.
- [27] Geronimo J. S. WKB and turning point theory for second order difference equations: external fields and strong asymptotics for orthogonal polynomials // arXiv preprint arXiv:0905.1684, 2009.
- [28] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика // Гос. из-во РСФСР, Ленинград, 1948.
- [29] Маслов В. П., Федорюк М. В. Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики // Наука, М., 1976.

ON THE WKB METHOD FOR DIFFERENCE EQUATIONS: WEYL SYMBOL AND THE PHASE GEOMETRY

E.V. Vybornyi

National Research University “Higher School of Economics”

evgeniy.bora@gmail.com

Received 11.07.2016

We study the asymptotics of solutions of linear difference equations (recurrence relations) with slowly varying coefficients. It is known that the local asymptotic behavior of solutions can be obtained similarly to the WKB approximation for linear differential equations. In contrast to the continuous case, one of the major obstacles to the widespread use of discrete WKB method is the lack of a geometric interpretation of the obtained asymptotic formulas. We show that it is possible to build a simple geometric interpretation of discrete WKB method if one consider the difference equation as pseudo-differential with corresponding Weyl symbol (Hamiltonian). We obtain such a geometric interpretation for local asymptotics, turning points, the Bohr-Sommerfeld rule and other basic elements of the semiclassical approximation.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ УСЛОВИЙ РАБОТЫ ДАТЧИКА ПОТОКА МЕМБРАННОГО ТИПА

Н.А. Дюжев¹, Е.Э. Гусев¹, М.А. Махиборода¹, М.В. Катеев¹,
К.В. Понкратов²

¹*Национальный исследовательский университет «МИЭТ»*

²*ООО «Ренишоу»*

bubbledouble@mail.ru

Поступила 19.08.2016

В данной работе было проведено моделирование первичного преобразователя скорости потока газа мембранного типа на основе калориметрического принципа работы. Представлены две методики определения механических напряжений: с помощью профилометра по изгибу пластины и методом комбинационного рассеяния света по сдвигу частоты Рамана. Выполнена оптимизация технологического маршрута формирования мембраны для тепловых датчиков с целью минимизации механических напряжений внутри мембраны. Проведен сравнительный анализ численного моделирования зависимости разности температур терморезисторов при горизонтальном расположении чувствительного элемента с экспериментом. Рассмотрено несколько вариантов конструкции сенсора. Получен результат численного моделирования различных вариантов конструкции датчика. Проведен поиск оптимального положения датчика в трубе измеряемого газового потока для достижения максимальной чувствительности. Показано влияние рабочей среды на работу сенсора. Результаты проведенных исследований позволяют найти оптимальную конфигурацию теплового сенсора и его наилучшее расположение в потоке.

УДК 681.121.832

Введение

В последние два десятилетия в рамках технологии микроэлектронного производства наряду с традиционной планарной технологией изготовления интегральных схем сложилось новое технологическое направление, которое включает в себя определенное разнообразие технологических применений и видов продукции под общим названием микросистемная техника (МСТ). Направление производства микросистемной техники унаследовало от традиционной микроэлектроники базовые технологические приемы,

такие как фотолитография, избирательное травление, лигирование, ионная имплантация и т. п. при этом произошло значительное качественное расширение возможностей и производимых продуктов. В рамках технологии МСТ вытравливаются сверхтонкие пленки и мембраны, миниатюрные трехмерные фигуры, сверхминиатюрные детали машин и механизмов, собираются разнообразные механизмы и микро-электромеханические системы. Технология и производство МСТ оказались актуальными, востребованными, значительно пересекаются с проблематикой нанотехнологий и развиваются высокими темпами в соответствии с законами Мура [1].

Технологии микромеханики, или микро-электромеханических систем (МЭМС) быстро развиваются в настоящее время [2]. Это объясняется во многом тем, что их ключевые преимущества, такие как миниатюрность, функциональность, надёжность, малое энергопотребление, простота интегрирования, востребованы сегодня практически всеми рынками электроники. Области применений МЭМС ранжированы от самых массовых рынков (автомобильного и потребительского) до рынков сложных приборов специального назначения, производимых небольшими партиями: медицинских приборов, военной и аэрокосмической техники.

Один из видов, широко применяемых МЭМС приборов являются измерители потока газов на основе первичного преобразователя, использующего калориметрический метод. Калориметрический метод считается абсолютным методом измерения [3], т.е. значение может быть считано в любой момент. Калориметрический принцип измерения реализуется разными способами и актуален в целом ряде научных и прикладных областей применения - это сканирующая калориметрия [4], дифференциальная сканирующая калориметрия [5,6,7], проточная калориметрия [8], теплопроводящая [9], изотермическая [10], адиабатическая [11].

Основная часть первичного преобразователя это чувствительный элемент, представляющий собой мембрану с расположенными на ней двумя датчиками температуры и находящимся между ними нагревателем. Пороговая чувствительность – это важнейший параметр измерительного преобразователя, критерием которого является определение минимального изменения температуры среды. Поэтому важен подбор материала, из которого будут изготовлены терморезисторы. Материал должен иметь линейно высокий температурный коэффициент сопротивления, а также быть химически инертным, т.е. не взаимодействовать с окружающей средой.

Поток газа изменяет распределение температуры и создает разницу в показаниях, которая пропорциональна скорости этого потока. При этом, чем больше разница в показаниях терморезисторов при определенной скорости потока, тем выше чувствительность прибора.

В работе [2] авторами подробно описан датчик потока подобного типа, разработана математическая модель прибора и проведено моделирование, которое позволило определить изменение профиля распределения тепла вдоль мембраны в зависимости от скорости потока, влияние расстояния между терморезисторами, толщины и материала мембраны на характеристики первичного преобразователя. Проведено сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными и показавшее хорошее совпадение расчетных и экспериментальных значений параметров.

Для создания математической модели теплового сенсора был использован пакет САПР SolidWorks (Солидворкс — программный комплекс САПР для автоматизации работ промышленного предприятия на этапах конструкторской и технологической подготовки производства). САПР SolidWorks обеспечивает разработку изделий любой степени сложности и назначения, работает в среде Microsoft Windows.

Математическая модель описывает трубу диаметром внутреннего сечения 15 мм с помещенным в нее чувствительным элементом на крыле (см. рис.1). Установка датчика на крыло является одним из методов борьбы с неблагоприятным воздействием потока

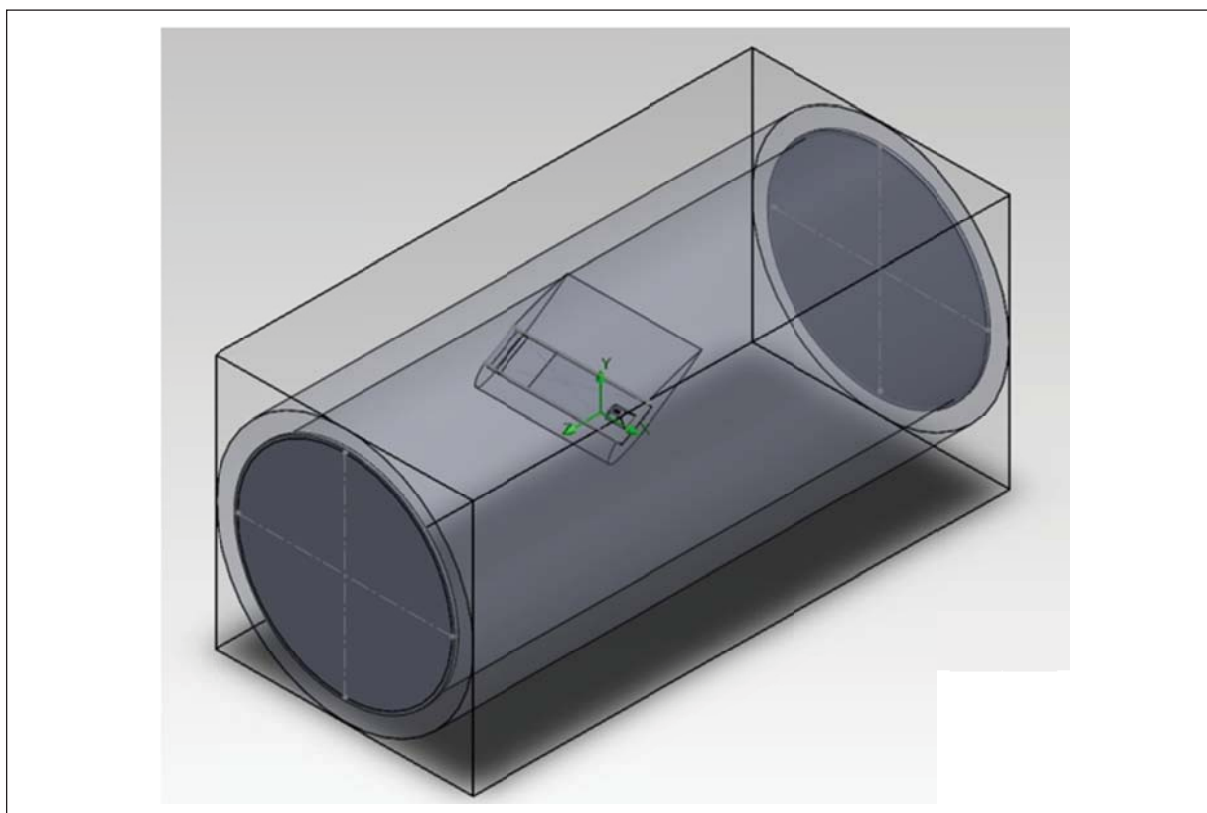


Рис. 1. Расчетная модель первичного преобразователя скорости поток в трубе

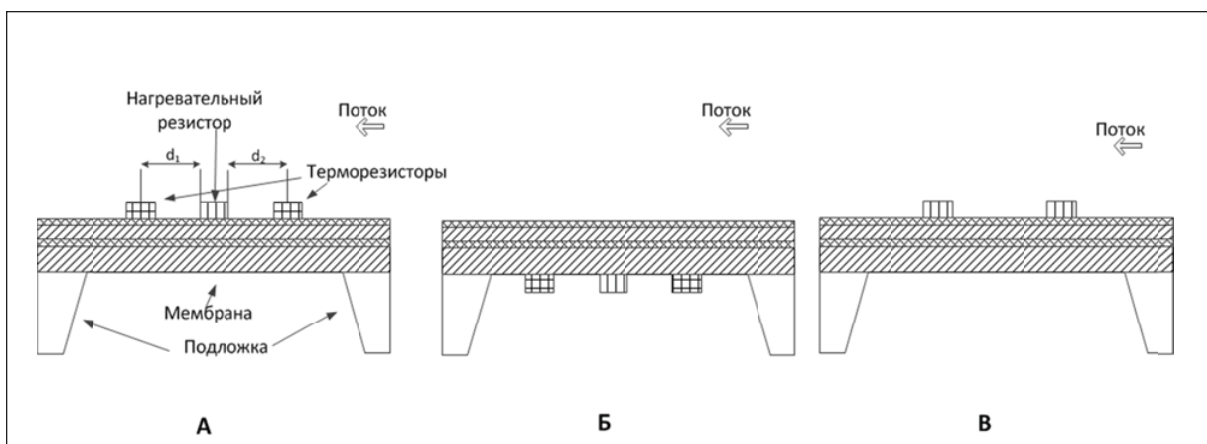


Рис. 2. Схематическое изображение трех конфигураций преобразователя расхода газа. А – «схема с тремя резисторами»; Б - «схема с тремя резисторами на обратной стороне»; В – «схема с двумя нагревателями»

на сенсор. Повышение обтекаемости прибора позволило снизить как сопротивление датчика потоку, так и влияние турбулентных потоков на сенсор. Крыло было создано для эксперимента из ABS-пластика на 3D-принтере. В качестве исходных данных задаются параметры используемых материалов, а также начальные и граничные условия. На нагревательном элементе устанавливается температура в диапазоне от 100 до 120 °С, что было выявлено в ходе эксперимента.

Вместе с тем, представляет несомненный научный и практический интерес установить влияние расположения элементов первичного преобразователя (терморезисторов и нагревателя) относительно мембраны и потока газа.

В данной работе рассматривались три конфигурации чувствительного элемента, которые показаны на рисунке 2.

Первичный преобразователь скорости потока представляет собой кремниевую подложку, на которой формируется микромеханическая диэлектрическая мембрана с расположенными на ней терморезисторами и нагревателем. В качестве материала терморезисторов и нагревателя используется платина в связи с высоким температурным коэффициентом сопротивления (ТКС) и химической стойкостью, что позволяет фиксировать локальные минимальные изменения температуры в доли градуса.

Численное моделирование

Сенсор представляет собой мост Уитстона с 4 резисторами, расположенными на мембране. Для оптимизации расчетов, т.е. для уменьшения времени расчета и упрощения построения расчетной сетки, были рассмотрены два варианта создания резисторов в Solidworks: 1) 4 резистора сформированы так, как они выглядят на реальных кристаллах (меандры); 2) упрощенная версия, выглядящая как параллелепипеды, площадью с два резистора-меандра.

В случае использования резисторов в форме меандров для обработки сигнала рассматриваются разницы температур между первым и третьим (по порядку слева направо) резисторами или вторым и четвертым. При «сплошных» резисторах мы следим просто за разницей температур между ними. Ниже приведены изображения резисторов и графики расчетов.

Таким образом мы получили результат, говорящий о том, что упрощение геометрии модели вполне обосновано. Далее мы будем рассматривать именно упрощенный вид резисторов.

Для проведения моделирования используется модуль SolidWorks Flow Simulation (семейство дополнительных модулей по газо/гидродинамическим расчетам). Для проверки адекватности данного модуля для нашего эксперимента были проведен теорети-

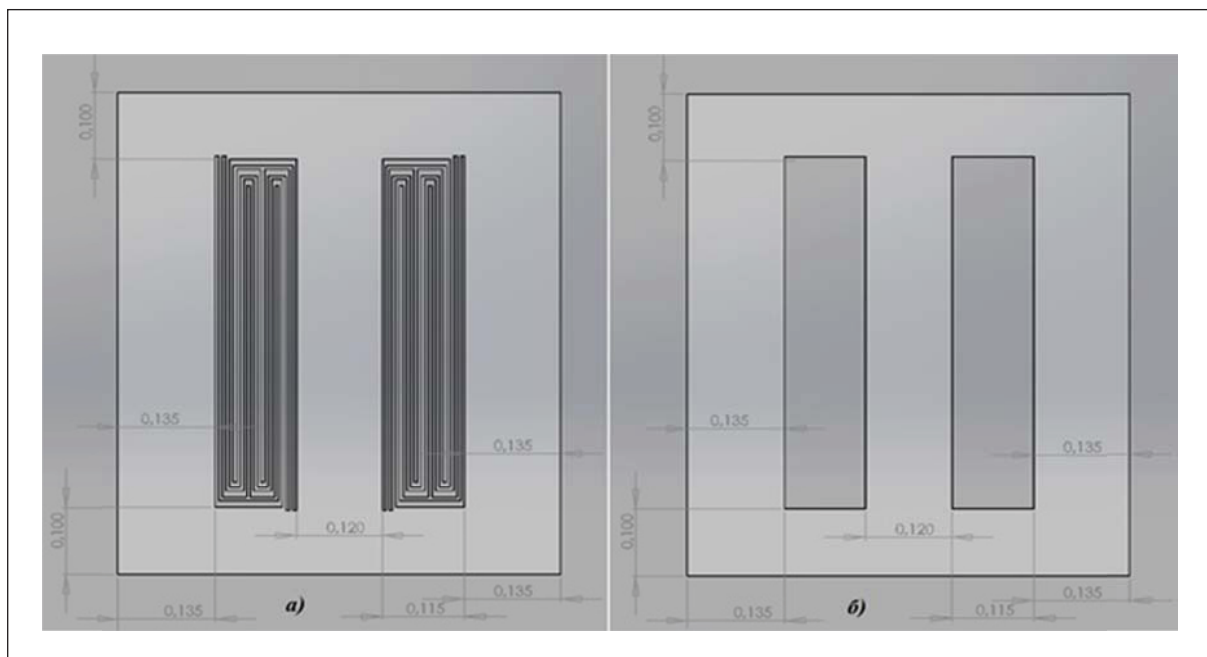


Рис. 3. Изображение резисторов: а) резисторы, которые выглядят как на реальном сенсоре (меандры, 4 штуки); б) упрощенная версия

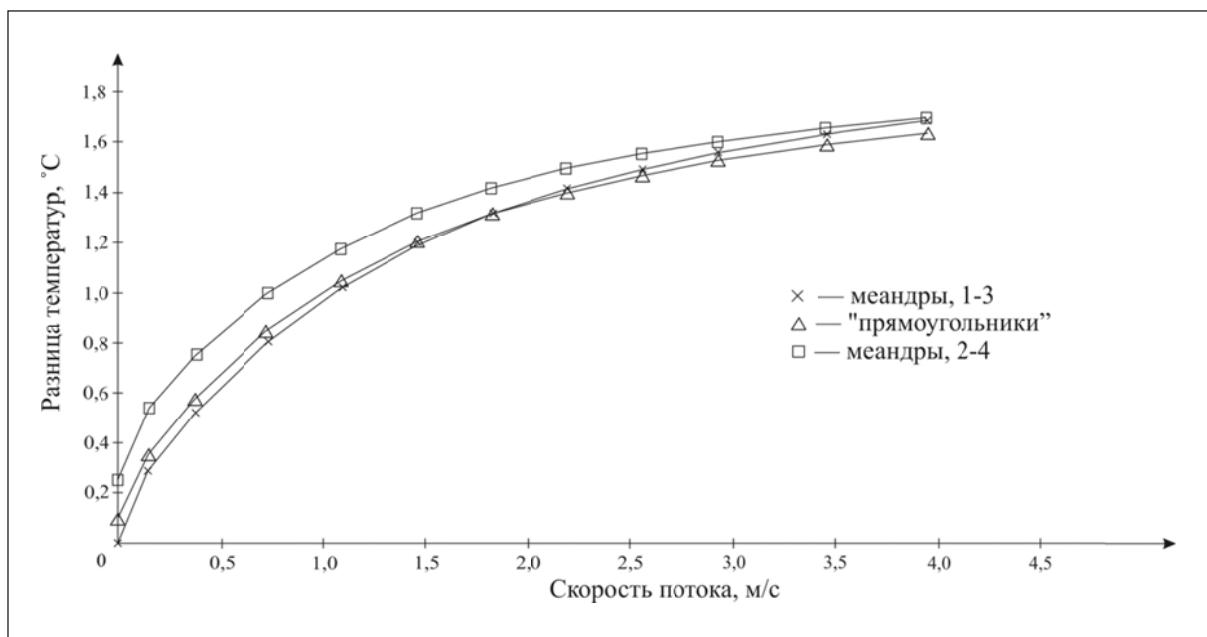


Рис. 4. Графики зависимости разницы температур между резисторами от скорости потока при разных формах резисторов.

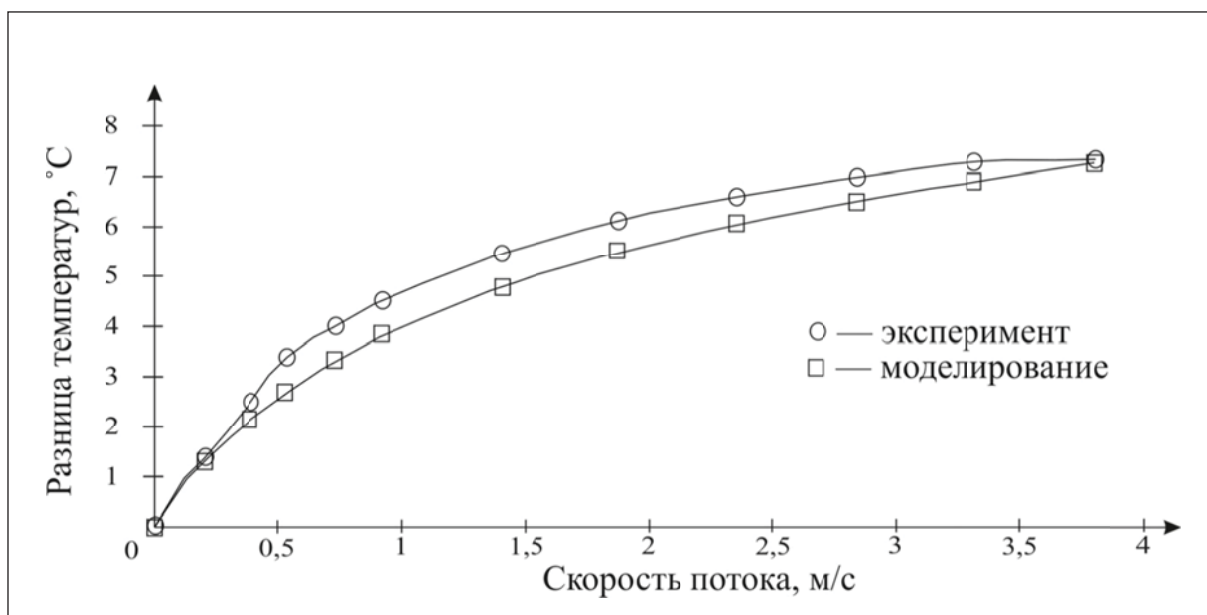


Рис. 5. Зависимость разности температур терморезисторов, горизонтальное положение чувствительного элемента при расстоянии между резисторами 60 мкм при многослойном материале мембраны

ческий опыт по исследованию работоспособности датчика расхода газа конфигурации, пример которой показан на рисунке 5.

Установка датчика на крыло является одним из методов противодействия с неблагоприятным воздействием потока на сенсор[12]. На рисунке 8 представлены результаты моделирования влияния расположения первичного преобразователя на крыло на его чувствительность.

Заметное из графиков повышение чувствительности сенсора вследствие установки датчика на крыло можно объяснить улучшением обтекаемости конструкции, что позво-

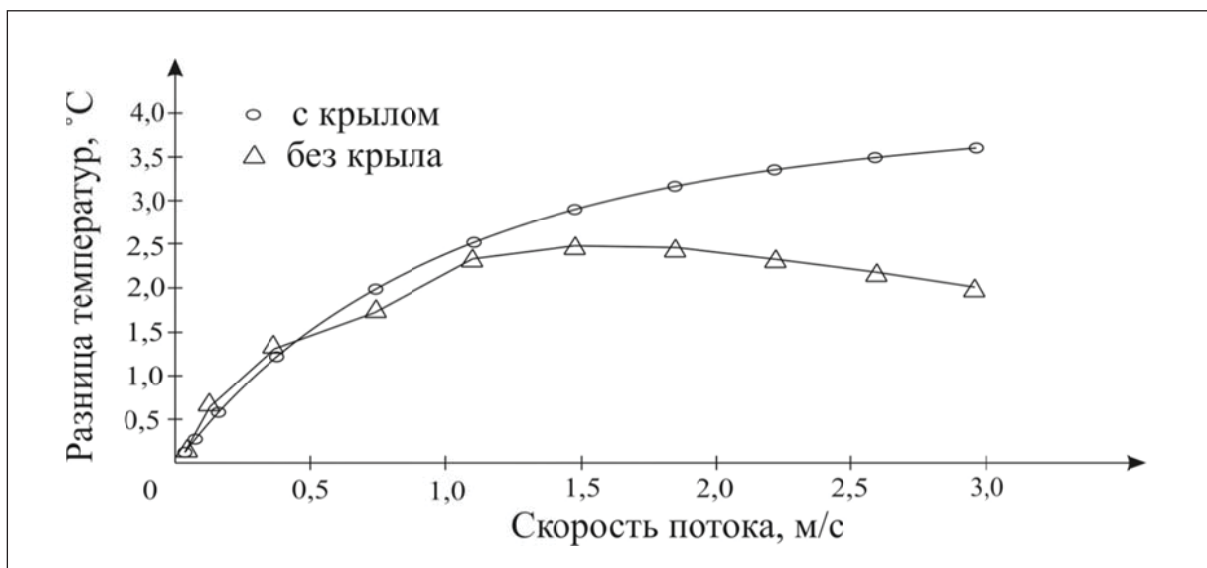


Рис. 6. Зависимость разности температур терморезисторов при конфигурациях с крылом и без крыла

ляет снизить как сопротивление датчика потоку, так и влияние турбулентных потоков на сенсор.

Первичные датчики могут располагаться и на обратной стороне мембраны[13]. Мембрана представляет собой многослойную структуру, состоящую из слоев $\text{SiO}_2/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ или слоя полиимида, и предназначена для уменьшения отвода тепла от нагревателя (в некоторых случаях терморезисторы являются нагревателями, то есть они и нагреватели, и измерительные резисторы). На рисунке 7 представлены результаты моделирования влияния расположения первичного преобразователя относительно мембраны на его чувствительность. Моделирование было проведено при горизонтальном положении сенсора.

Как следует из рисунка 7, для достижения максимальной чувствительности следует использовать сенсор на основе мембраны из полиимида, с нанесенными на обратную сторону терморезисторами. Далее были проведены расчеты с целью поиска такого расположения резисторов на мембране, при котором достигается наибольшая чувствительность сенсора. Результаты моделирования обдува датчика при изменении угла наклона крыла в трубе показаны на рисунке 8.

Из результатов моделирования, приведенных на данном рисунке, следует, что наклон сенсора играет большую роль для увеличения чувствительности датчика. При наклоне более, чем на 10° , чувствительность сенсора возрастает почти в 2 раза. Выбор угла наклона сенсора при проведении эксперимента в 30° объясняется меньшим по сравнению с 40° значением сопротивления датчика потоку при схожих значениях чувствительности.

Потоки газов различаются по скорости, температуре как газа, так и окружающей среды, молекулярному составу и т.д. На рынке сенсоров существует широкий ассортимент устройств. Выбор датчика обусловлен определёнными условиями его эксплуатации. Следующий график показывает, что различия в составе газа влекут за собой отличия в показаниях прибора. Кривые, представленные на рисунке 9, получены в результате нахождения разницы температур двух терморезисторов.

Из рисунка 9 видно, что различный молекулярный состав потока обеспечивает качественно схожие кривые графика чувствительности, но отличающиеся по крутизне. Таким образом, выбирая устройство, нужно знать и понимать, с потоками каких ве-

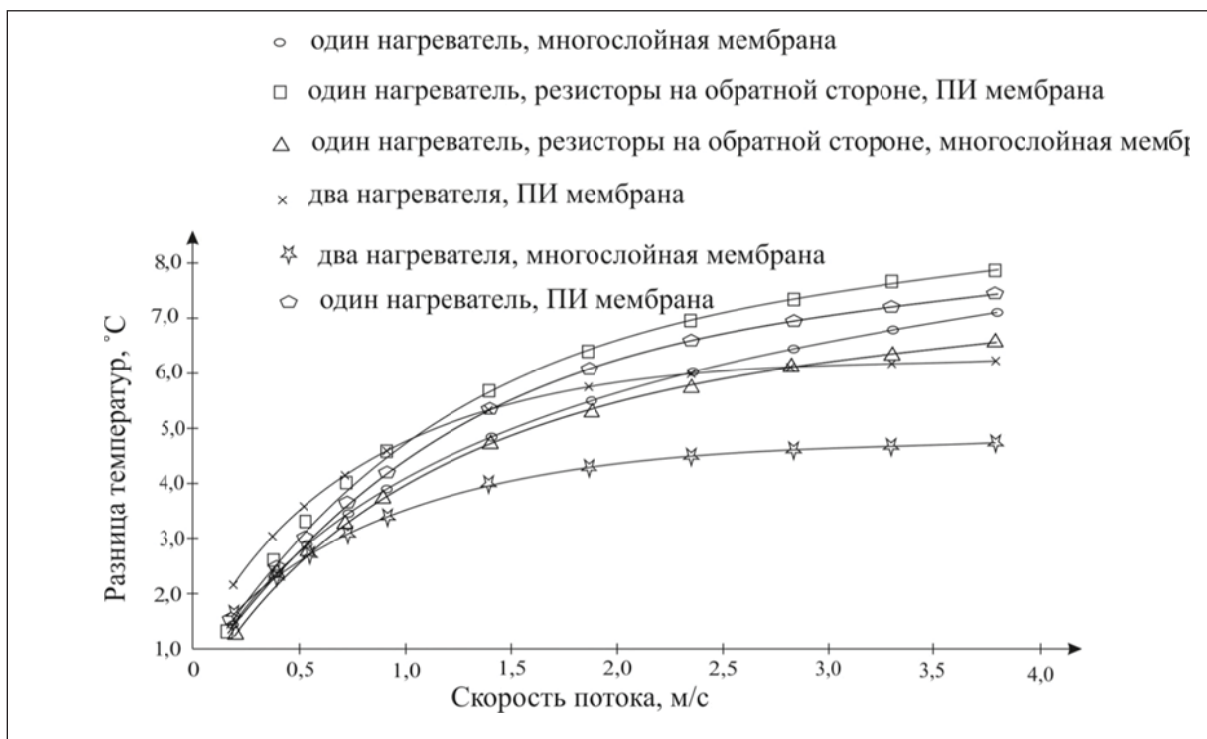


Рис. 7. Зависимость разности температур терморезисторов от конфигурации и материала мембраны

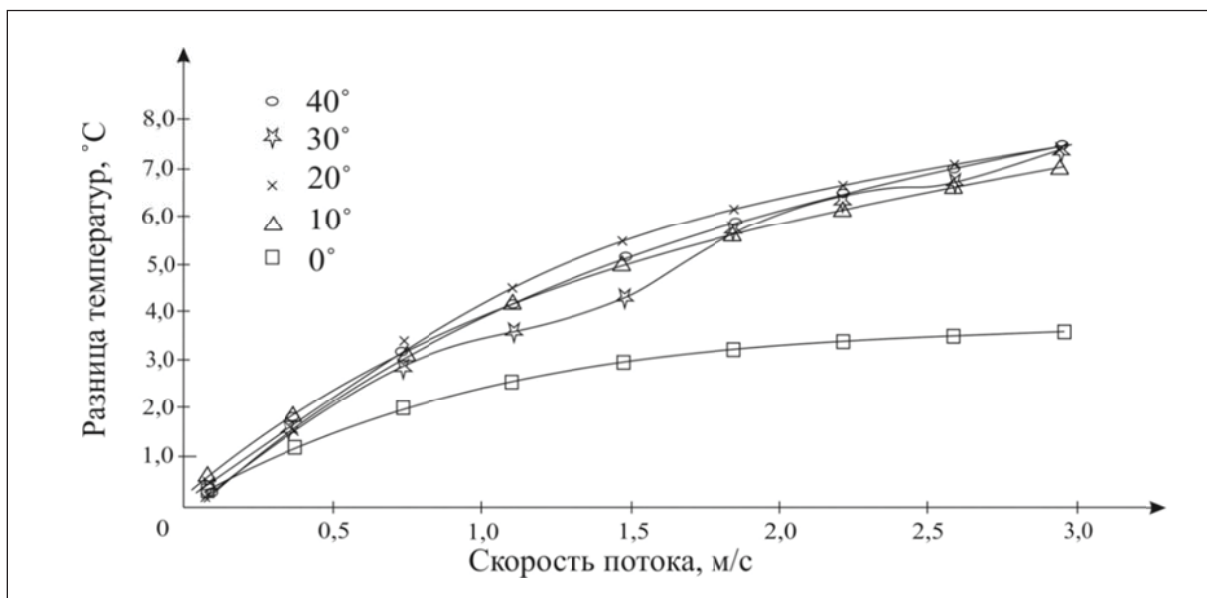


Рис. 8. Зависимость разности температур терморезисторов от угла наклона сенсора в трубе

ществ будет работать сенсор. При моделировании параметр «выделяемая мощность» на резисторах, который отвечает за нагрев, не менялся при переходе от одного газа к другому. Температура резисторов менялась при изменении среды, в которой находится сенсор. Зависимость температуры терморезистора от среды представлена в таблице 1.

Результат работы сенсора может быть как разницей температур между двумя терморезисторами, находящимся на мембране под действием потока газа, так и разницей температуры на одном из терморезисторов, т.е. идет наблюдение за потерей температуры нагревателя при увеличении скорости потока (рис.10).

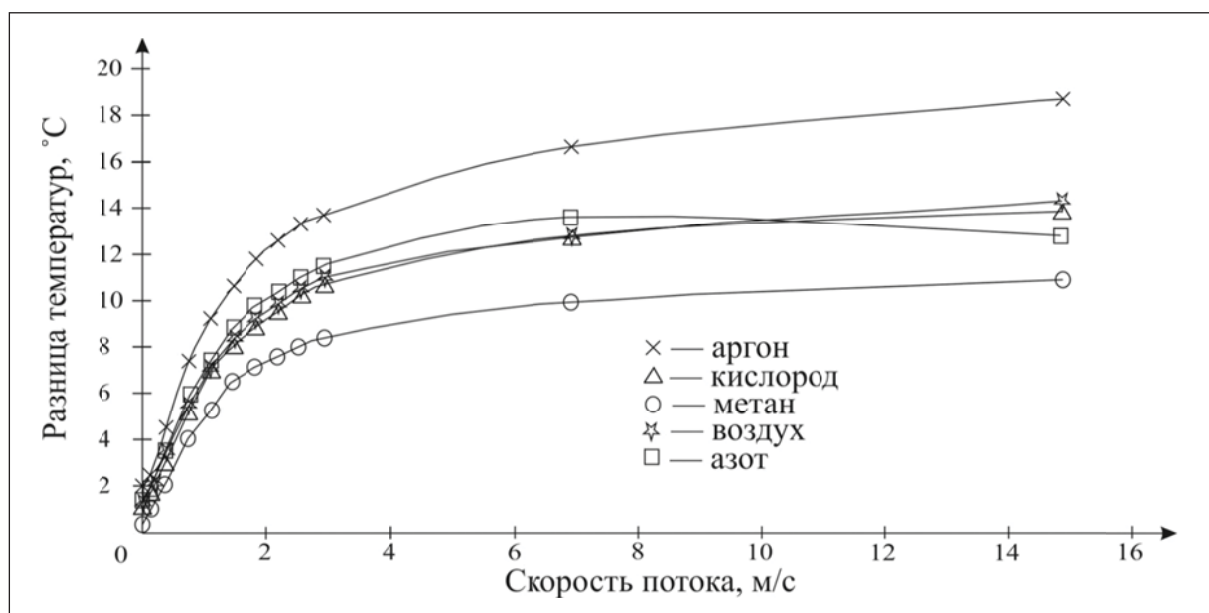


Рис. 9. Зависимость разницы температур терморезисторов от величины скорости потока при различном молекулярном составе среды

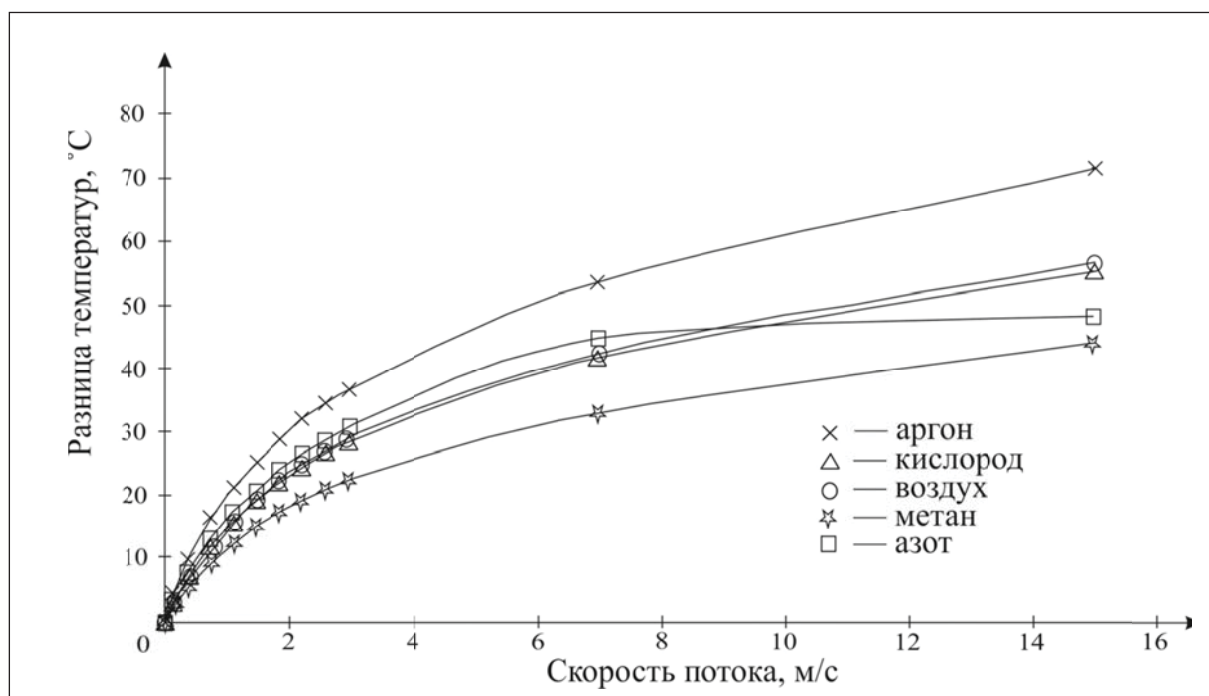


Рис. 10. График потери температуры на одном терморезисторе при увеличении скорости потока с разным молекулярным составом

Таблица 1. Зависимость температуры терморезистора от среды

Скорость потока, м/с	Температура резистора, К				
	Воздух	Азот	Кислород	Метан	Аргон
0	408,3612	412,9586	406,2631	383,4463	443,1589
3	388,5206	391,783	386,6931	368,4721	417,4773

Этот метод зачастую необходим, так как при больших скоростях потока (более 3 м/с) он обеспечивает лучшую чувствительность сенсора, что заметно в сравнении с рис. 9. Для достижения наибольшей точности измерений следует использовать оба метода считывания сигнала: на малых потоках использовать разницу температур, а на больших — метод отслеживания потери температуры на одном резисторе.

Определение механических напряжений по сдвигу частоты Рамана

При создании МЭМС-структур очень большое влияние на качество получаемых устройств имеют механические напряжения в пластинах кремния. Борьба с напряжениями растяжения/сжатия актуальна и по сей день. Как известно, напряжение в пленках структуры, как правило, приводит к растрескиванию, гофрированию или отслаиванию слоёв [14]. Механические напряжения в образце искривляют поверхность пластины, оказывая влияние в процессе проведения литографии, травления и других технологических операциях производства. Поэтому важно контролировать и управлять механическими напряжениями. Авторы сравнивают методики измерения механических напряжений на примере плёнки плазмохимического нитрида кремния на кремниевой подложке.

Применение спектроскопии комбинационного рассеяния света позволяет решить группу основных задач: определить дальний порядок (кристаллическая или аморфная структура); измерить деформации; идентифицировать состав образца, границы структур и реакции в тонких пленках; выяснить свойства сверхрешеток; определить тип примесей [17].

На пластину Si с кристаллографической ориентацией (100), диаметром 100 мм и толщиной 460 мкм был осажден на лицевую сторону плазмохимический слой Si_3N_4 толщиной 672 нм. Пленка была получена методом химического парофазного осаждения. Процесс проводился по технологии PECVD, из газовой смеси моносилана SiH_4 , аммиака NH_3 и закиси азота N_2O в трубчатом горизонтальном реакторе (ASM-PECVD).

Схема измерения образца показана на рисунке 11.

Измерения проводились на конфокальном Рамановском микроспектрометре inVia Reflex производства компании Renishaw (Великобритания). В качестве источника возбуждения использовался твердотельный лазер 532 нм мощностью 100 мВт. Мощность лазерного излучения на образце составляла 70 мВт.

В процессе измерений, учитывая деформацию пластины, возникла необходимость фокусировки лазерного пучка на промежуточных позициях вдоль радиуса. Поэтому для увеличения точности измерений было предложено всю пластину поделить на 7 локальных областей с шагом около 7 мм, сфокусировавшись на каждой области отдельно. В результате получена зависимость интенсивности сигнала от Рамановской частоты. В процессе обработки графиков была сделана аппроксимация гауссианой экспериментальных данных в программной среде Matlab по всему измеряемому диапазону (от -500 до 1500 см^{-1}), а также в окрестностях области пика Si (от 500 до 540 см^{-1}) с более мелким шагом. Было замечено, что диапазон измерений влияет на Рамановскую частоту с максимальной интенсивностью. Вследствие изгиба образца, ухудшается качество фокуса, что влечет за собой достаточно грубый шаг. Однако если анализировать данным подходом все экспериментальные данные, то найти зависимость будет несложно.

Например, для исходной кремниевой пластины, которая будет считаться ненапряженной, положение Рамановского пика ω_0 составляет 519.99 см^{-1} . Далее рассчитаем

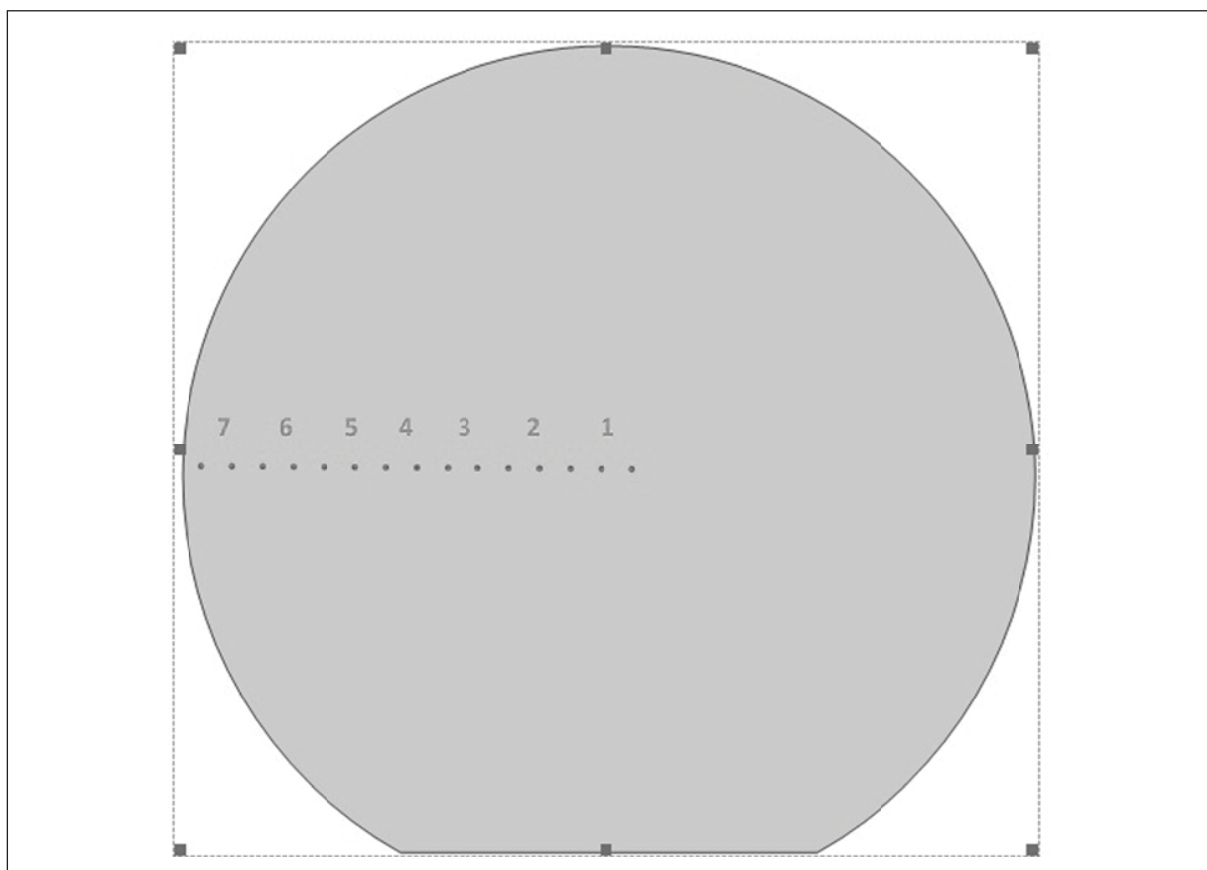


Рис. 11. Схема измерения образца

сдвиг Рамановской частоты для каждой области ω_i и вычислим по формуле (1) локальные механические напряжения σ :

$$\sigma = (\omega_i - \omega_o) \cdot K \quad (1)$$

где K – безразмерный коэффициент.

Как известно [15,16,18], для материала кремния значение K при одноосном напряжении в направлении $[100]$, сдвиг частоты Рамановского излучения на 1 см^{-1} соответствует величине напряжений 500 (МПа) . Распределение сдвига Рамановской частоты исследуемого образца представлено на рисунке 12.

Далее показана карта распределения механических напряжений в плёнке нитрида кремния (рис.13).

Из рисунка 13 можно заключить, что в плёнке нитрида кремния присутствуют отрицательные (сжимающие) напряжения в диапазоне от 310 до 400 (МПа) . Причём, в центральной области пластины величина напряжений по модулю минимальна.

Определение механических напряжений по изгибу пластины

Методика включает проведение измерений с помощью бесконтактного оптического профилометра и интерпретацию полученных с него данных: расчет величины радиуса кривизны поверхности исходя из модельного представления, а также последующее вычисление значения механических напряжений в локально выбранной области. Достигается наглядное представление полученных данных.

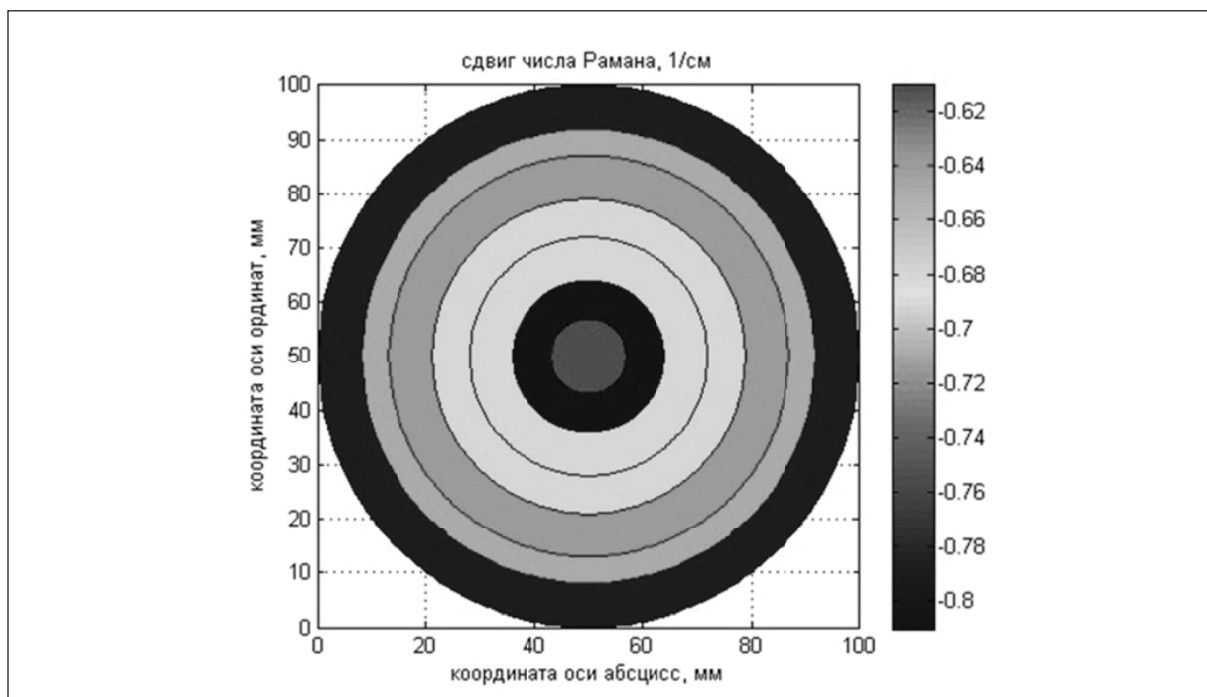


Рис. 12. Распределение сдвига Рамановской частоты на образце $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{Si}$ диаметром 100 мм

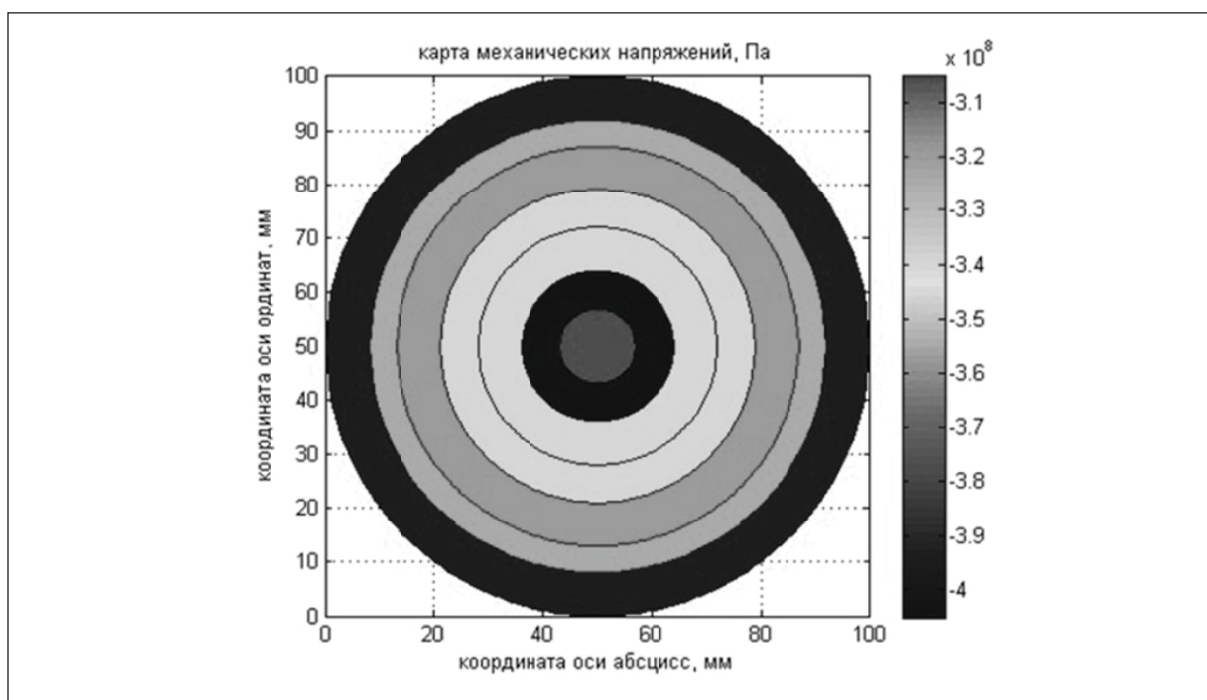


Рис. 13. Карта распределения механических напряжений в плёнке нитрида кремния

Первым шагом проанализирована геометрия поверхности рабочей пластины. Рассмотрен рельеф поверхности (рис. 14).

Проведены тривиальные геометрические преобразования, в результате которых получена формула (2) для расчёта радиуса кривизны поверхности R :

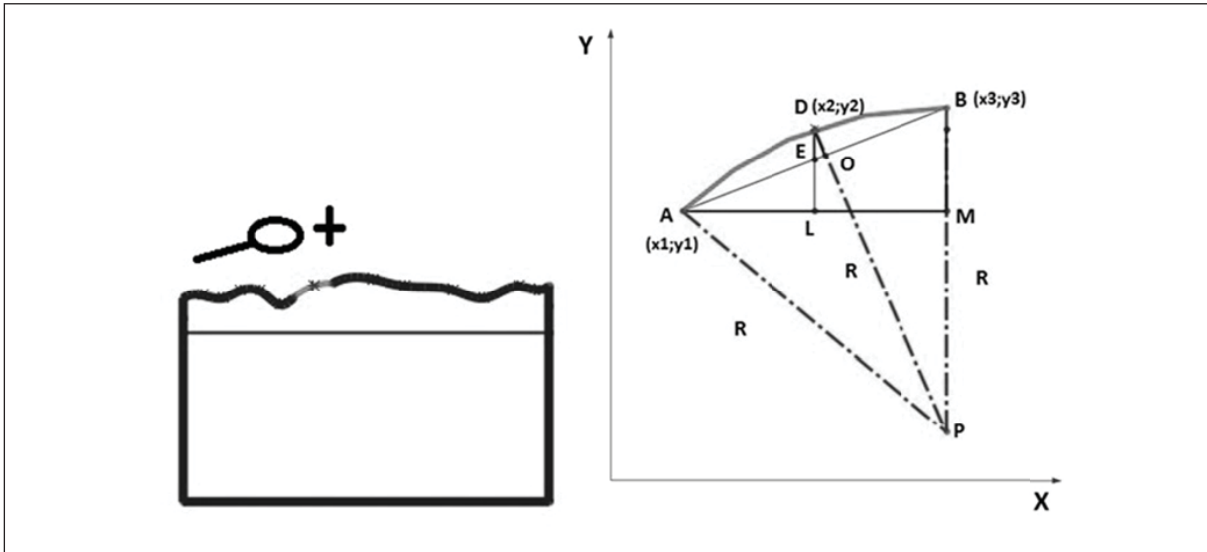


Рис. 14. Геометрия поверхности пластины для расчёта радиуса кривизны

$$R = \frac{\left\{ \frac{(x_2 - x_1) \cdot (y_3 - y_1)}{(x_3 - x_1) \cdot \sin(\arctg \frac{(x_3 - x_1)}{(y_3 - y_1)})} \right\}^2 + \left\{ \left\{ (y_2 - y_1) - \frac{(x_2 - x_1) \cdot (y_3 - y_1)}{(x_3 - x_1)} \right\} \cdot \sin \left\{ \arctg \frac{(x_3 - x_1)}{(y_3 - y_1)} \right\} \right\}^2}{2 \cdot \left\{ (y_2 - y_1) - \frac{(x_2 - x_1) \cdot (y_3 - y_1)}{(x_3 - x_1)} \right\} \cdot \sin \left\{ \arctg \frac{(x_3 - x_1)}{(y_3 - y_1)} \right\}} \quad (2)$$

Достоверность формулы (2) проверена в программной среде SolidWorks. Построена дуга ADB с произвольными значениями координат точек (x_i, y_i) . Далее произведен расчет радиуса R по формуле (2). После этого проведены отрезки BP, AP длиной R таким образом, что длина отрезков AP, DP и BP одинаковая. Замкнутость полученного контура ADBP доказывает достоверность формулы (2).

Вторым шагом было составление алгоритма вычисления величины локального радиуса кривизны поверхности по формуле (2) в программной среде Matlab [19].

Алгоритм состоит из нескольких этапов. На первом этапе была найдена полиномиальная функция, которая максимально корректно описывает полученный рельеф. После проводится сравнение значения двух ближайших точек рельефа. Если происходит возрастание функции, описывающей рельеф поверхности, то производится вычисление по формуле (2). В случае убывания знак рассчитанной величины изменяется на противоположный. В завершении величины радиусов подставляются в формулу (1) для расчета механических напряжений.

Заключительным этапом программирования являлось составление алгоритма вычисления механических напряжений по формуле (1), исходя из рассчитанных величин радиуса кривизны поверхности.

Далее проведено измерение рельефа в двух направлениях: параллельно и перпендикулярно базовому срезу до и после осаждения. Определение рельефа поверхности проводилось с помощью бесконтактного оптического профилометра Veeco Wyko NT9300.

Результаты измерения рельефа поверхности в параллельном базовому срезу направлении представлены на рисунке 15.

Из представленного графика можно сделать заключение, что после осаждения пленки нитрида кремния пластина стала более изогнутой. Учитывая, что в исходной пластине монокристаллического кремния с ориентацией (100) присутствуют

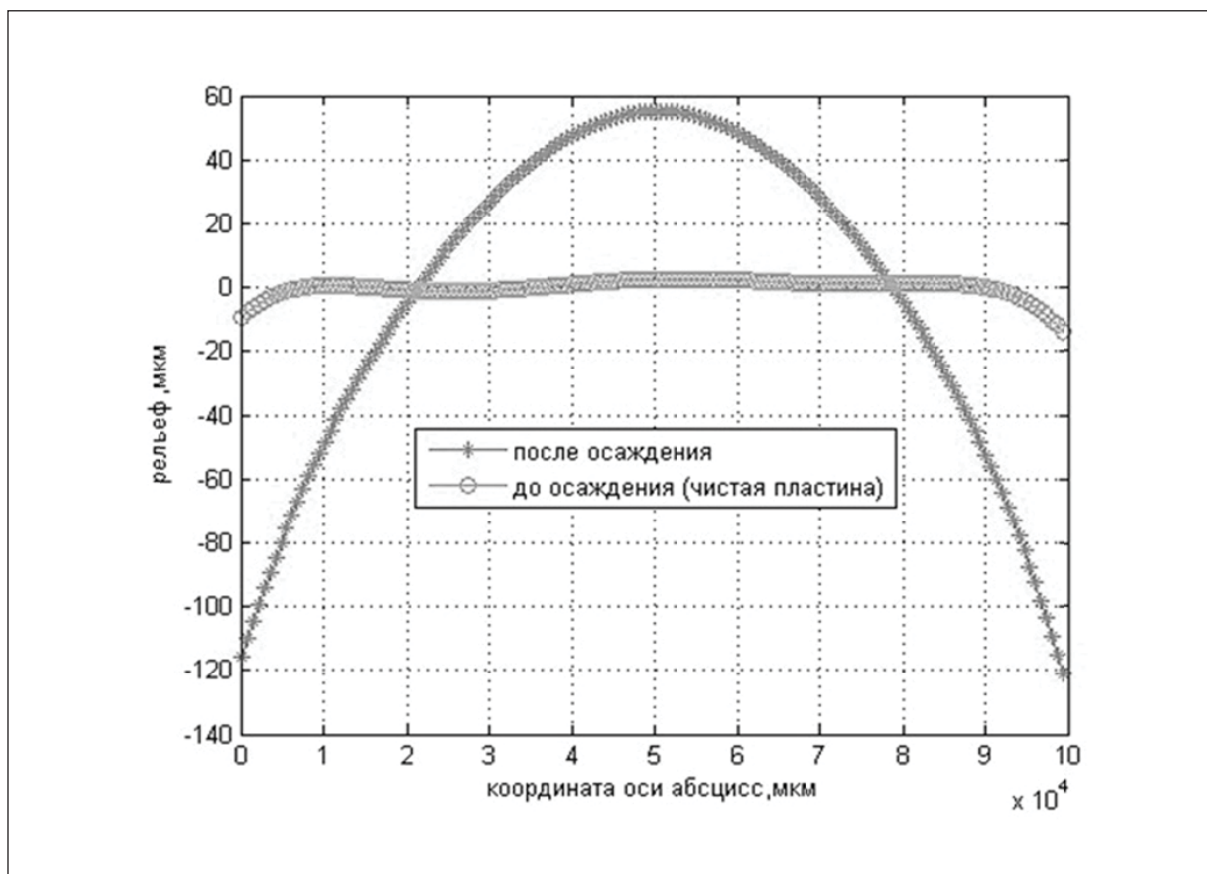


Рис. 15. Профиль поверхности в параллельном базовому срезу направлении

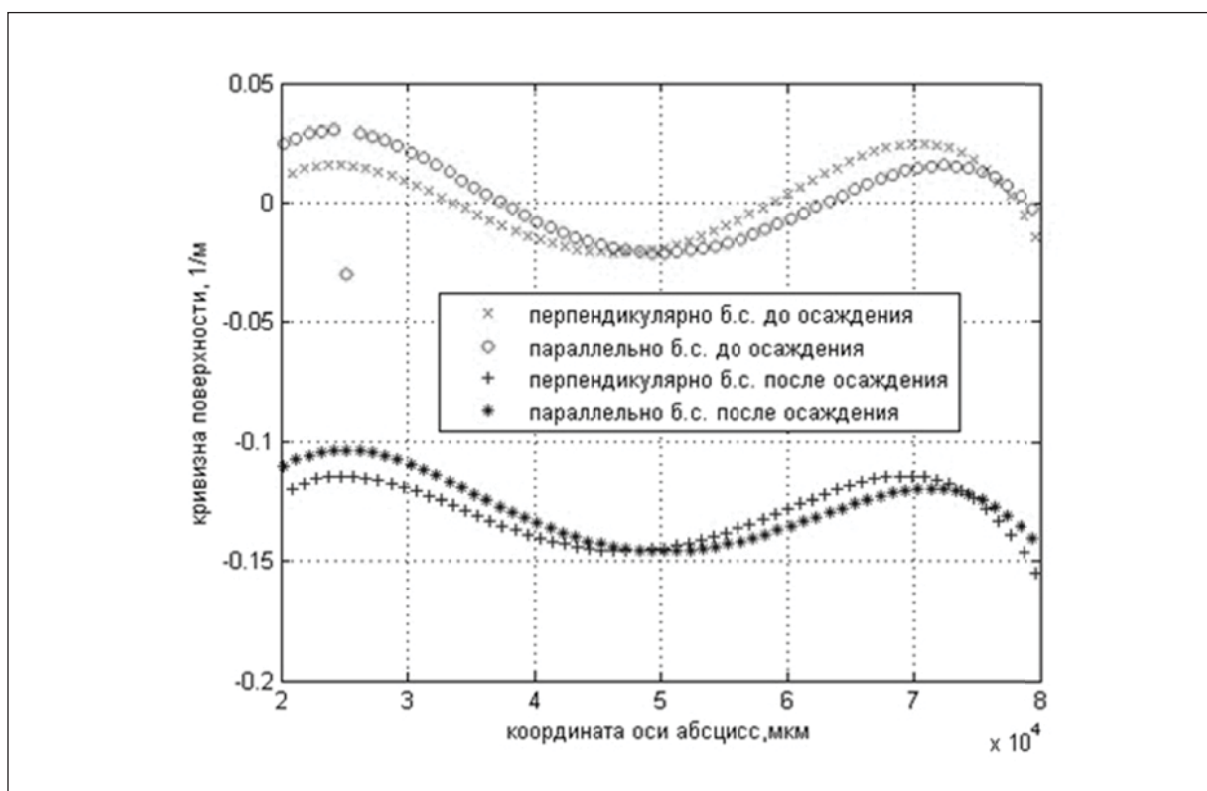


Рис. 16. Результат вычисления кривизны поверхности до и после осаждения слоя

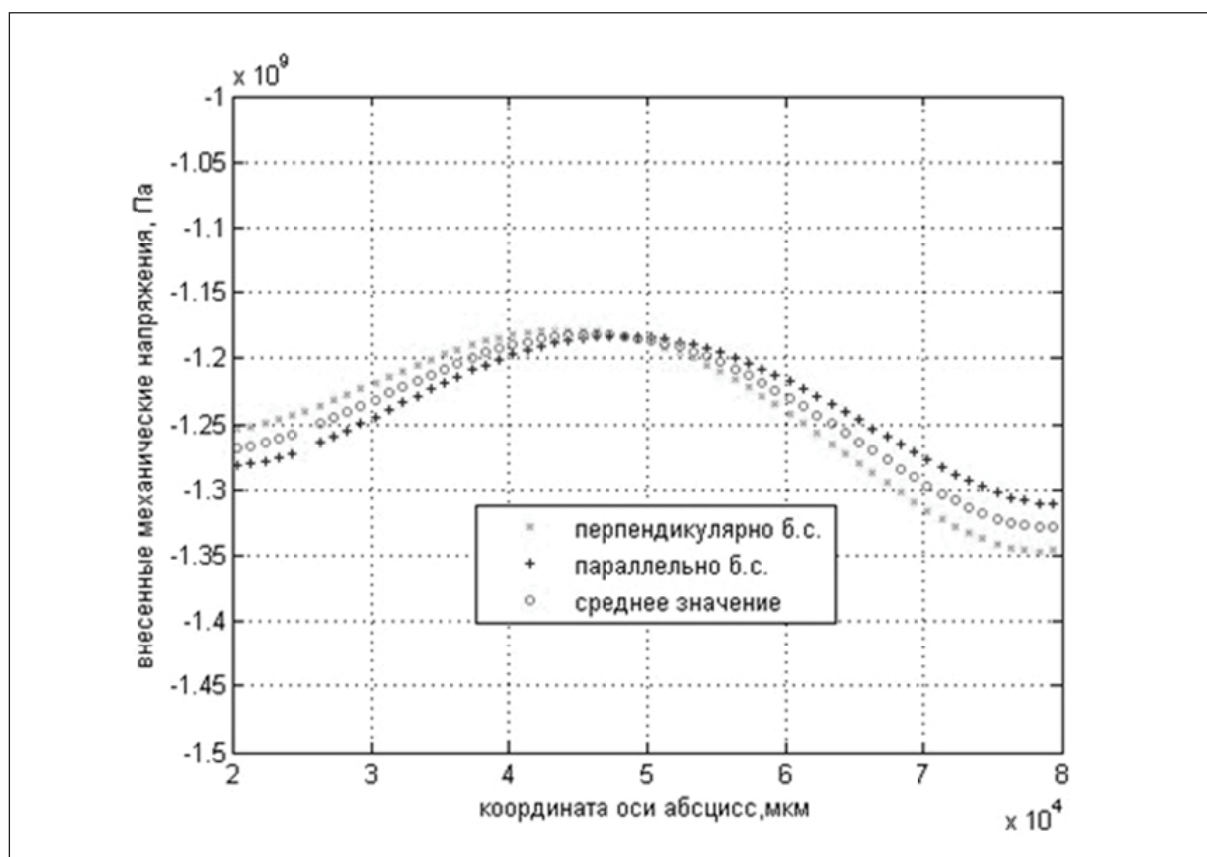


Рис. 17. Распределение механических напряжений по пластине

незначительные положительные механические напряжения, то величина напряжений увеличилась. Т.к. для состояния равновесия системы подложка-плёнка результирующая силы сжатия-растяжения должна быть равна нулю, то в плёнке Si_3N_4 отрицательные сжимающие напряжения равны по величине напряжениям в кремнии.

С помощью описанного выше алгоритма в Matlab выполнен расчёт величины кривизны поверхности до и после плазмохимического осаждения плёнки; результат представлен на рисунке 16.

Как следует из рисунка 3, после осаждения плёнки нитрида кремния величина кривизны поверхности возросла по модулю.

Далее по формуле (1) с помощью алгоритма в Matlab определены величины механических напряжений (рис.4), внесенных операцией плазмохимического осаждения 672 нм плёнки Si_3N_4 , где постоянная двухосного модуля ($E/(1-\nu_s)$) в кристаллографической плоскости образца (100) составляет 180,5 ГПа [14].

Из представленного графика видно, что максимальное напряжение на пластине составляет -1,35 ГПа. Результаты позволяют локализовать области с максимальной величиной напряжения. Сравнения значения полученного максимального напряжения и критического напряжения для данного материала, можно предотвратить растрескивание структуры, сделав, например, термообработку [21] структуры с целью минимизации напряжений. Также рассчитано среднее значение напряжения по пластине в целом, которое составляет -1,25 ГПа, что по порядку величины соответствует [19,22,23].

Эксперимент

Проведена оптимизация технологического маршрута формирования мембраны для тепловых датчиков с целью минимизации механических напряжений внутри мембраны. В процессе проведения эксперимента использовалась методика определения механических напряжений по изгибу пластины, т.к. приоритетным параметром являлась планарность поверхности, а не идентификация состава образца.

На утоненной пластине монокристаллического кремния толщиной 460 мкм с кристаллографической ориентацией (100) был выращен термический оксид кремния толщиной 0.6 мкм. Далее методом PECVD осажден слой нитрида кремния толщиной 0.13 мкм. После этого проведено плазмохимическое осаждение SiO_2 толщиной 0.4 мкм. Далее сделана термообработка образца в сухом кислороде при температуре 950 °C в течение 30 мин. Финальной технологической операцией, перед осаждением чувствительного элемента из Pt, было осаждение 0.13 мкм высокотемпературного Si_3N_4 . Технологический маршрут представлен на рисунке 18.

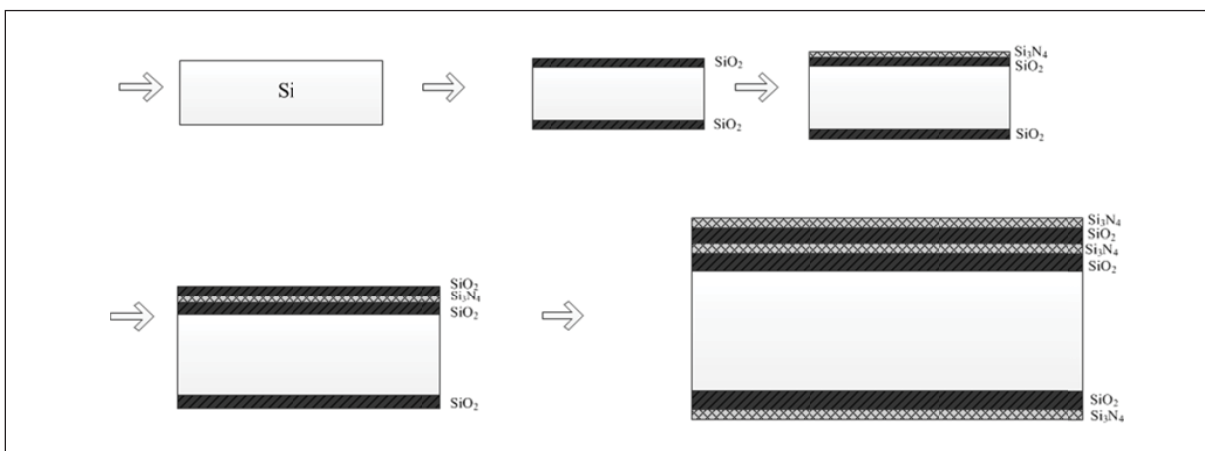


Рис. 18. Технологический маршрут

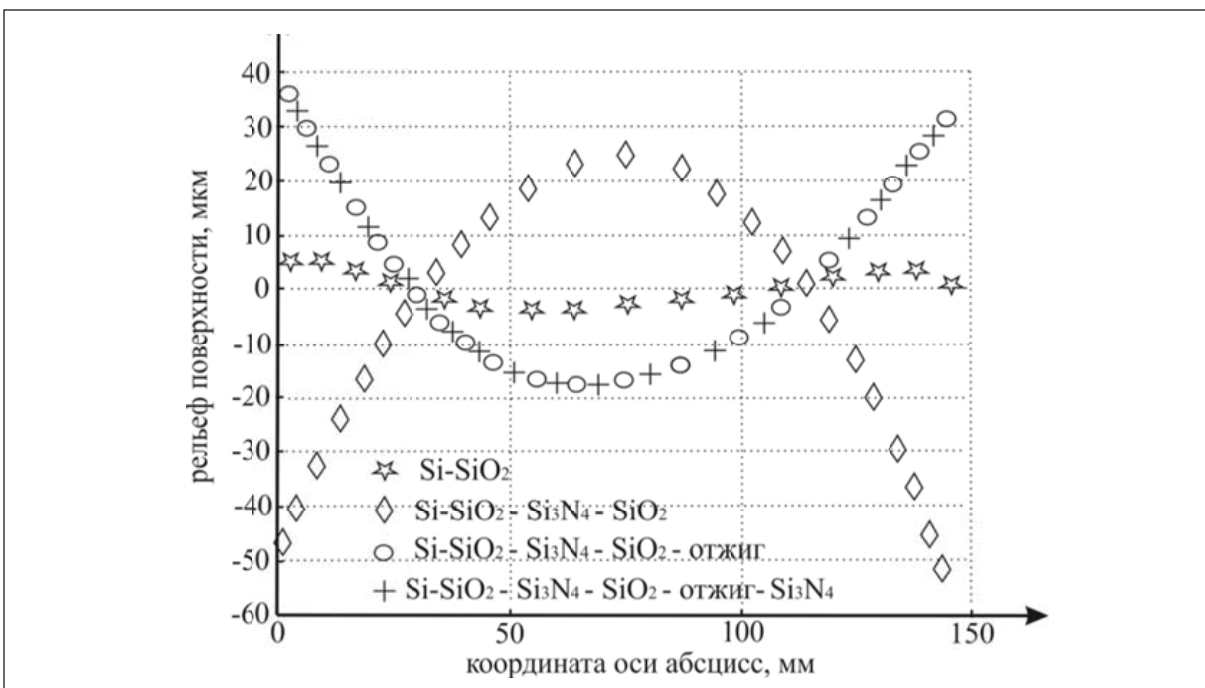


Рис. 19. Измерение рельефа поверхности исследуемого образца

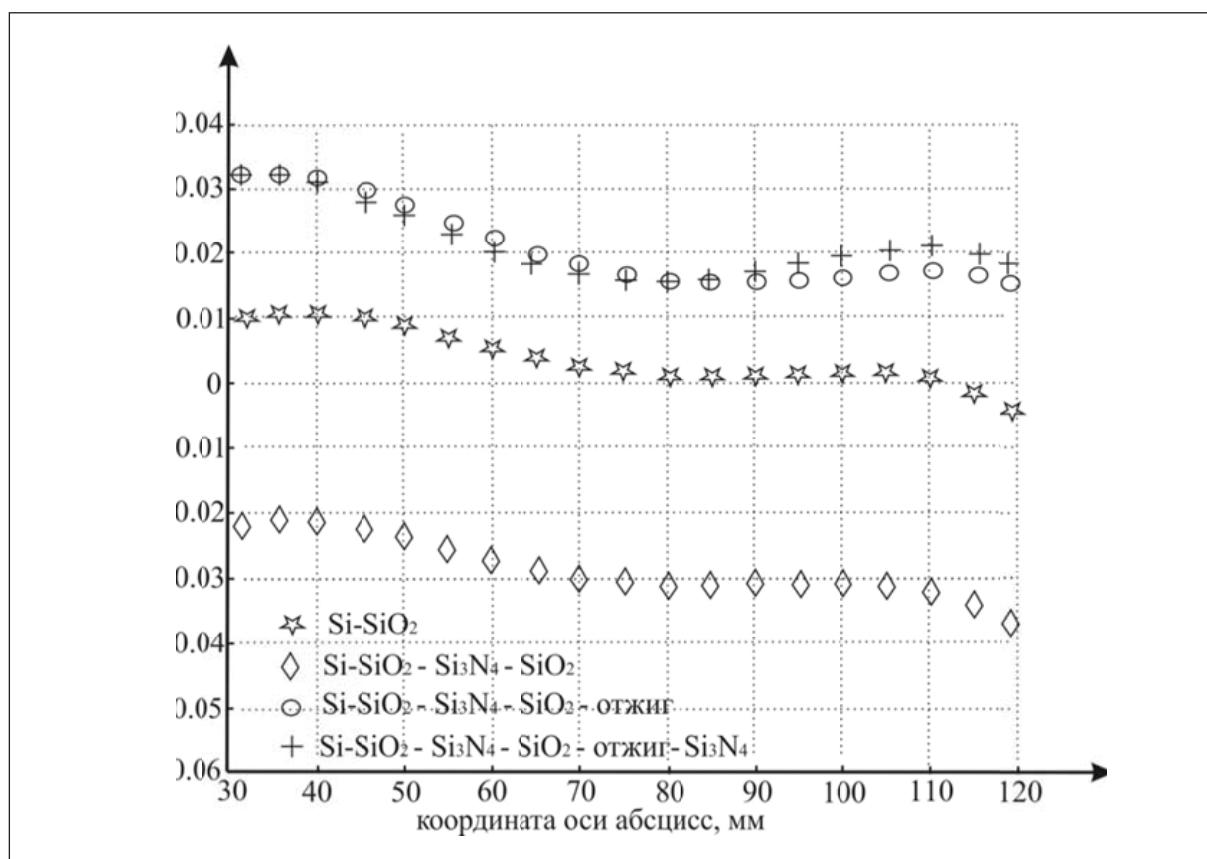


Рис. 20. Расчёт кривизны поверхности исследуемого образца

Проведено измерение рельефа поверхности исследуемого образца с помощью бесконтактного оптического профилометра. Шаг измерения между соседними точками поверхности составляет 0.28 мкм . Площадь кристалла составляет не менее 1 мм^2 . Таким образом, обеспечивается наглядное представление данных по поверхности каждого кристалла пластины. Результаты измерений и расчётов в направлении перпендикулярно базовому срезу представлены на рисунках 19 и 20.

Из рисунка 19 можно заключить, что проведение отжига изменило знак величины стрелы прогиба. После операции осаждения высокотемпературного нитрида кремния рельеф поверхности остался неизменным.

Из рисунка 20 видно, что в четырехслойной мембране величина кривизны поверхности не изменилась после осаждения верхнего нитрида кремния. Далее сделан расчёт механических напряжений в исследуемом образце по методу Стони(1).

На рисунке 21 представлен расчёт механических напряжений.

Из рисунка 21 можно заключить, что в четырехслойной мембране присутствуют незначительные положительные механические напряжения. Следовательно, уменьшается вероятность гофрирования поверхности. Значит, после плазмохимического травления пластины с обратной стороны, структура будет «слегка натянутой», что позволит повысить прецизионность измерений.

Выводы

На основании проведенной работы установлено, что из рассмотренных возможных конфигураций сенсора наилучшим с точки зрения чувствительности является вариант с

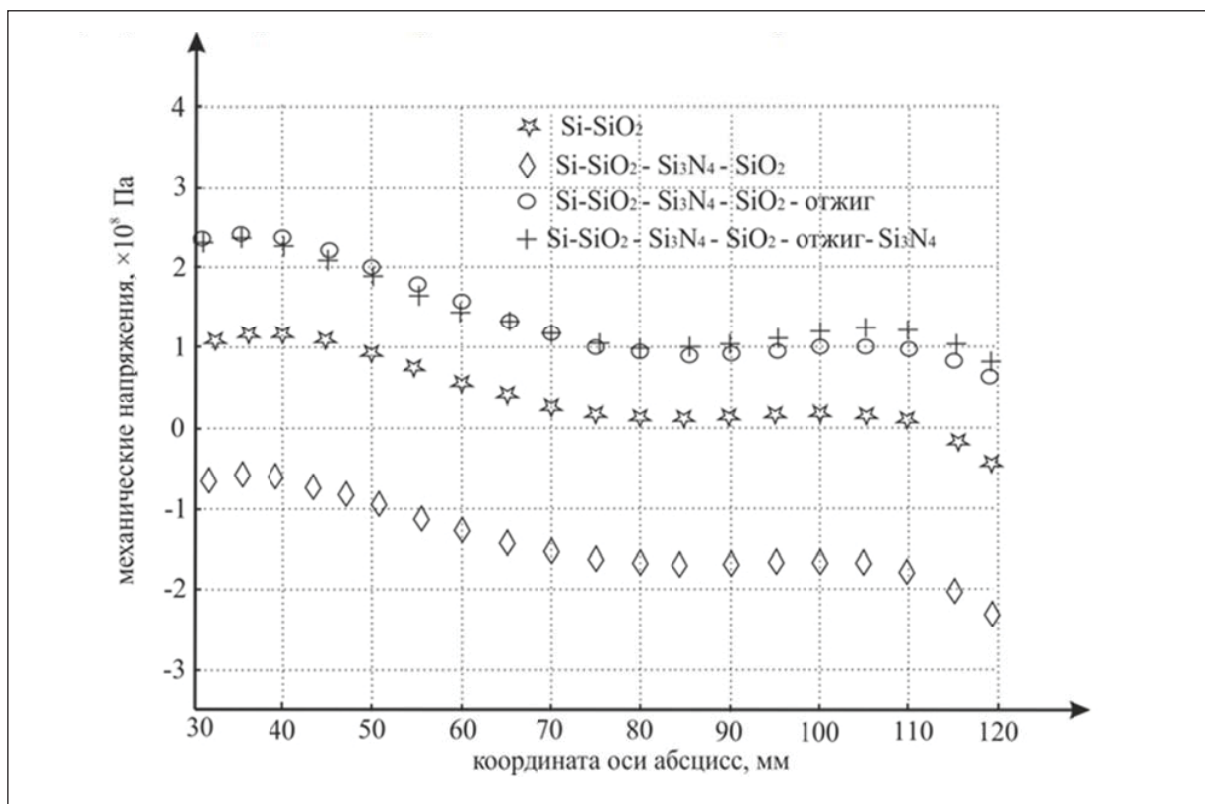


Рис. 21. Расчёт механических напряжений исследуемого образца

нанесенными на обратную сторону мембраны терморезисторами и расположением на крыле. Показана схожесть экспериментальных и полученных в ходе численного моделирования выходных характеристик сенсора. Продемонстрировано, что улучшение аэродинамики чувствительного элемента ведет к увеличению чувствительности устройства. Наглядно показано, что поворот конструкции на угол, больший, чем на 10° к потоку газа, обеспечивает повышение чувствительности в 2 раза. Установлено, что молекулярный состав среды влияет на чувствительность сенсора.

Проанализированы и апробированы две методики определения механических напряжений: с помощью профилометра по изгибу пластины и методом комбинационного рассеяния света по сдвигу частоты Рамана. Выполнена оптимизация технологического маршрута формирования мембраны для тепловых датчиков с целью минимизации механических напряжений внутри мембраны для предотвращения растрескивания, гофрирования или отслаивания слоёв.

Поддержка. Работа была выполнена при поддержке Минобрнауки России, ГК № 3.2501.2014/К, с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Микросистемная техника и электронная компонентная база» МИЭТ.

Литература

1. Вернер В.Д., Мальцев П.П., Сауров А.Н., Чаплыгин Ю.А. Синергетика миниатюризации: микроэлектроника, микросистемная техника, наноэлектроника // Микросистемная техника. - 2004. - N 7. - С. 23-29
2. Беспалов В.А., Васильев И.А., Дюжев Н.А., Мазуркин Н.С., Новиков Д.В., Попков А.Ф.. Моделирование первичного преобразователя скорости потока газа мембранного типа // Известия Вузов. Электроника. №3, 2014, с. 50-56.

3. Колесов В.П. Основы термохимии // М.: Изд-во МГУ. 1996. 205 с.
4. Барышников С.В., Чарная Е.В., Милинский А.Ю., Шацкая Ю.А.. Диэлектрические и калориметрические исследования KNO_3 в порах наноразмерных силикатных матриц МСМ-41 // Физика твердого тела, том 54, вып. 3, с. 594-599, 2012
5. Паников Т.Л., Бритвин С.Н.. Об использовании дифференциальной сканирующей калориметрии для исследования структурных особенностей органических и неорганических соединений // Ресурсный центр «Рентгенодифракционные методы исследования», Санкт-Петербургский государственный университет, с. 1-4, 2013
6. Бугаева А.Ю., Белый В.А. Метод дифференциальной сканирующей калориметрии для исследования наноматериалов // Учреждение Российской академии наук Институт химии Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар, с. 210-213, 2011.
7. Замышляева О.Г. (Со)полимеры различной архитектуры на основе перфторированных гидридов германия: синтез, структура, свойства // Дис. д-ра хим. наук 02.00.06, 2013.
8. Еськов А.В. Твердотельные охлаждающие свойства на основе электрокалорического эффекта в сегнетоэлектрических материалах // Дисс. кан-та тех. наук 05.27.01, 2014.
9. Смирнова Н.Н., Захарова Ю.А., Замышляева О.Г.. Калориметрическое изучение сшитого (со)полимера на основе перфторированных гидридов германия // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского, №1, стр. 91-99, 2011.
10. Измеритель потока / Дюжев Н.А. // Патент РФ №2014140442/28
11. N. A. Djuzhev, D. Novikov, V. Ryabov, Application of the Streamlined Body for Properties Amplification of Thermoresistive MEMS Gas Flow Sensor // Solid State Phenomena, Vol. 245, p. 247-252, 2016
12. Sinha A. K., Levinstein H. J., Smith T. E. Thermal stresses and cracking resistance of dielectric films (SiN , Si_3N_4 , and SiO_2) on Si substrates // Journal of Applied Physics. Vol. 49, p. 2423 – 2426, 1978

MATHEMATICAL MODELING AND STUDY OF OPERATION CONDITIONS OF MEMBRANE TYPE FLOW SENSOR

N.A.Djuzhev¹, E.E. Gusev¹, M.A. Makhiboroda¹, M.V. Kateev¹,
K.V. Ponkratov²

¹National Research University of Electronic Technology, Moscow

²LLC “Renishaw”

bubbledouble@mail.ru

Received 19.08.2016

In this work it was the primary device is simulated gas flow rate through membrane type calorimetric principle of operation. We present two methods for determining mechanical stress: using profiler for bending plates and method of Raman scattering of light by the Raman shift frequency. The optimization of the process flow of forming a membrane for thermal sensors in order to minimize mechanical stresses within membrane. A comparative analysis of numerical simulation based thermistor temperature difference in horizontal arrangement of the sensor element with experiment. Considered include sensor structure. We get results of numerical modeling of different variants of the sensor. A search for optimal position of the sensor in pipe to flow gas to be measured in order to achieve maximum sensitivity. The influence of the working environment on the sensor performance. The results allow us to find the optimal configuration for the moment and location of thermal sensor.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МАСШТАБИРОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ НОРМ НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ЧАСТОТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛАНАРНОГО АВТОЭМИССИОННОГО ТРИОДА С ЛЕЗВИЙНЫМ ПОЛЕВЫМ ЭМИТТЕРОМ

Н.А. Дюжев, М.А. Махиборода, Т.А. Грязнева, Е.А. Агарков,
Г.Д. Демин

Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

gddemin@gmail.com

Поступила 19.08.2016

В настоящее время наблюдается стремительное возрождение вакуумной электроники, что связано с прогрессом в разработке триодных полупроводниковых устройств с наноразмерным вакуумным каналом, сочетающих в себе высокое быстродействие, радиационную стойкость, устойчивость к агрессивной среде и экстремальной температуре, а также малое энергопотребление [1, 2]. В связи с этим важной задачей становится подбор оптимальных рабочих характеристик вакуумного триода, обеспечивающих устойчивую полевую эмиссию с учётом вариации геометрии конструкции при переходе в субмикронную область проектирования. В работе представлена модель расчёта полевой эмиссии электронов лезвийного катода с наноразмерной кромкой в планарной автоэмиссионной триодной структуре. На основе исследований данной модели выбраны значения радиуса закругления кромки катода, расстояния «катод-анод» и «катод-сетка», позволяющие достичь максимального усиления электрического поля на поверхности катода. Для выбранной конфигурации также проведено сравнение электрических и частотных характеристик триода, определяющих тенденцию изменения параметров эмиссии в процессе масштабирования латеральных размеров исследуемой структуры. В качестве параметров масштабирования были использованы характерные для современной микроэлектронной промышленности топологические проектные нормы в интервале от 90 до 22 нм (90 нм, 65 нм, 45 нм, 32 нм и 22 нм). Полученные результаты могут быть полезны для технологической реализации вакуумных устройств следующего поколения, применимых в космической отрасли, сверхбыстрой радиоэлектронике и телекоммуникационных системах.

УДК 537.533.2

Введение

В процессе перехода к субмикронным технологиям КМОП изготовления полупроводниковых устройств с топологическими нормами проектирования 90 нм и ниже одной из ключевых задач становится сохранение высокого быстродействия и достаточно малого энергопотребления в условиях технологической адаптации устройства к дальнейшему масштабированию. Однако рассеяние носителей заряда на решетке в полупроводнико-

вом материале, присутствие дефектов и дополнительные утечки тока в МОП транзисторах, возникающие при уменьшении технологических размеров, приводят к быстрой деградации рабочих характеристик. Напротив, баллистический транспорт в вакууме обеспечивает стремительный пролет электронов от катода к аноду (максимальная скорость порядка 10^{10} см/с) при полном отсутствии столкновений, что, в свою очередь, является залогом долгого времени жизни носителей и высокого отношения частоты к выходной мощности. Последующие разработки вакуумных трубок и полевых автокатодов нашли широкое применение в сфере телевизионных и компьютерных технологий, в создании микродисплеев, высокочастотной радиоэлектроники и микрофокусных рентгеновских источников. Однако вакуумная микроэлектроника все еще нуждалась в герметичной упаковке, что останавливало процесс схемотехнической интеграции, а также долгое время серьезно проигрывала кремниевым технологиям по параметрам мощности, функциональности и масштабирования. Последние результаты экспериментальной разработки полупроводникового триода с наноразмерным вакуумным каналом в 2012 г., полученные независимо в пионерских работах Кима и Хана [2, 3], открывают путь к новому шагу в развитии вакуумной электроники в наномасштабе, что позволит совместить преимущества малобюджетной, надежной полупроводниковой компонентной базы со значительной скоростью переноса электронов в вакуумной среде, также устойчивой к агрессивным воздействиям и высокой температуре. Более того, подбор материалов с низкой работой выхода и эффективной полевой эмиссией может перевести пороговые напряжения управляющего затвора для включения канала и напряжение питания на стоке в низковольтную область (менее 1 В), что делает параметры такой триодной системы сравнимыми с современными структурами полупроводниковых МОП транзисторов. Поскольку длина свободного пробега электронов в воздухе находится в диапазоне 10-100 нм, для продемонстрированных 150 нм и 20 нм длин канала триода вероятность соударения с молекулами газа пренебрежимо мала, поэтому воздушный зазор также может выполнять роль вакуума в новой концепции автоэмиссионных устройств [4]. Кроме того такой подход предотвращает деградацию эмиссионного катода в процессе постоянного его использования, что повышает долговечность триодов с вакуумным каналом в различных отраслях применений, от астронавтики до ядерной индустрии и телекоммуникаций.

Важной задачей проектирования становится выбор оптимальной конструкции и материалов триодной структуры, что позволит достигнуть значительных эмиссионных свойств, снизить токи утечки в процессе масштабирования и обеспечить хорошую воспроизводимость параметров при размещении устройств на схеме. Несмотря на распространенную конструкцию вакуумного триода с вертикальным полевым эмиттером и круговой апертурой сеточного электрода (так называемая автоэмиссионная структура Спиндта [5]), в матрице вертикальных автоэмиссионных структур технологически трудно добиться воспроизведения идентичных геометрических параметров триодов, что усложняет интеграцию вакуумной электроники в КМОП процесс изготовления полупроводниковых интегральных микросхем. К тому же работа устройства в сверхвысоком диапазоне частот требует обеспечения низкой емкости между катодом и управляющими электродами, что становится возможным в случае использования триодов с плоскостным полевым эмиттером [6], где размер конструкции точно контролируется литографическими нормами проектирования. Приближение проектных норм к нанометровому уровню открывает ряд новых технологически реализуемых перспектив применения горизонтальных вакуумных триодов в космической отрасли, сверхбыстрой электронике и беспроводных телекоммуникациях, что требует дополнительного рассмотрения полевых и частотных характеристик триодных структур с плоским эмиттером, варьируемых в процессе их миниатюризации.

Таким образом, в работе освещаются вопросы влияния масштабирования и вариации геометрических параметров на рабочие характеристики горизонтальной триодной структуры для проектных норм в диапазоне от 90 до 22 нм. В разделе 1 приводится подробное описание выбранной конструкции горизонтального автоэмиссионного триода, где указаны геометрические параметры системы, варьируемые в процессе моделирования. В разделе 2 представлено сравнение форм-факторов усиления поля на поверхности катода в зависимости от геометрических параметров горизонтальной конструкции автоэмиссионного триода. Раздел 3 посвящен сравнению вольт-амперных и частотных характеристик триода в зависимости от технологических норм проектирования, что позволяет определить тенденцию изменения параметров эмиссии и быстродействия триода в процессе масштабирования. В заключение, приводятся предложения по дальнейшей оптимизации выбранной конструкции триода с плоскостным полевым эмиттером.

1. Выбранная конструкция автоэмиссионного триода с плоскостным эмиттером, параметры масштабирования и методика моделирования

В качестве конструкции планарного триода с эмиттером лезвийного типа была выбрана конфигурация, представленная на рис. 1, где показан катод острейного типа с радиусом закругления r , размещенный между двумя сеточными электродами противополо-

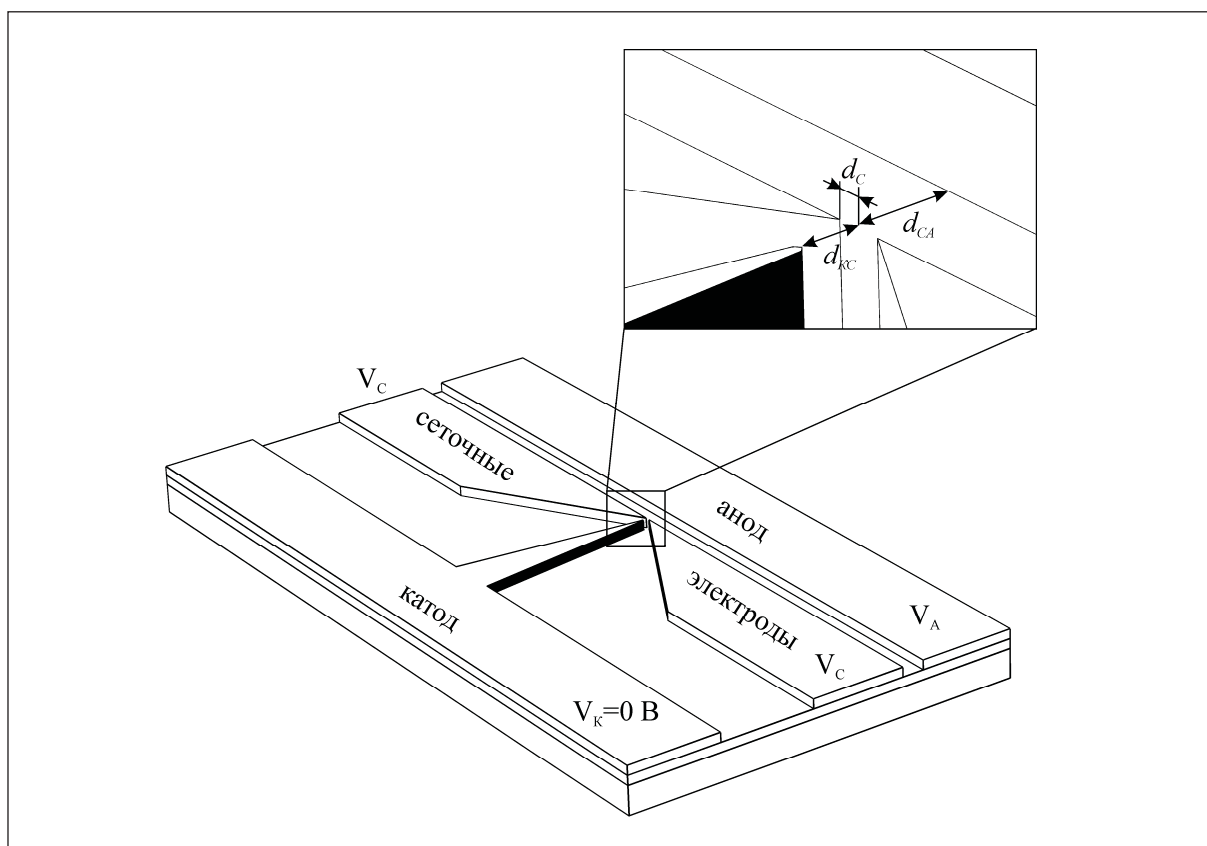


Рис. 1. Конструкция автоэмиссионного триода с плоскостным полевым эмиттером, где d_C – заданная технологическая норма проектирования или горизонтальное расстояние между острием катода и управляющим сеточным электродом, d_{KC} – расстояние между катодом и управляющими сеточными электродами, d_{CA} – расстояние между управляющими сеточными электродами и анодом, $d_{KA} = d_{KC} + d_{CA}$ – расстояние между катодом и анодом, r – радиус острия катода. В обозначениях: V_K – потенциал на катоде, V_A – потенциал на аноде, V_C – потенциал на сеточных электродах.

ложно аноду. Материалом сеточных электродов является Al, в то время как катод и анод триода сформированы из Si на кремниевой подложке с тонким окислом SiO₂. В общем случае полагается, что напряжение на аноде V_A , напряжение на сеточных электродах V_C , а потенциал V_K , прикладываемый к катоду, равен нулю.

Для получения зависимостей полевых и частотных характеристик триода от параметров масштабирования варьируются следующие параметры: d_{KC} - расстояние между катодом и управляющими сеточными электродами (расстояние «катод-сетка»), d_C - горизонтальное расстояние между острием катода и управляющим сеточным электродом, $d_{KA} = d_{KC} + d_{CA}$ - расстояние между катодом и анодом (расстояние «катод-анод»), где d_{CA} - расстояние между управляющими сеточными электродами и анодом (расстояние «сетка-анод»).

Поскольку известно, что с уменьшением радиуса острия эмиттера возрастает электрическое поле на поверхности катода, далее в моделировании взят минимальный радиус r , равный 5 нм. Под технологической нормой проектирования в данной автоэмиссионной системе подразумевается минимальный литографический размер, который устанавливается значением d_C , что определяет горизонтальное расстояние между острием катода и управляющим сеточным электродом. Расстояние d_C соответствует следующим топологическим проектным нормам: 90 нм, 65 нм, 45 нм, 32 нм и 22 нм. Размер расчётной области равен 4.25 мкм на 8 мкм. По умолчанию расстояние d_{KA} полагается равным 500 нм, при этом сеточные электроды расположены на уровне центра кривизны поверхности катода, то есть расстояние d_{KC} равняется - 5 нм. В ходе моделирования каждый из параметров d_{KA} и d_{KC} варьируется в заданном диапазоне.

В качестве программного пакета моделирования выбран Comsol MultiPhysics [7], объединяющий решения из различных областей физики в единую модель, что важно при дальнейшем расчёте вольт-амперных и частотных характеристик триода. Далее в соответствии с выбранной моделью в разделах 2 и 3 представим результаты моделирования форм-факторов усиления поля на поверхности катода, а также основные полевые характеристики триода с плоскостным полевым эмиттером.

2. Сравнение форм-факторов усиления поля на поверхности катода в зависимости от параметров конструкции автоэмиссионного триода

Одной из основных характеристик, определяющих эффективность токовой эмиссии в конструкции вакуумного триода, является показатель усиления электрического поля на поверхности катода или форм-фактор катода. Данный форм-фактор может быть представлен в виде двух составляющих, определяющих связь между локальным электрическим полем $E_{лок}$ вблизи поверхности острия катода и разностью потенциалов «катод-сетка» $\varphi_{KC} = V_K - V_C$ и «катод-анод» $\varphi_{KA} = V_K - V_A$, что в случае $V_K = 0B$ записывается в следующем виде:

$$\beta_C = -\frac{dE_{лок}}{d\varphi_{KC}} = \frac{dE_{лок}}{dV_C}, \quad \beta_A = -\frac{dE_{лок}}{d\varphi_{KA}} = \frac{dE_{лок}}{dV_A}, \quad (1)$$

где β_C - форм-фактор усиления поля от сеточных электродов, β_A - форм-фактор усиления поля от анода. Поскольку $\vec{E}_{лок} = \vec{E}_C + \vec{E}_A$, где $E_C = E_{лок}(V_A = 0B) = \beta_C V_C$, $E_A = E_{лок}(V_C = 0B) = \beta_A V_A$ - индивидуальный вклад в напряженность электрического поля от сеточных электродов и анода соответственно, то форм-факторы β_C и β_A в линейном приближении электрических полей от потенциалов можно представить как:

$$\beta_C = \frac{E_{лок}(V_A = 0)}{V_C}, \quad \beta_A = \frac{E_{лок}(V_C = 0)}{V_A} \quad (2)$$

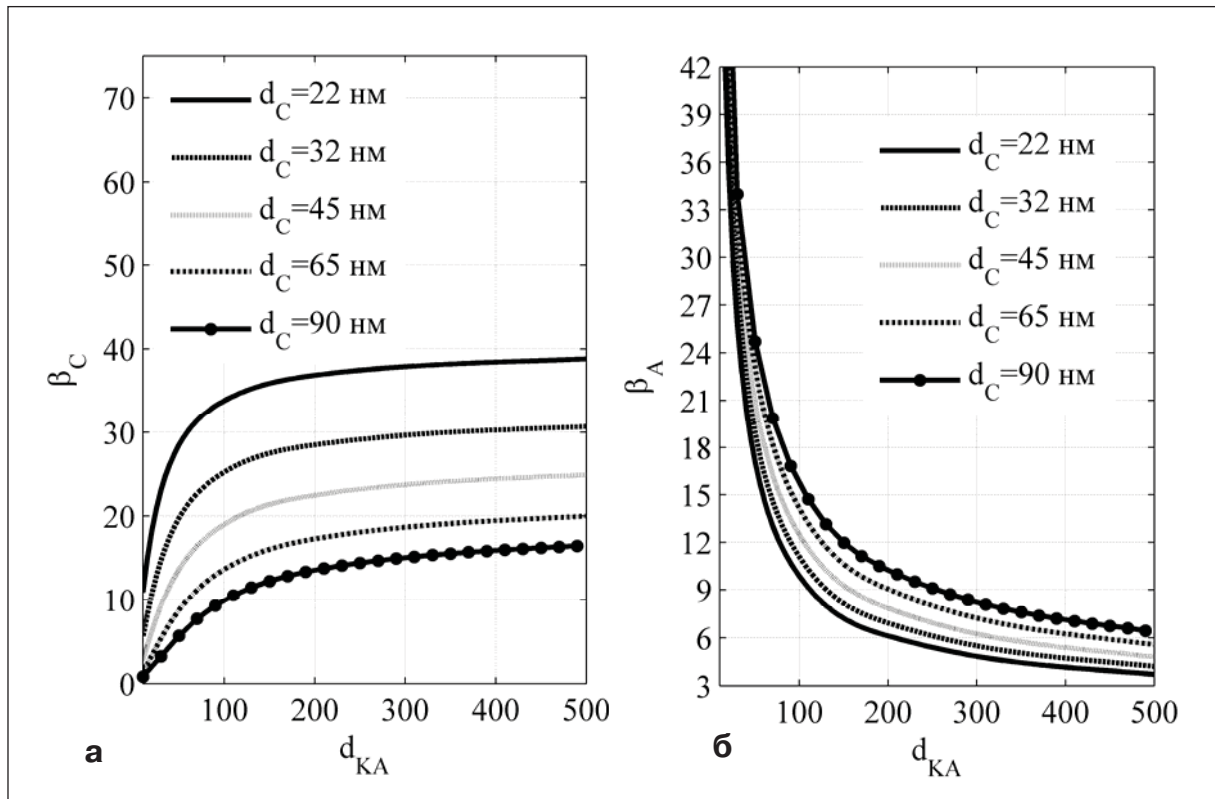


Рис. 2. Зависимость форм-факторов усиления электрического поля на поверхности катода, индуцированных влиянием (а) сеточных электродов и (б) анода от расстояния d_{KA} «катод-анод» для различных топологических норм проектирования.

На рис. 2 представлены монотонные зависимости форм-факторов усиления поля от расстояния «катод-анод» для различных норм масштабирования, которые указывают на ослабление влияния анода и усиление влияния сетки при увеличении значения d_{KA} . При этом заметно, что в диапазоне длин $d_{KA} > 90$ нм форм-фактор β_C стремится к насыщению, в то время как форм-фактор β_A значительно уменьшается с возрастанием d_{KA} .

В свою очередь, зависимость форм-факторов от расстояния «катод-сетка» представляется немонотонной и обладает экстремумом, что характеризует смену предпочтительного влияния каждого из электродов формирования электрического поля при сдвиге сетки относительно поверхности катода. При этом максимальное значение β_C соответствует значению $d_{KC} = 5$ нм для 22 нм проектных норм, когда сеточные электроды расположены на уровне острия катода, а минимальное значение β_A для той же нормы проектирования наблюдается при значении $d_{KC} = 30$ нм, что показано на рис. 3. Также стоит учесть, что в этом случае β_C в несколько раз выше β_A для заданной величины $d_{KA} = 500$ нм, что легко понять из рис. 2.

Таким образом, на основе проведенного моделирования форм-факторов усиления электрического поля можно выбрать оптимальные параметры рассматриваемой триодной структуры, позволяющие добиться максимального электрического поля при том же напряжении на электродах. Поскольку управление электрическим полем $E_{лок}$ предполагается осуществлять преимущественно посредством сеточных электродов, далее будем полагать, что наиболее предпочтительным в конструкции триода является

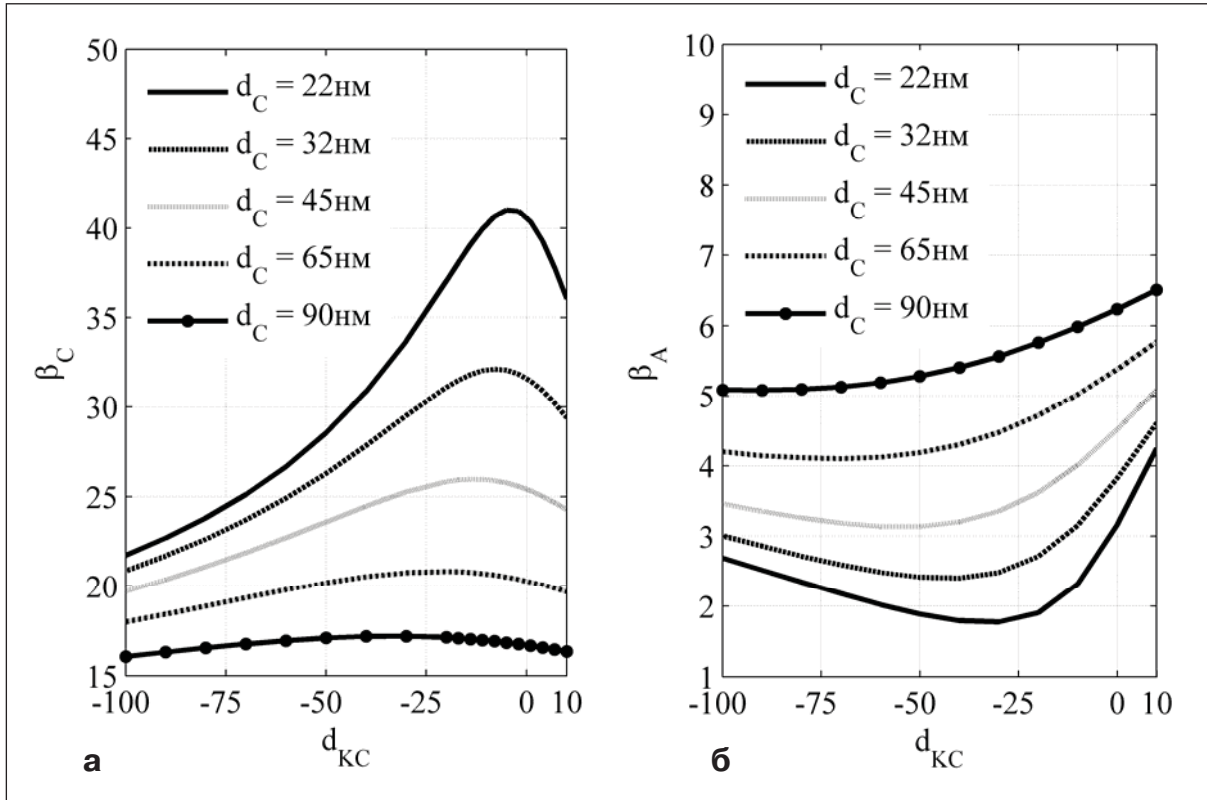


Рис. 3. Зависимость форм-факторов усиления электрического поля на поверхности катода, индуцированных влиянием (а) сеточных электродов и (б) анода от расстояния d_{KC} «катод-сетка» для различных топологических норм проектирования.

расстояние $d_C = 22\text{ нм}$, где в обоих случаях достигается максимальный форм-фактор β_C . В то же время расстояние d_{KA} следует взять равным 500 нм, где форм-фактор β_C приходит к постоянному значению, а форм-фактор β_A значительно ослабевает. Для заданного значения d_{KA} наиболее выгодным является расстояние d_{KC} , равное 5 нм, где на рис. 3 присутствует экстремум зависимости β_C от расстояния «катод-сетка».

Далее проведем соответствующий анализ вольт-амперных и частотных характеристик планарной автоэмиссионной структуры с лезвийным эмиттером для выбранных геометрических размеров конструкции триода при вариации остальных параметров масштабирования.

3. Расчёт вольт-амперных и частотных характеристик автоэмиссионного триода в зависимости от параметров масштабирования

В общем виде согласно обобщенной формуле Фаулера-Нордгейма [8] плотность тока полевой эмиссии $J_\varnothing$ в триодной структуре может быть выражена как:

$$J_\varnothing = \frac{e^3}{16\pi^2\hbar} \frac{E_{\text{лок}}^2}{\varphi} \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m_e}}{3e\hbar} \frac{\varphi^{3/2}}{E_{\text{лок}}}\right), \quad (3)$$

где e - заряд электрона, m_e - масса электрона, $\hbar$ - редуцированная постоянная Планка, φ - работа выхода в материале катода, причем $E_{\text{лок}} = E_{\text{лок}}(V_A, V_C)$. Поскольку в каждой точке поверхности катода при фиксированном потенциале на аноде и сетке значение напряженности электрического поле является различным, для получения автоэмисси-

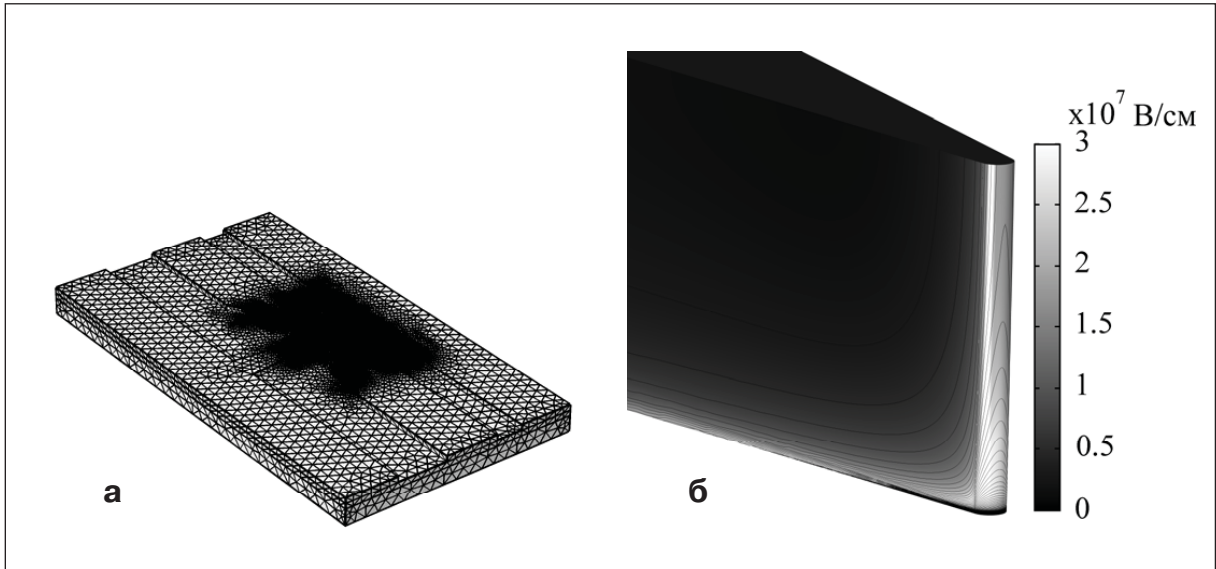


Рис. 4. (а) Расчётная сетка и (б) типичное распределение электрического поля на поверхности катода острейного типа при заданной геометрии автоэмиссионной структуры.

онного тока $I_{\text{э}}$ уравнение (3) следует проинтегрировать по эмитирующей поверхности острия катода $S_{\text{эл}}$, что описывается уравнением:

$$I_{\text{э}}(V_A, V_C) = \int_{S_{\text{эл}}} J_{\text{э}}(V_A, V_C) dS_{\text{эл}} \quad (4)$$

Для получения детального распределения поля $E_{\text{лок}}$ по поверхности катода при построении модели была выбрана более густая сетка в области, прилежащей к вакуумному зазору. Выбранная сетка обеспечивает достаточно гладкие контуры на поверхности полевого эмиттера с постоянным значением электрического поля (рис. 4), что позволяет по формуле (4) наиболее точно рассчитать токи полевой эмиссии. При этом величина электрического поля изменяется в области значений от 0.5 до $3 \cdot 10^7$ В/см, при которых возникает токовая эмиссия преимущественно с острия катода.

Для различных проектных норм d_c были построены зависимости тока эмиссии $I = I_{\text{э}}$ и крутизны триода $g_m = dI / dV_C$ в зависимости от напряжения V_C при фиксированном напряжении на аноде $V_A = 50$ В, что представлено на рис. 5.

Из представленной на рис. 5а вольт-амперной характеристики видно, что заметные автоэмиссионные токи, порядка 0.25 мкА наблюдаются уже при напряжениях на сетке 35 В при расстоянии d_c , равном 22 нм, и при 45 В для проектных норм 45 нм соответственно. Далее ток эмиссии определяется в основном напряжением на сетке и практически не зависит от анодного напряжения при увеличении последнего от 0 до 50 В. Крутизна триода g_m варьируется в диапазоне от 0.023 до 0.2 мкСм соответственно в диапазоне выбранных литографических размеров, что по порядку совпадает с результатами, представленными в работе [2].

Далее важным параметром работы автоэмиссионной структуры, определяющим величину ее быстродействия в процессе масштабирования, является время τ_c , затрачиваемое на зарядку емкости «катод-сетка» в соответствии со следующей формулой:

$$\tau_c = \frac{1}{2\pi f_c}, \quad (5)$$

где $f_c = g_m / 2\pi C_{KC}$, C_{KC} - емкость «катод-сетка», для упрощения рассчитываемая как емкость между обкладками плоского конденсатора.

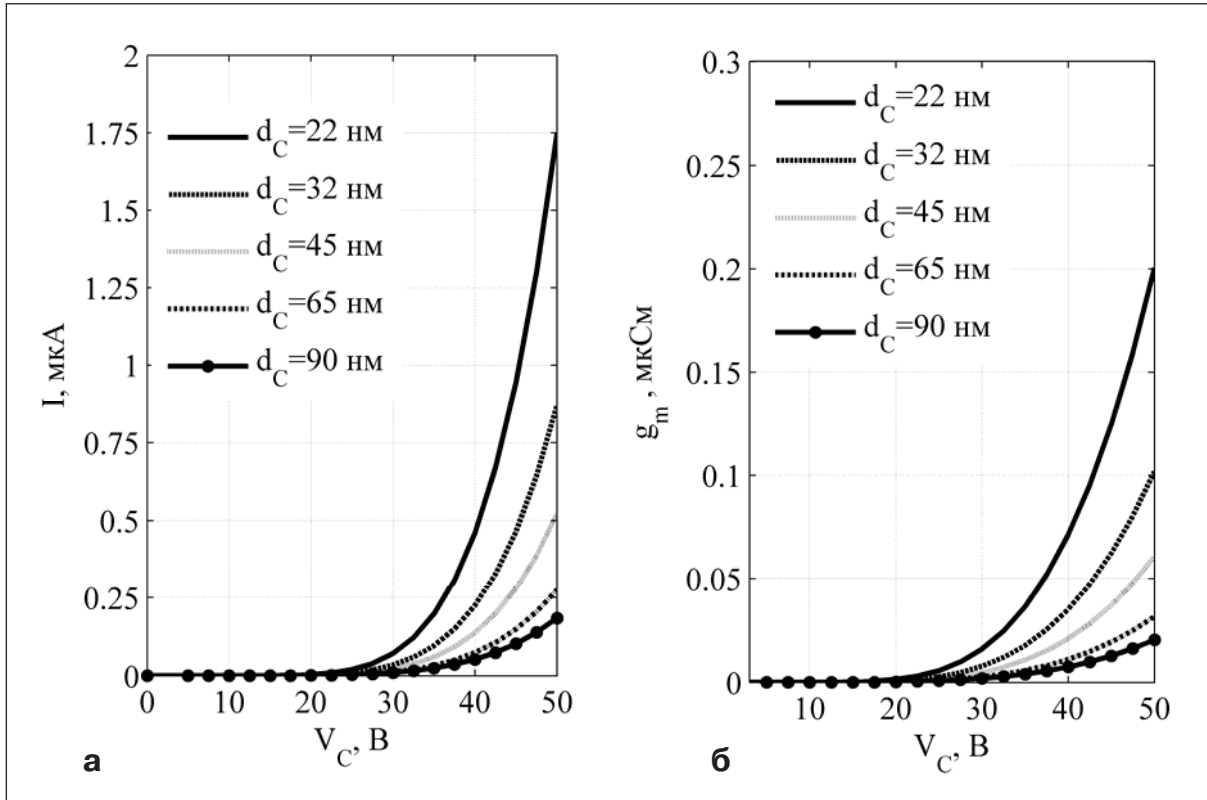


Рис. 5. Зависимость (а) тока эмиссии и (б) крутизны автоэмиссионного триода с плоскостным полевым эмиттером в зависимости от напряжения на сетке V_C при оптимальных геометрических размерах конструкции структуры для различных топологических норм проектирования и значения $V_A = 50B$.

На рис. 6 представлены зависимость емкости C_{KC} от расстояния «катод-сетка», а также рассчитанные по формуле (5) значения времени зарядки междуэлектродной емкости τ_C в зависимости от напряжения сетки V_C при фиксированном напряжении на аноде, равном 50 В. Проведенный расчёт показывает, что с уменьшением проектных норм от 90 до 22 нм убывает емкость C_{KC} , что приводит к спаду времени зарядки τ_C и способствует увеличению быстродействия в несколько раз.

Для оценки быстродействия, или частотного диапазона автоэмиссионной структуры также следует учитывать время пролета электронов от катода к аноду. Аналогичный расчет [9], показал, что структуру электрического поля в междуэлектродном пространстве «катод-анод» можно разделить на две характерные области. Первая – это область промежутка между катодом и сеткой, которая отличается высокой напряженностью и относительной неоднородностью электрического поля. Вторая – область промежутка между сеткой и анодом, которая характеризуется значительно меньшей напряженностью, но высокой однородностью электрического поля.

В связи с этим время пролета электронов от катода к аноду τ_{KA} следует определять как: $\tau_{KA} = \tau_{KC} + \tau_{CA}$, где τ_{KC} и τ_{CA} – время пролета электронами, соответственно, промежутков «катод – сетка» и «сетка – анод». В соответствии с вышесказанным, время пролета электронами междуэлектродного пространства «катод – сетка» можно определить по формуле:

$$\tau_{KC} = \sqrt{\frac{2m_e}{eV_C}} * d_{KC}, \quad (6)$$

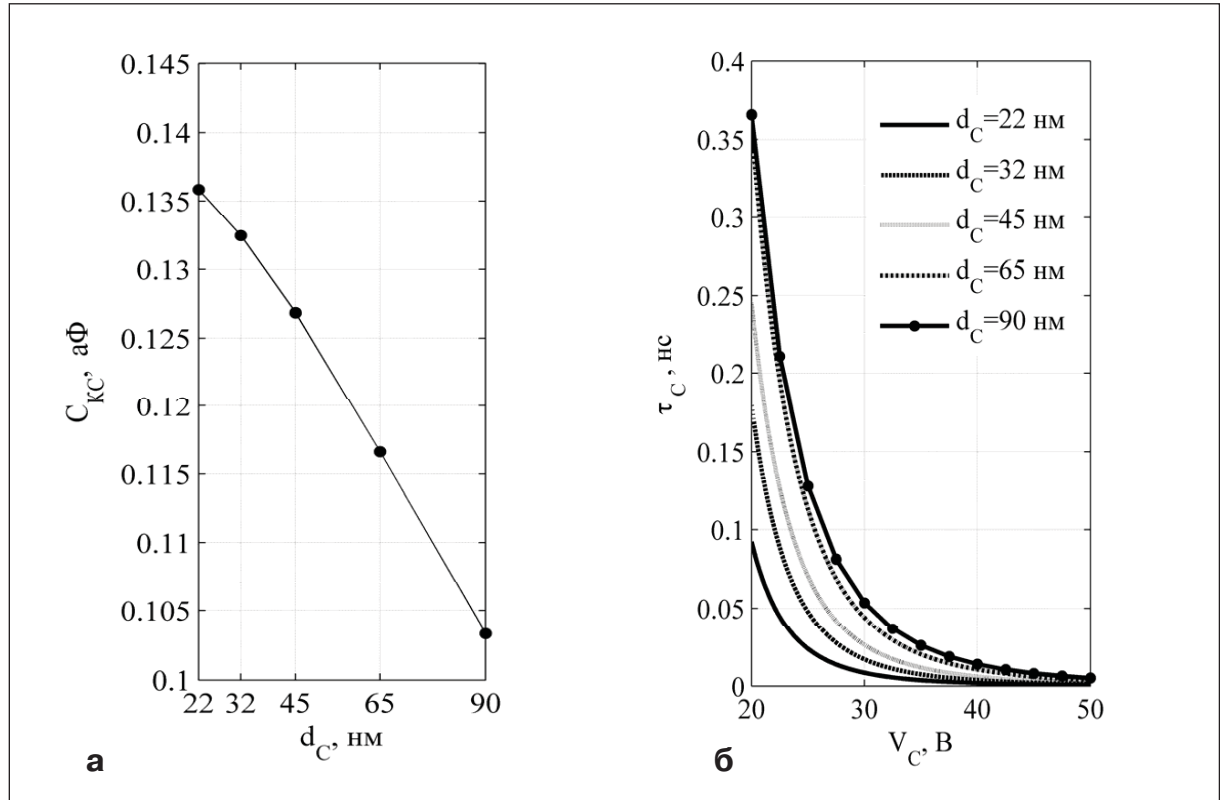


Рис. 6. Зависимость (а) емкости «катод-сетка» от выбранной топологической нормы проектирования и (б) времени зарядки емкости «катод-сетка» от напряжения на сеточных электродах при вариации проектных норм и значении $V_A = 50B$..

где d_{KC} – промежуток между катодом и сеткой, V_C – напряжение на управляющей сетке, e – заряд электрона, m_e – масса электрона. При расчете времени пролета электронами расстояния «сетка – анод» необходимо принимать во внимание то, что электроны, попадающие в промежуток «сетка – анод», уже получили определенное ускорение под действием потенциала сетки V_C . С учетом данного факта, искомую величину τ_{CA} можно вычислить по формуле:

$$\tau_{CA} = \sqrt{\frac{2m_e}{e}} \frac{d_{CA}}{\sqrt{V_C} + \sqrt{V_A}}, \quad (7)$$

где d_{CA} – расстояние между сеткой и анодом, V_A – напряжение на аноде.

Как видно из рис. 7а, рассчитанная по формулам (6)-(7) величина τ_{KA} составляет десятые доли пс, что во много раз меньше значения τ_C , поэтому при расчёте быстрогодействия и общего времени полевой эмиссии $\tau = \tau_C + \tau_{KA}$ временем пролета «катод-анод» следует пренебречь. Поэтому будем полагать, что $\tau \approx \tau_C$.

В соответствии с [10] рабочую частоту триода f можно определить из условия, что время τ_C должно составлять не более четверти полупериода высокочастотного колебания, что может быть представлено следующим уравнением:

$$f = \frac{1}{8\tau_C} \quad (8)$$

Численная оценка времени τ_C при выбранных геометрических параметрах и рабочих напряжениях триода дает значения f в диапазоне 0.02 – 0.16 ТГц на рис. 7б, что соответствует прямому расчёту вольт-амперных характеристик автоэмиссионной

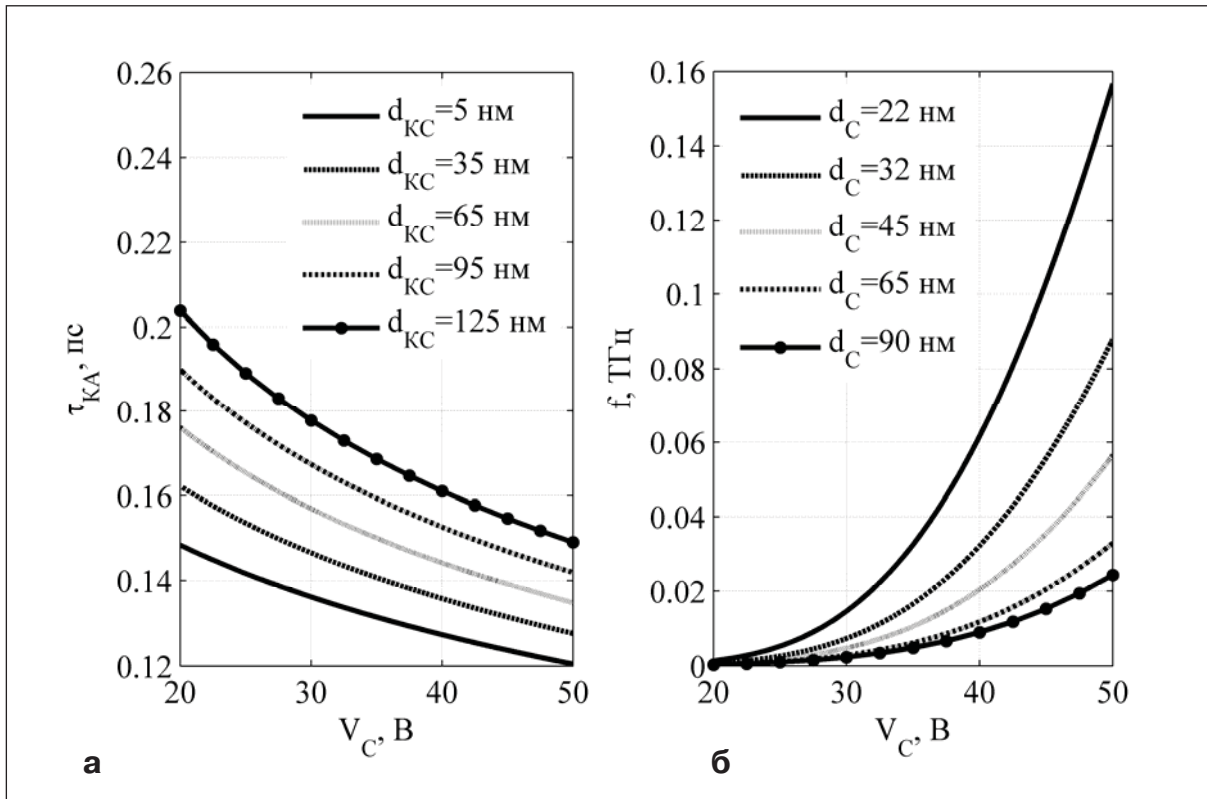


Рис. 7. Зависимость (а) времени пролета «катод-анод» $\tau_{КА}$ при различных расстояниях «катод-сетка» и (б) частоты автоэмиссионного триода f от напряжения на сеточных электродах V_C при фиксированном напряжении на аноде $V_A = 50 В$ для оптимальных геометрических размеров структуры при заданных нормах проектирования.

структуры в пренебрежении временем пролета электронов от катода к аноду с учётом зарядки междуэлектродных емкостей.

В общем случае, междуэлектродные емкости рассчитываются в зависимости от концентрации заряда, что подробно описывается в [11]. Подобный расчёт также приводится в [12], однако приведенная по формулам (5)-(8) оценка быстродействия является более простой и не противоречит результатам экспериментальных исследований [13]. На основе полученных результатов можно сделать вывод о том, что для уменьшения времени τ_C и соответственно для увеличения рабочей частоты f триода следует повышать его анодный и сеточный потенциалы. При этом одним из важнейших изменений геометрических параметров является уменьшение проектных норм планарной структуры, которые определяются разрешением литографических методов.

Выводы

Таким образом, проведенное в работе моделирование полевой эмиссии в конструкции планарного триода с лезвийным полевым эмиттером позволило установить оптимальные параметры геометрии, при которых наблюдается максимальное усиление электрического поля вблизи эмиттирующей поверхности катода под действием управляющего потенциала сеточных электродов. Показано, что масштабирование латеральных размеров исследуемой структуры в соответствии с принятыми в современной технологии топологическими проектными нормами от 90 нм до 22 нм приводит к заметному росту форм-фактора сетки. Одновременно с увеличением расстояния «катод-анод»

до 500 нм и выше значение данного форм-фактора достигает предельной величины. Зависимость форм-факторов с изменением расстояния «катод-сетка» характеризуется наличием экстремумов, отражающих степень влияния анода и сеточных электродов на формирование электрического поля на поверхности эмиттера, причём максимум форм-фактора сетки соответствует смещению сеточных электродов на 5 нм перпендикулярно к поверхности катода. Для расстояния «катод-анод», равного 500 нм, с вариацией расстояния «катод-сетка» при заданных проектных нормах форм-фактор сетки заметно превышает форм-фактор анода, что дает возможность осуществлять управление электрическим полем преимущественно посредством сеточных электродов. Для выбранных оптимальных параметров геометрии автоэмиссионной структуры получены вольт-амперные характеристики триода. Максимальные токи эмиссии при напряжении на сетке от 0 до 50 В варьируются в пределах от 0.23 до 1.75 мкА. Качественная оценка быстродействия и частотных характеристик исследуемой структуры демонстрирует уменьшение времени пролета «катод-анод» с ростом сеточного потенциала при диапазоне рабочих частот от 0.02 до 0.16 ТГц, что соответствует экспериментальным характеристикам автоэмиссионных структур. Полученные результаты могут быть использованы при разработке широкого спектра изделий нано- и микро-системной техники, а также специальной электронной компонентной базы нового поколения. Конкретные разработки, использующие в своей основе исследуемые принципы найдут применение к космической отрасли, медицине, в сфере высокочастотных беспроводных телекоммуникаций.

Литература

1. Han J.-W., Oh J.S., Meyyappan M. Nanoscale vacuum channel transistor. // IEEE 14th International Conference on Nanotechnology (IEEE-NANO), August 18-21, 2014, ISBN: 978-1-4799-5622-7.
2. Han J.-W., Oh J.S., Meyyappan M. Vacuum nanoelectronics: Back to the future? – Gate insulated nanoscale vacuum channel transistor. // Applied Physics Letters, 2012, 100, 213505, 5 pp.
3. Srisophon S., Jung Y.S., Kim H.K. Metal-oxide-semiconductor field-effect transistor with a vacuum channel. // Nature Nanotechnology, 2012, 7, 504 - 508.
4. Stoner B.R., Glass J.T. Nanoelectronics: Nothing is like a vacuum. // Nature Nanotechnology, 2012, 7, 485–487.
5. Spindt C.A., Holland C.E., Rosengreen A., Brodie I. Field-emitter arrays for vacuum microelectronics. // IEEE Transactions on Electron Devices, 1991, 38(10), 2355 – 2363.
6. Park S.S., Park D.-I., Hahm S.-H., Lee J.-H., Choi H.-C., Lee J.-H. Fabrication of a lateral field emission triode with a high current density and high transconductance using the local oxidation of the polysilicon layer. // IEEE Transactions on Electron Devices, 1999, 46(6), 1283 – 1289.
7. Сайт производителя программного пакета для мультифизического моделирования Comsol MultiPhysics. URL: <http://www.comsol.ru>.
8. Forbes R.G., Deane J.H.B. Reformulation of the standard theory of Fowler-Nordheim tunnelling and cold field electron emission. // Proceedings of the Royal Society A, 2007, 463, 2907 – 2927.
9. Татаренко Н.И. Степень интеграции и быстродействие наноструктурных автоэлектронных микро-триодов. // Успехи современной радиотехники. 2005, 9, 3 – 10.
10. Tatarenko N.I., Vorobyev A.Y. A Study of a Nanostructural Field Emission Triode. // 15th International Vacuum Microelectronics Conference, Lyon, France, 2002, p. pm02.
11. Грязнева Т.А., Гусев Е.Э., Дюжнев Н.А. Программа расчета величины плотности заряда в диэлектрической пленке методом вольт-фарадных характеристик. // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016616011 от 03.06.2016.
12. Татаренко Н.И., Кравченко В.Ф. Автоэмиссионные наноструктуры и приборы на их основе. // М.: ФИЗМАТЛИТ, Москва, 2006, 192 стр.
13. Gaertner G. Historical development and future trends of vacuum electronics. // Journal of Vacuum Science & Technology B, 2012, 30, 060801, 14 pp.

THE SIMULATION OF SCALING TOPOLOGICAL DESIGN RULES IMPACT ON ELECTRICAL AND FREQUENCY CHARACTERISTICS OF PLANAR FIELD-EMISSION TRIODE WITH THE EDGE FIELD EMITTER

N.A. Diuzhev, M.A. Makhiboroda, T.A. Gryazneva,
E.A. Agarkov¹, G.D. Demin

National Research University of Electronic Technology, Moscow

gddemin@gmail.com

Received 19.08.2016

Nowadays there is a rapid revival of vacuum electronics, because of recent progress in the development of the triode semiconductor devices with nanoscale vacuum channel that combines high performance, resistance to aggressive environments and extreme temperature and low power consumption [1, 2]. In this regard, the important problem becomes the selection of optimal characteristics of the vacuum triode, providing a stable field emission, taking into account the variation in geometry of the structure during the transition to the submicron design area. The paper presents the calculation model of field-electron emission from the nanoscale tip of edge field emitter in a planar field-emission triode structure. Based on this model, the values of the cathode radius, distance cathode-anode and distance "cathode-grid" are chosen, allowing achieving a maximal amplification of the electric field on the cathode surface. For the selected configuration, the comparison of the electrical and frequency characteristics of the triode is also performed that determines the tendency of variation of field-emission parameters in the process of scaling of planar geometry of considered structure. As the scale parameter, the corresponding values of technological node for the modern microelectronic industry were used in the range from 90 nm to 22 nm (90 nm, 65 nm, 45 nm, 32 nm, and 22 nm). The obtained results can be useful for the technological implementation of the next generation of vacuum devices applicable in the space, ultrafast electronics and telecommunication systems.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННО ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ПЫЛЕВЫХ СТРУКТУР В КОМПЛЕКСНОЙ ПЛАЗМЕ

О.В. Кравченко

*Научно-технологический центр уникального приборостроения РАН, Москва
Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана
Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва*

ok@bmstu.ru

Поступила 11.07.2016

В работе представлены результаты численного моделирования динамики одиночных симметричных вихрей в предположении цилиндрической геометрии напряженности поля. Представлена оригинальная численная реализация модели Avinash, Battacharjee, Hu (ABH), а также обобщение модели на двумерный случай прямоугольной декартовой системы координат. Показана зависимость концентрации пылевой компоненты среды от начальной напряженности электрического поля.

УДК 533.9, 519.622, 519.63

1. Введение

Согласно [1], пылевая (dusty) или комплексная плазма (complex plasma) является ионизованным газом, в котором присутствуют заряженные частицы, размеры которых на несколько порядков больше размеров компонентов газа (электронов, ионов). В таких средах пылевые частицы могут взаимодействовать, образуя структуры различного типа, как жидкостные, так и кристаллические. Для технологических целей представляет интерес ситуация, когда в результате нелинейного взаимодействия могут динамически образовываться области в пространстве, свободные от пылевых частиц.

В последнее время опубликовано большое количество физических работ, посвященных изучению динамики пылевой плазмы [1]—[8] как теоретически, так и экспериментально. При этом исследований и работ, в которых проводится моделирование и описываются алгоритмы расчёта гораздо меньше. Впервые войды (пустоты или полости) в пылевой плазме были обнаружены в ходе эксперимента на борту Международной космической станции [1], а затем, и в лабораторных условиях [3], [4]. В лабораторных условиях обнаружены как войды с регулярной геометрией границы, так и нерегулярные [3]. Среди регулярных войдов можно провести следующую условную классификацию: симметричные одиночные войды и симметричные концентрические войды. Эволюцию появления одиночного симметричного войда из равновесного состояния описывает одномерная электро—гидродинамическая модель АВН (Avinash, Battacharjee, Hu) [5], в которой учитывается сила ионного притяжения как нелинейная функция скорости ионов. Модель АВН была обобщена на двумерный цилиндрический случай в [6]. Примеры расчётов одиночного симметричного войда и концентрического симметричного войдов представлены в [9] для фиксированного граничного условия напряжённости электрического поля. Вместе с тем, остаётся открытым вопрос о построении двумерной модели АВН в декартовой системе координат. Отметим также, что в работах [5], [6] не описан алгоритм расчёта модели АВН.

В данной статье представлены алгоритм и результаты численных расчетов динамики симметричного концентрического войда с использованием двумерной модели АВН в прямоугольной декартовой системе координат [10] в случае цилиндрической геометрии напряженности поля. Показано, что основным фактором, влияющим на формирование концентрического войда, является распределение напряженности электрического поля.

2. Математическая модель

Согласно [5] динамика образования пылевого войда описывается следующей системой нелинейных уравнений (модель АВН):

$$\frac{\partial n_d}{\partial t} + \frac{\partial(n_d v_d)}{\partial x} = D \frac{\partial^2 n_d}{\partial x^2}, \quad (2.1)$$

$$m \left(\frac{\partial}{\partial t} + v_d \frac{\partial}{\partial x} \right) v_d = -Ze + F_d - \nu_{dn} m_d v_d - \frac{T_d}{n_d} \frac{\partial n_d}{\partial x} \quad (2.2)$$

$$\frac{T_e}{n_e} \frac{\partial n_e}{\partial x} = -eE, \quad (2.3)$$

$$\frac{dE}{dx} = 4\pi e(n_i - n_e - n_d). \quad (2.4)$$

Уравнение (2.1) — уравнение неразрывности, (2.2) — закон сохранения импульса пылевой компоненты, (2.3) — закон сохранения импульса электронной компоненты в предположении отсутствия инерционных эффектов. Для определения влияния напряжённости поля на динамику заряженных частиц рассматривается закон Пуассона (2.4).

Здесь n_d, v_d — концентрация и скорость пылевой компоненты, а n_e, v_e — концентрация и скорость электронной компоненты, v_i — скорость ионной компоненты, E — напряжённость электрического поля. Остальные параметры модели (2.1)—(2.4) —

константы: $-Ze$ — заряд пылевой частицы массой m_d , температуры T_d , параметр D — коэффициент диффузии пылевой компоненты. Слагаемое $\nu_{dn}m_d v_d$ представляет силу трения пылевых частиц о нейтрально заряженные частицы, где ν_{dn} — частота столкновений.

В одномерном случае в безразмерном виде модель АВН принимает вид

$$\frac{\partial n_d}{\partial t} + \frac{\partial(n_d v_d)}{\partial x} = D \frac{\partial^2 n_d}{\partial x^2}, \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial v_d}{\partial t} + v_d \frac{\partial v_d}{\partial x} + \frac{\tau_d}{n_d} \frac{\partial n_d}{\partial x} = F_d - E - \alpha_0 v_d, \quad (2.6)$$

$$F_d = \frac{aE}{b + |v_i|^3}, \quad v_i = \mu E, \quad (2.7)$$

$$\frac{dn_e}{dx} = -\frac{n_e E}{\tau_i}, \quad (2.8)$$

$$\frac{dE}{dx} = 1 - n_e - n_d. \quad (2.9)$$

В рамках модели АВН процесс формирования войда развивается из начальных условий, и далее обусловлен учетом силы ионного притяжения F_d , действующей на пылевые частицы. Теоретическое обоснование учета влияния силы ионного притяжения приведено в [7]. Для аппроксимации силы F_d в [5] предложен простой вариант выражения (2.7). Аппроксимирующее выражение для силы ионного притяжения в модели АВН устроено таким образом, что модуль силы F_d растёт от нуля при малых значениях v_i , и уменьшается при больших. Параметры a и b были подобраны из аппроксимации экспериментальных значений для модуля силы F_d , представленных в [8]. К установившемуся (насыщенному) состоянию войд приходит в результате самосогласованного нелинейного механизма взаимодействия заряженных частиц, динамика которых приводит к изменению напряженности электрического поля.

Система нелинейных уравнений (2.5)–(2.9) состоит из уравнений в частных производных (2.5), (2.6), которые являются гидродинамическими уравнениями, описывающими перенос плотности пылевой компоненты среды n_d с течением времени, и обыкновенных дифференциальных уравнений (2.8), (2.9). Они описывают влияние напряжённости электростатического поля E на динамику пылевой компоненты n_d , то есть являются электростатической частью модели АВН.

Отметим, что параметр D в [5] использовался как параметр искусственной вязкости для регулирования осцилляций в ходе вычислительного эксперимента. Предложенный в данной статье алгоритм свободен от этого ограничения, поэтому далее примем $D = 0$.

2.1. Анализ гидродинамической части модели

Выполним анализ гидродинамической части модели АВН в линейном приближении. Пусть $\mathbf{u} = (n_d, v_d)^T$. Уравнения (2.5), (2.6) представим в виде:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = \mathbf{f}, \quad (2.10)$$

где

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} 0 \\ \left(\frac{a}{b + |v_i|^3} - 1 \right) E - \alpha_0 v_d \end{pmatrix}.$$

Матрица системы $\mathbf{A}$ имеет вид

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} v_d & n_d \\ \tau_d/n_d & v_d \end{pmatrix}.$$

Собственные значения $\lambda_{1,2}$ и матрица координат собственных векторов $\mathbf{\Omega}$ матрицы $\mathbf{A}$ равны

$$\lambda_1 = v_d + c_d, \quad \lambda_2 = v_d - c_d, \quad (2.11)$$

$$\mathbf{\Omega} = \begin{pmatrix} \tau_d & n_d c_d \\ \tau_d & -n_d c_d \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \mathbf{\Omega}^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Omega}. \quad (2.12)$$

Здесь $c_d = \sqrt{\tau_d}$ — аналог скорости звука пылевой компоненты. Из условия гиперболичности матрицы $\mathbf{A}$ системы (2.10) необходимо, чтобы

$$\det \mathbf{\Omega} = -2\tau_d n_d c_d \neq 0.$$

Отсюда, получаем ограничение

$$n_d \neq 0, \quad 0 < \tau_d < \infty. \quad (2.13)$$

При невыполнении (2.13) система (2.10) перестаёт быть гиперболической. Правая часть системы (2.10) имеет вид $\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{u})$ с матрицей Якоби

$$\mathbf{B} = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial n_d} & \frac{\partial f_1}{\partial v_d} \\ \frac{\partial f_2}{\partial n_d} & \frac{\partial f_2}{\partial v_d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\alpha_0 \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

При $\alpha_0 \geq 0$ правая часть (2.14) ведёт к затуханию, а значит, система (2.14) устойчива по Ляпунову. Наоборот, при $\alpha_0 < 0$ правая часть системы (2.14) неустойчива по Ляпунову, что приводит к росту и раскачке решения. Таким образом, получены ограничения на неизвестные величины и параметры гидродинамической части (2.5), (2.6) модели.

Домножая уравнение движения (2.5) на n_d , а уравнение неразрывности (2.6) на v_d , и складывая, получаем

$$n_d \frac{\partial v_d}{\partial t} + v_d \frac{\partial n_d}{\partial t} + n_d v_d \frac{\partial v_d}{\partial x} + v_d \frac{\partial (n_d v_d)}{\partial x} + \tau_d \frac{\partial n_d}{\partial x} = n_d (F_d - E - \alpha_0 v_d).$$

Это уравнение совпадает по форме с газодинамическим баротропным уравнением неразрывности газа,

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v^2 + P(\rho))}{\partial x} = 0$$

и отличается наличием ненулевой правой части f_2 . В рамках принятой аналогии, $\rho = n_d$, $P(\rho) = \tau_d \rho$ ($\tau_d = \text{const}$). При этом, правая часть регулирует изменение импульса (2.6) пылевой компоненты.

2.2. Анализ электростатической части модели

Проведем анализ электростатической части модели АВН в линейном приближении. Систему обыкновенных дифференциальных уравнений (2.8), (2.9) запишем в векторном виде:

$$\frac{d\mathbf{w}}{dx} = \mathbf{g}(\mathbf{w}), \quad \mathbf{g}(\mathbf{w}) = \begin{pmatrix} -\frac{n_e E}{\tau_i} \\ 1 - n_d - n_e \end{pmatrix}, \quad (2.15)$$

здесь $\mathbf{w} = (n_e, E)^T$. Рассмотрим матрицу Якоби системы (2.15)

$$\mathbf{D} = \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{w}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial n_e} & \frac{\partial g_1}{\partial E} \\ \frac{\partial g_2}{\partial n_e} & \frac{\partial g_2}{\partial E} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -E/\tau_i & -n_e/\tau_i \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Спектр матрицы $\mathbf{D}$ находим из решения уравнения $\det(\mathbf{D} - \varepsilon \mathbf{I}) = 0$

$$\begin{vmatrix} -E/\tau_i - \varepsilon & -n_e/\tau_i \\ -1 & -\varepsilon \end{vmatrix} = 0, \quad \varepsilon^2 + \frac{E}{\tau_i} \varepsilon + \frac{n_e}{\tau_i} = 0, \quad (2.17)$$

$$\tau_i \varepsilon^2 + E \varepsilon + n_e = 0, \quad \varepsilon_{1,2} = \frac{-E \pm \sqrt{E^2 - 4n_e \tau_i}}{2\tau_i}. \quad (2.18)$$

При $E^2 - 4n_e \tau_i < 0$, значения ε могут быть комплексно-сопряжёнными. Обозначим $r = E/(2\tau_i)$, и $\beta = n_e/\tau_i$, тогда $\varepsilon_{1,2} = -r \pm \sqrt{r^2 - \beta}$ и $E^2 - 4n_e \tau_i = r^2 - \beta$. Поэтому, при $r^2 - \beta < 0$ появляются 2 комплексных корня. Таким образом, при $r \gg 1$ система (2.16) становится жёсткой, и её необходимо решать специальными методами. Если $|\text{Im } \varepsilon_{1,2}| \ll 1$, то имеем быстроосциллирующую систему, для решения которых применяют методы осреднения. Нас будет интересовать случай, когда $|\varepsilon_{1,2}| \sim 1$. Кроме того, примем ограничение $n_d(x, t) \leq 1$, так как $1 - n_e - n_d \geq 0$.

3. Алгоритм расчёта

3.1. Одномерный алгоритм расчёта

Перейдём в (2.5), (2.6) от характеристической формы записи системы (2.10) к дивергентной

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{u})}{\partial x} = \mathbf{f}, \quad (3.1)$$

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} n_d \\ v_d \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} n_d v_d \\ 0.5 v_d^2 + \tau_d \ln n_d \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

Будем рассматривать прямоугольную область интегрирования

$$0 \leq x \leq X, 0 \leq t \leq T.$$

Согласно ограничению (2.13), примем в качестве начального условия для пылевой компоненты положительную функцию $n_d(x, 0) = n_{d,0}(x) > 0$. На скорость пылевой компоненты $v_d(x, 0)$ ограничений не накладывается, поэтому, в качестве начального условия можно выбрать произвольную функцию, в том числе $v_d(x, 0) \equiv 0$.

Система уравнений (2.5)–(2.9) является самосогласованной, то есть динамика пылевой компоненты влияет на распределение напряжённости электрического поля. В свою очередь, напряжённость электрического поля влияет на динамику пылевых частиц. Таким образом, для расчёта (3.2), (2.15) естественно предложить следующий итерационный алгоритм:

1. Интегрируем уравнения с помощью схемы Лакса–Фридрихса на временном шаге интегрирования t^n , находим значения вектора $\mathbf{u}^n = (n_d^n, v_d^n)^T$.
2. Решаем задачу Коши для системы, находим значения вектора $\mathbf{w} = (n_e, E)^T$.
3. Пересчитываем значения вектора $\mathbf{u}$ на новом временном шаге $\mathbf{u}^{n+1} = (n_d^{n+1}, v_d^{n+1})^T$, снова интегрируя уравнения по найденному вектору $\mathbf{w}$.

3.2. Обобщение модели АВН на двумерный случай

Рассмотрим обобщение (2.5)–(2.9) на случай двумерной прямоугольной декартовой системы координат xOy . В данном случае скалярные функции

$$n_d = n_d(x, y, t), \quad n_e = n_e(x, y),$$

а векторные функции

$$\mathbf{v}_i = (v_{i,x}(x, y), v_{i,y}(x, y)), \quad \mathbf{v}_d = (v_{d,x}(x, y, t), v_{d,y}(x, y, t)), \quad \mathbf{E} = (E_x(x, y), E_y(x, y)).$$

Уравнения (2.5), (2.6) примут следующий вид:

$$\frac{\partial n_d}{\partial t} + \frac{\partial(n_d v_{d,x})}{\partial x} + \frac{\partial(n_d v_{d,y})}{\partial y} = 0, \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial v_{d,x}}{\partial t} + \frac{\partial(0.5 v_{d,x}^2)}{\partial x} + \frac{\partial(v_{d,x} v_{d,y})}{\partial y} + \frac{\tau_d}{n_d} \frac{\partial n_d}{\partial x} = \left(\frac{a}{b + |\mathbf{v}_i|^3} - 1 \right) E_x - \alpha_0 v_{d,x}, \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial v_{d,y}}{\partial t} + \frac{\partial v_{d,x} v_{d,y}}{\partial x} + \frac{\partial(0.5 v_{d,y}^2)}{\partial y} + \frac{\tau_d}{n_d} \frac{\partial n_d}{\partial y} = \left(\frac{a}{b + |\mathbf{v}_i|^3} - 1 \right) E_y - \alpha_0 v_{d,y}. \quad (3.5)$$

Соответственно, уравнения (2.8), (2.9) примут вид

$$\frac{\partial n_e}{\partial x} = -\frac{n_e E_x}{\tau_i}, \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial y} = -\frac{n_e E_y}{\tau_i}, \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} = 1 - n_d - n_e. \quad (3.8)$$

Запишем систему нелинейных уравнений в частных производных (3.3)–(3.5) в векторном виде

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_x}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}_y}{\partial y} = \mathbf{f}. \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial n_d}{\partial t} + \frac{\partial(n_d v_{d,x})}{\partial x} + \frac{\partial(n_d v_{d,y})}{\partial y} = 0. \quad (3.10)$$

Здесь

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} n_d \\ v_{d,x} \\ v_{d,y} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_x = \begin{pmatrix} n_d v_{d,x} \\ v_{d,x}^2/2 + \tau_d \ln n_d \\ v_{d,y} v_{d,x} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_y = \begin{pmatrix} n_d v_{d,y} \\ v_{d,x} v_{d,y} \\ v_{d,y}^2/2 + \tau_d \ln n_d \end{pmatrix}$$

и

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} 0 \\ \left(\frac{a}{b + |\mathbf{v}_i|^3} - 1 \right) E_x - \alpha_0 v_{d,x} \\ \left(\frac{a}{b + |\mathbf{v}_i|^3} - 1 \right) E_y - \alpha_0 v_{d,y} \end{pmatrix}.$$

Система (3.6)–(3.9) может быть записана компактно, в операторном виде

$$\nabla n_e = -\frac{n_e \mathbf{E}}{\tau_i}, \quad (3.11)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 1 - n_d - n_e. \quad (3.12)$$

3.3. Двумерный алгоритм расчёта

Обобщим алгоритм расчёта на двумерный случай:

1. На временном шаге интегрирования t^n решаем (3.9), с помощью разделения по пространственным координатам, находим значения вектора $\mathbf{u}^n$.
2. Решаем задачу Коши для системы (3.11), (3.12), находим значения n_e , $\mathbf{E}$.
3. Повторяем пункт 1, учитывая значения n_e , $\mathbf{E}$ из пункта 2, находим значения вектора $\mathbf{u}^{n+1}$ на новом $n + 1$ шаге интегрирования по времени t^{n+1} .

4. Вычислительный эксперимент

Для моделирования динамики образования пылевого войда принимались следующие параметры модели:

$$\tau_i = 0.125, \quad \tau_d = 0.001, \quad a = 7.5, \quad b = 1.6, \quad \alpha_0 = 2, \quad \mu = 1.5.$$

В качестве расчётной области был рассмотрен отрезок $[0, X]$ в одномерном случае, и квадрат $[0, X] \times [0, X]$ в двумерном. Расчёт по времени проводился до фиксированного значения T . К параметрам вычислительного эксперимента относились следующие: количество узлов n_x пространственной сетки, число Куранта–Фридрихса–Леви σ , через которое выражался пространственный шаг по времени, а также начальное

значение напряжённости электрического поля $E(0) = E_0$. Для гиперболической части модели (2.10) рассматривались граничные условия вида

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \Big|_{x=X} = 0.$$

Для сходимости предложенного алгоритма (3) был проведён расчёт эволюции войда в одномерном случае при соответствующих значениях параметров расчёта

$$X = 6, h = X/(nx - 1), \sigma = 0.35, \tau = \sigma h, E_0 = 4 \cdot 10^{-3},$$

и начальных условиях

$$n_d(x, 0) = 0.001, v_d(x, 0) = 0, n_e(0) = 0.999.$$

При этом, варьировалось количество узлов пространственной сетки nx и фиксированные значения T , так, чтобы расчёт с количеством узлов сетки $nx = 128$ проводился до значения $T = 60$, а с количеством узлов $nx = 512$ до $T = 170$, соответственно, следующие:

$$T = 60, 120, 170, nx = 128, 256, 512.$$

Результаты расчёта по алгоритму из п. 3.1 представлены на рис. 4.1 а, б. Отметим, что полученные результаты расчёта согласуются с результатами численного моделирования, приведёнными в работе [5]. Покажем влияние распределения напряжённости поля на распределение концентрации пылевой компоненты n_d . Для этого будем изменять начальное условие для напряжённости поля в диапазоне $E_0 = (4 \cdot 10^{-6}, 4 \cdot 10^{-4}, 4 \cdot 10^{-3})$, а остальные значения параметров модели и расчёта оставим прежними. При увеличении начального значения E_0 происходит сдвиг границы пылевого войда от его центра к её левой границе расчётной области $x = 0$. Двумерные радиально-симметричные распределения пылевой компоненты $n_d(x, y)$ показаны на рис. 4.2 а, в, г. Они соответствуют распределениям напряжённости электрического поля E , которые представлены на рис. 4.2 б, д, е.

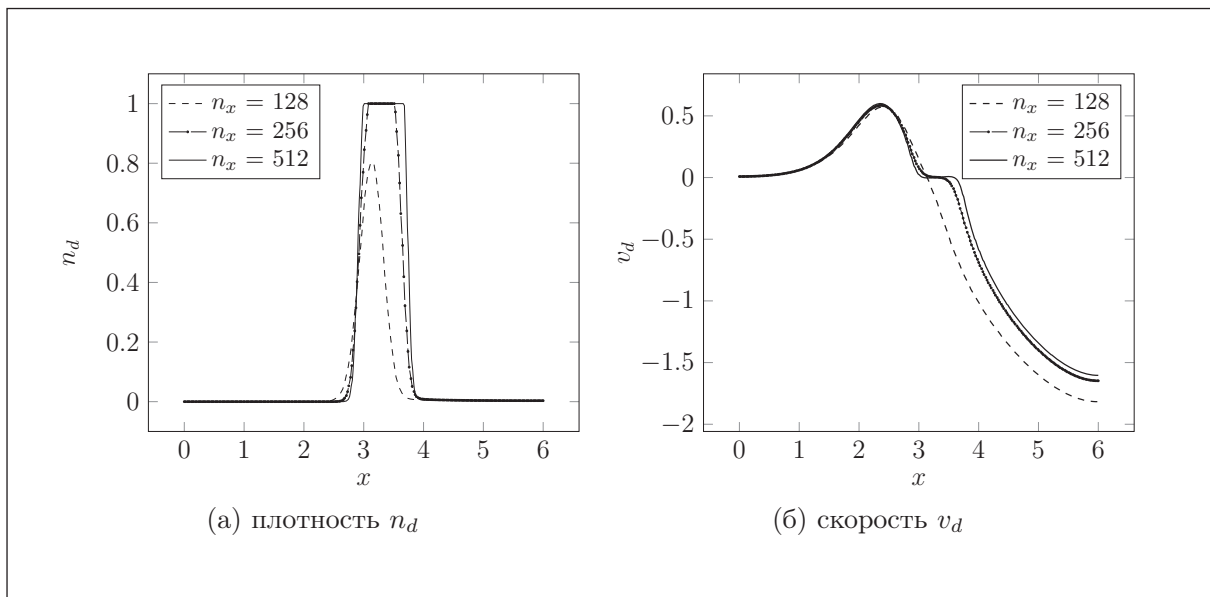


Рис. 1: Численный расчёт динамики пылевой компоненты: а) концентрации плотности n_d и б) скорости v_d

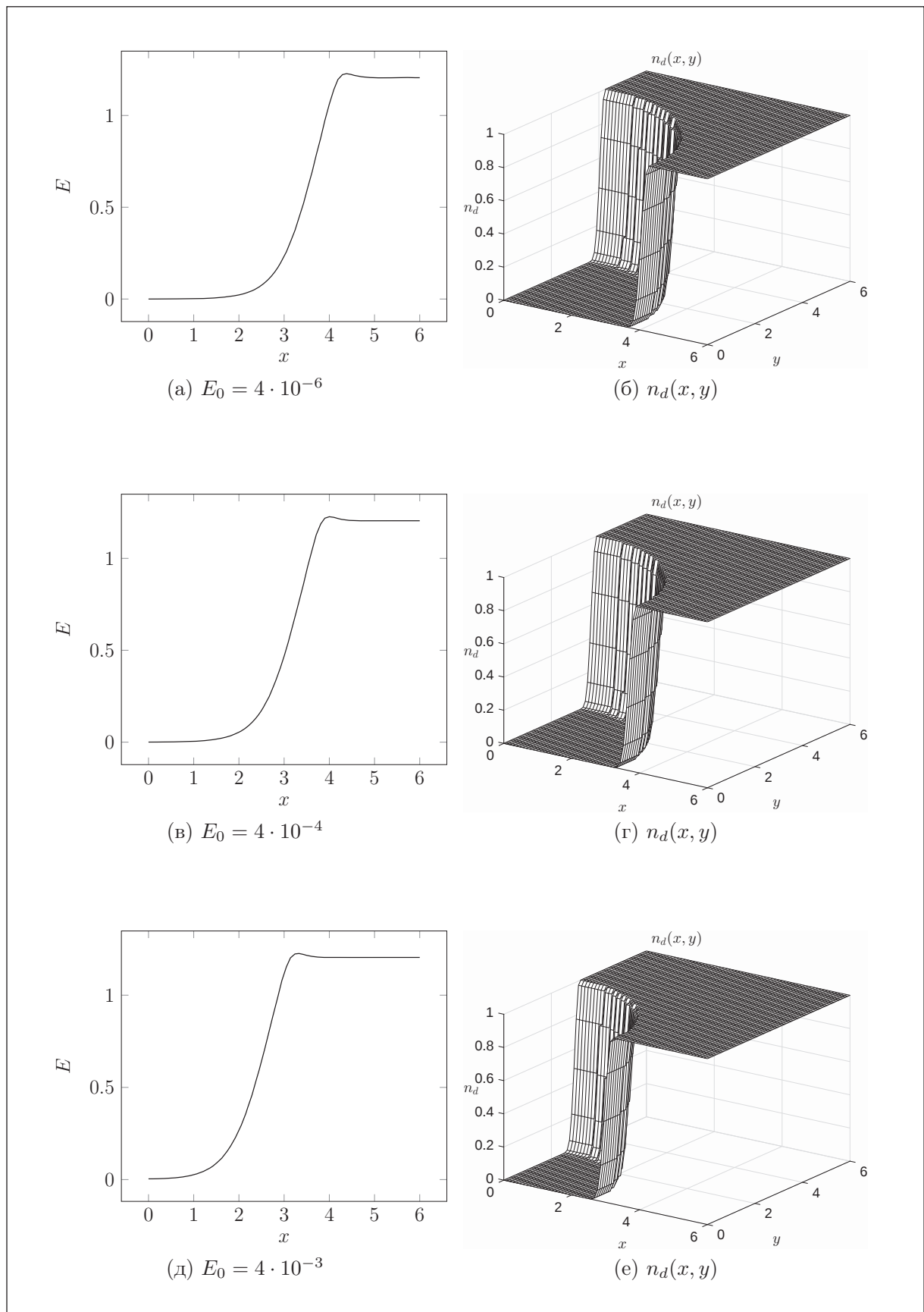


Рис. 2: Численный расчёт динамики пылевой компоненты: б), г), е) в зависимости от начального значения напряжённости электрического поля а) $E_0 = 4 \cdot 10^{-6}$, в) $E_0 = 4 \cdot 10^{-4}$, г) $E_0 = 4 \cdot 10^{-3}$

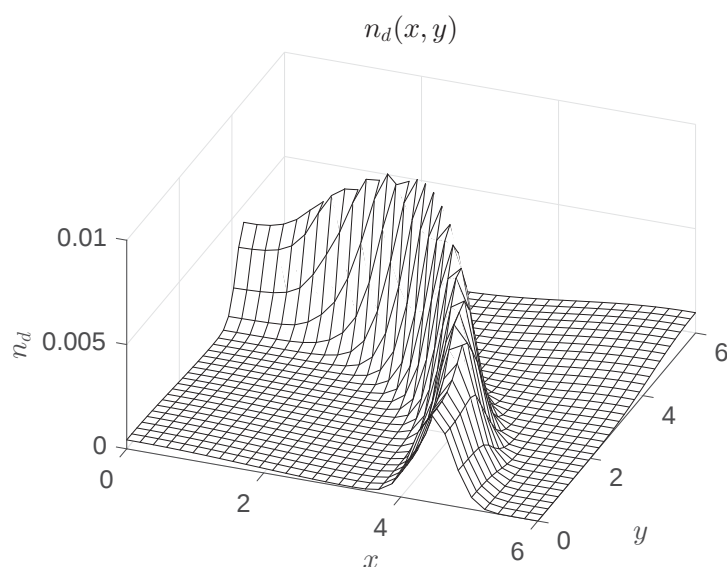
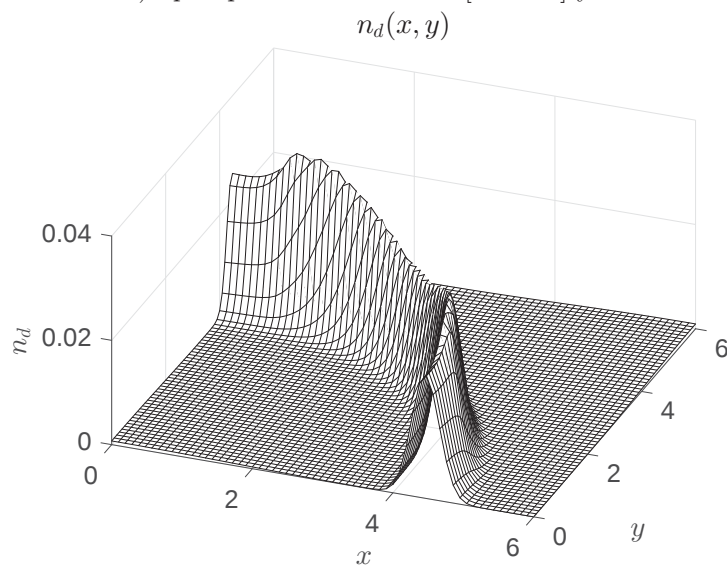
а) пространственная сетка $[32 \times 32]$ узловб) пространственная сетка $[64 \times 64]$ узлов

Рис. 3: Численный расчёт динамики концентрации плотности пылевой компоненты n_d в двумерном случае при начальном условии $E_0 = 4 \cdot 10^{-6}$: а) $[32 \times 32]$ узлов, б) $[64 \times 64]$ узлов

Расчёт динамики образования пылевого войда в двумерном случае по алгоритму из п.3.3 будем проводить при начальном условии $E_0 = 4 \cdot 10^{-6}$ для напряженности электрического поля, а также, при параметрах расчёта $\sigma = 0.7$ и $T = 120$. При этом, двумерное распределение $E(x, y)$ будем задавать как поверхность вращения из одномерного распределения $E(x)$ поворотом вокруг оси Oz , перпендикулярной плоскости xOy . Двумерные распределения плотности концентрации пылевой компоненты n_d представлены на рис.4.3 а, б. Реализация алгоритма расчёта в среде программирования MATLAB представлена в [11].

5. Заключение

Рассмотрена задача о численном моделировании эволюции пылевого войда, динамика которого описывалась моделью АВН. Предложена оригинальная численная реализация модели, а также, разработан программный комплекс в среде программирования MATLAB.

Для исследования двумерного случая предложен алгоритм интегрирования методом расщепления по физическим процессам. Показана сеточная сходимость методов, динамика войда при изменении начальной напряженности электрического поля и представлены результаты по динамике двумерного радиально—симметричного войда.

Автор приносит благодарность своему научному руководителю академику РАН В.И. Пустовойту за ценные замечания, высказанные в ходе обсуждения результатов работы.

Список литературы

- [1] *Фортков В.Е., Морфилл Г.Е.* Комплексная и пылевая плазма: из лаборатории в космос // М.:Физматлит, 2012, 444 стр.
- [2] *Фортков В.Е., Храпак А.Г., Храпак С.А., Молотков В.И., Петров О.Ф.* Пылевая плазма // УФН, 2004, **174**, с. 495–544.
- [3] *Feng H., Mao-Fu Y., Long W., Nan. J.* Voids in Experimental Dusty Plasma // Chin. Phys. Lett., 2004, **21** (1), pp. 121–124.
- [4] *Sarkar S., Mondal M., Bose M. and Mukherjee. S.* Observation of external control and formation of a void in cogenerated dusty plasma // Plasma Sources Sci. Technol., 2015, **24** (3), pp. 1–7.
- [5] *Avinash K., Bhattacharjee A., and Hu S.,* Nonlinear Theory of Void Formation in Colloidal Plasmas // Phys. Rev. Lett., 2003, **90** (7), pp. 1–4.
- [6] *Ng C.S., Bhattacharjee A., Hu S., Ma Z.W., Avinash K.* Generalizations of a nonlinear fluid model for void formation in dusty plasmas // Plasma Phys. Control. Fusion, 2007, **49**, pp. 1583–1597.
- [7] *D’Angelo N.* Dusty plasma ionization instability with ion drag // Phys. Plasmas, 1998, **5**, pp. 3155–3160.
- [8] *Morfill G. E., Thomas H. M., Konopka U., Rothermel H., Zuzic M., Ivlev A., and Goree J.* Condensed Plasmas under Microgravity // Phys. Rev. Lett. 1999, **83** (8), pp. 1598–1601.

- [9] *Kravchenko O.V., Pustovoit V.I.* Numerical Simulation of Dynamics of Concentric Dusty-Plasma Structures // Proc. 15th International Workshop on Magneto-Plasma Aerodynamics, (2016, JIHT RAS, Moscow, Russia), Edt. by V.A. Bityuring, pp. 153–155.
- [10] *Kravchenko O.V., Pustovoit V.I.* Numerical algorithm of 3D dusty void model formation // 7th International Conference on Physics of Dusty Plasmas (March 2014, New Delhi, India).
- [11] ABHPack, GitHub repository
<https://github.com/olekravchenko/ABH/>

SIMULATION OF SPATIALLY LOCALIZED DUSTY PLASMA STRUCTURES IN COMPLEX PLASMA

O.V. Kravchenko

STC UI RAS, BMST, IRE RAS

ok@ntcup.ru

Received 11.07.2016

Results of numerical simulation of a single void dynamic under cylindrical electric field attendance are presented. An original numerical algorithm of Avinash, Battacharjee, Hu (ABH) model simulation is introduced as introduced its generalization on two dimensional cartesian case. A dependence of dusty plasma density on initial electric field is shown.

СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ПЕПТИДА α -ГАРПИНИНА Tk-hefu2 В ВОДЕ ПО ДАННЫМ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Лихоносова А.Ф.^{1,2}, Чугунов А.О.², Ефремов Р.Г.^{1,2}

¹ *Национальный исследовательский университет
«Высшая школа экономики», Россия*

² *Институт биоорганической химии им. академиков
М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН, Россия*

alihonosova@gmail.com

Поступила 19.08.2016

α -Гарпинины – недавно открытое семейство пептидов, обладающих единым типом пространственной укладки полипептидной цепи – две α -спирали, соединенные двумя дисульфидными связями, но при этом имеющих широкий спектр биологических активностей. Теоретически, взяв этот структурный мотив за основу, можно с помощью компьютерного дизайна и последующего синтеза создавать искусственные пептиды с желаемыми биологическими функциями.

В этой работе с помощью компьютерных расчетов исследовали молекулярную динамику модели биоинженерного пептида Tk-hefu2, структура которого неизвестна. Установлены два возможных состояния Tk-hefu2 в водном растворе и описаны их структурно-динамические параметры. Проведен анализ соответствия каждой из полученных моделей пептида функционально активному состоянию, способному связываться с потенциал-чувствительным калиевым каналом и блокировать его работу. Полученные результаты создают основу для понимания количественных структурно-функциональных взаимосвязей α -гарпининов и рационального проектирования на их основе новых высокоэффективных блокаторов/модуляторов калиевых каналов.

УДК 531.78

Введение

Биологическая функция белков неразрывно связана с их пространственной структурой, поскольку работа этих «молекулярных машин» всегда базируется на взаимодействии с молекулой-партнером. В недавних исследованиях [1-4] было изучено семейство α -гарпининов – пептидов с единой пространственной укладкой: две антипараллельные α -спирали, соединенные двумя дисульфидными связями. Эти пептиды различаются по аминокислотной последовательности и обладают широким спектром активности – от

нейрорегуляторной и ингибиторной до антимикробной, что позволило рассматривать их структуру как отправную точку для разработки пептидных агентов с заданной функцией. В частности, были синтезированы два биоинженерных пептида – Tk-hefu1 и Tk-hefu2 – на основе структурного шаблона антимикробного пептида Tk-AMP-X2 [1]. Несмотря на всего две или три произведенные точечные замены, функция этих пептидов кардинальным образом изменилась: вместо антимикробной, они стали обладать блокирующей активностью в отношении потенциал-чувствительных калиевых каналов.

Известно, что у к-хефутоксина-1 [5] – токсина из яда скорпиона, который имеет структуру, характерную для α -гарпининов и является блокатором калиевого канала Kv1.3, – важной для функции является пара остатков Tyr-5 и Lys-19 (так называемая функциональная диада). Новый пептид Tk-hefu1 был получен путем переноса «диады» в состав Tk-AMP-X2 по соответствующим положениям – E6Y и M22K. Кроме того, была сделана дополнительная точечная замена 23 остатка Lys(+) на Glu(–) (K23E), так как известно, что положительный заряд в этом положении снижает активность пептида [6]. Полученный тройной мутант блокировал ток через канал Kv1.3 с концентрацией полунгибирования (IC_{50}), равной 40 мкМ. Исходный пептид Tk-AMP-X2 такой активностью не обладал. Затем был синтезирован пептид, названный Tk-hefu2, путем внесения только диады Y-K в структурный шаблон Tk-AMP-X2 (без замены K23E). В результате его активность в отношении канала оказалась еще выше, чем у Tk-hefu1 (неопубликованные данные А. А. Василевского и сопр.). Пространственная структура Tk-hefu2 экспериментально не определена.

Исследование структурно-функциональных зависимостей α -гарпининов на молекулярном уровне позволит понять, какие параметры являются важными для той или иной их функции. Это, в свою очередь, откроет путь к предсказанию с помощью компьютерного дизайна, где и какие точечные замены нужно сделать для получения пептида с нужной активностью. Для проведения таких компьютерных экспериментов в первую очередь необходимо изучить динамику α -гарпининов в водном растворе, охарактеризовать их структурно-динамические параметры, понять, как происходит связывание пептидов с их мишенью в клетке – молекулой калиевого канала.

В данной работе с помощью метода молекулярной динамики было исследовано конформационное пространство Tk-hefu2 в явно заданном водном окружении, описаны структурно-динамические параметры пептида и предложены две наиболее вероятные модели его пространственной структуры.

Сравнительный анализ структурно-динамических и физико-химических свойств полученных конформационных состояний позволил сделать вывод о том, что потенциально биологически активным является лишь одно из них. Именно его следует в будущем брать за основу новых искусственных пептидов-мутантов – поровых блокаторов калиевых каналов.

1. Материалы и методы

Для построения модели пространственной структуры Tk-hefu2 использовали метод компьютерного моделирования на основании гомологии. В качестве стартовых моделей использовали известные структуры двух гомологичных Tk-hefu2 пептидов – Tk-hefu1 (биоинженерный пептид с функцией блокатора калиевого канала) и Tk-AMP-X2 (антимикробный пептид (АМП) из семян пшеницы), – в которые вносили точечные замены аминокислотных остатков (см. табл. 1). Затем проводили расчет молекулярной динамики (МД) с целью найти конформации, которые могут присутствовать в водном растворе в равновесном состоянии.

Таблица 1. **Аминокислотные последовательности природного антимикробного пептида Тк-AMP-X2 и двух биоинженерных пептидов — Тк-hefu1 и Тк-hefu2**

Название пептида	Функция	PDB ID ¹	Аминокислотная последовательность ²
Тк-AMP-X2	АМП	2M6A	ADDRCERMCQRYHNRREKKQCMKGCYRG
Тк-hefu1	Блокатор К-канала	(*) ³	ADDRCY [~] RM [~] CQRYHNRREKKQCK [~] EGCRYG
Тк-hefu2	Блокатор К-канала		ADDRCY [~] RM [~] CQRYHNRREKKQCK [~] KGCRYG

¹ PDB ID — четырехзначный идентификатор для пространственных структур биомолекул, опубликованных в банке данных 3D структур белков и нуклеиновых кислот Protein Data Bank (PDB)

² Жирным шрифтом и нижним подчеркиванием обозначены те замены, которые были внесены в структуру Тк-AMP-X2

³ Структура Тк-hefu1 получена в Лаборатории биомолекулярной ЯМР-спектроскопии ИБХ РАН, но на данный момент не опубликована в PDB

1.1. Построение стартовой модели пептида Тк-hefu2

Пространственные структуры пептидов Тк-hefu1 и Тк-AMP-X2 были экспериментально получены в лаборатории биомолекулярной ЯМР-спектроскопии ИБХ РАН [1]. Структура Тк-hefu1 установлена, но пока не опубликована в базе PDB. В каждом PDB-файле содержится набор из 10 моделей структуры пептида, расшифрованных на основании данных спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР). Чтобы обеспечить наиболее полную выборку и собрать статистику для проверки воспроизводимости результатов, использовали 10 моделей Тк-AMP-X2 и 4 модели Тк-hefu1 (остальные 6 моделей практически идентичны этим четырем). Оба набора моделей Тк-hefu2, построенных на основе разных структурных шаблонов, имеют похожую конформацию, но, тем не менее, наблюдается несколько локальных отличий, являющихся ключевыми для их функций, например, углы скрещивания двух α -спиралей, расстояние между аминокислотными остатками в функциональной диаде и др. Стартовые структуры модели Тк-hefu2 были получены путем *in silico* замены определенных боковых цепей в известных структурах в программе PyMol [7]. В случае шаблона Тк-AMP-X2 была произведена замена двух аминокислотных остатков (E6Y и M22K), в случае шаблона Тк-hefu1 — одна замена (E23K). Таким образом, в общей сложности были построены 14 стартовых моделей пространственной структуры пептида Тк-hefu2. На рис. 1 в качестве примера изображены две модели, созданные на основе шаблонов Тк-AMP-X2 и Тк-hefu1.

1.2. Выбор силового поля

С целью поиска оптимального протокола для расчета МД α -гарпина Тк-AMP-X2 вычисления были проведены с использованием четырех силовых полей: GROMOS45A3 [8] (силовое поле без явного задания неполярных атомов водорода), AMBER99SB-ILDN [9], CHARMM36-NOV-2014-MOD [10] и AMBER99SBNMR1-ILDN [11] (параметры сведены в табл. 2). Три последних — новые силовые поля, уточненные с помощью данных ЯМР-спектроскопии и рентгеноструктурного анализа. При выборе силового поля и протокола МД следили за такими показателями как среднеквадратичное отклонение (СКО), число конформационных кластеров (обозначающее гетерогенность конформационного ансамбля), углы скрещивания спиралей и расстояние между заряженными остатками Glu-6 (–) и Lys-18 (+) в ионном мостике. Критерием выбора было наилучшее соответствие структур, полученных в МД, нативному состоянию пептида.

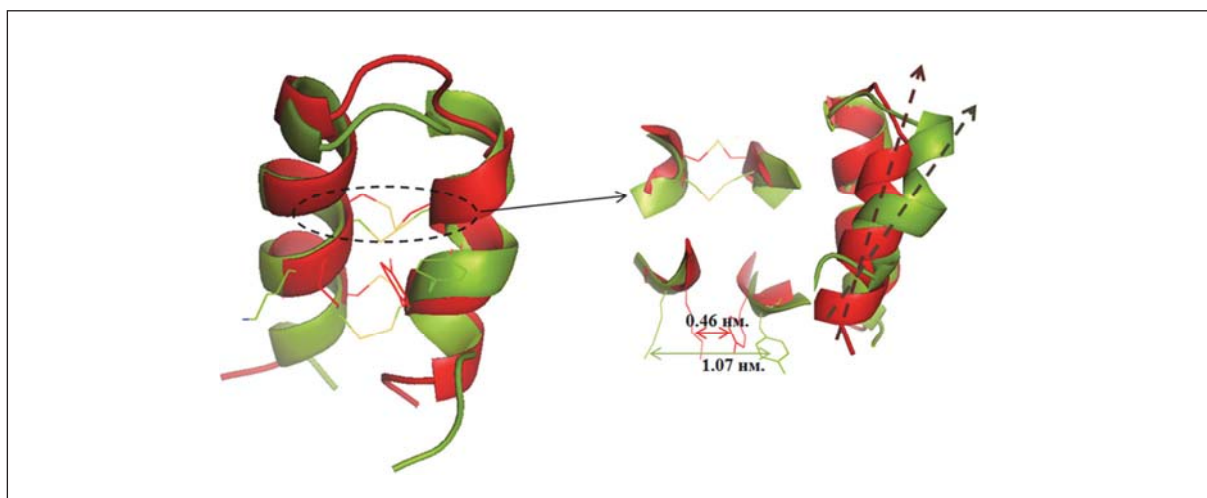


Рис. 1. Пример двух отличающихся стартовых моделей пептида Tk-hefu2. Красным цветом изображен пептид, построенный на основе шаблона Tk-hefu1, зеленым — на основе Tk-AMP-X2. Справа изображены основные параметры, отличающиеся у этих моделей — дисульфидные связи, расстояние между аминокислотными остатками Туг-6 и Lys-22, углы скрещивания спиралей (спирали аппроксимированы векторами, изображенными пунктирными стрелками).

1.3. Протокол МД

В результате анализа приведённых выше параметров молекулы Tk-AMP-X2 для дальнейших расчетов было выбрано силовое поле и протокол МД под номером 7 в табл. 2. Алгоритм интегрирования – leap-frog [12], термостатирование осуществляли с помощью алгоритма масштабирования скоростей v-rescale [13], поддержание постоянного давления осуществляли за счет использования алгоритма Берендсена [14]. Все расчеты МД Tk-hefu2 были проведены с помощью программного пакета GROMACS (версии 4.5.2 и 5.0) [15,16].

1.4. Методы анализа траекторий МД

Для исследования конформационных возможностей систем и сравнения их с экспериментально полученной структурой пептида были рассчитаны следующие характеристики:

- Средняя величина СКО (среднеквадратичное отклонение) координат атомов каждого МД-конформера от его стартовой структуры. Для расчета использовали утилиту `g_rms` пакета GROMACS. Вычисления проводили по атомам основной цепи α -спиралей Tk-hefu2 для образующих α -спирали остатков 5-10 и 14-25.
- Состав и число кластеров всех структур, полученных на основании анализа траектории МД. Расчет выполняли с использованием утилиты `g_cluster` GROMACS, алгоритм `gromos`, по атомам основной цепи α -спиралей (для остатков 5-10 и 14-25), радиус отсежки при определении кластера составлял 0,2 нм.
- Расстояние между центрами масс заряженных групп боковых цепей остатков Glu-6 (–) и Lys-18 (+) в ионном мостике. Расчет выполняли с использованием утилиты `g_dist` пакета GROMACS.
- Величины двугранных углов χ_1 , χ_2 и χ_3 дисульфидных связей. Расчет осуществляли с помощью утилиты `gmx gangle` пакета GROMACS.
- Число контактов белок-белок вычисляли с помощью утилиты `g_hbond` программы GROMACS.

Таблица 2. Параметры расчетов МД

No	T ¹ , нс	V ² , нм ³	N _s / N _{mol} ³	Силовое поле	Модель воды	Coulomb type ⁴	dt ⁵ , фс	n ⁶
1	100	Куб (6 ³)	12242/325	gromos45a3	spc	reaction field	2	6
2	100	Куб (5 ³)	12387/470	amber99sb-ildn	tip3p	pme	2	5
3	65	Параллел ⁷ . (4.8×4.3×4.3)	11738/470	amber99sb-ildn	tip4p	pme	2	1
4	7	Параллел. (8.8×8.3×8.4)	80594/470	amber99sb-ildn	tip4p	pme	4	1
5	100	Октаэдр (6.1×5.7×5...)	22242/470	amber99sb-ildn	tip4p	pme	2	3
6	200	Додекаэдр (6.4×6.4×5...)	24476/470	charmm36- nov2014-mod	tip4p	pme	2	4
7	200	Додекаэдр (6.4×6.4×5...)	24476/470	amber99sbn- mr1-ildn	tip4p	pme	2	4

¹ Длительность траектории МД² Форма и размер ячейки³ N_s — число атомов в системе с учетом воды, N_{mol} — число атомов в молекуле пептида⁴ Алгоритм учета электростатических взаимодействий⁵ Шаг интегрирования⁶ Число рассчитанных траекторий МД⁷ Параллелепипед

- Углы скрещивания α -спиралей. Две спирали аппроксимируются двумя направленными векторами $\vec{r}_1$ и $\vec{r}_2$, а угол рассчитывается по формуле $\cos(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (\vec{r}_1, \vec{r}_2) / (|\vec{r}_1| |\vec{r}_2|)$. Расчет осуществляли с помощью программы, написанной специально для этого на языке Python.

2. Результаты и обсуждение

2.1. Влияние различных силовых полей на результат МД

Метод МД дает адекватное и внутренне самосогласованное описание поведения реальных молекулярных систем. Однако данный метод является эмпирическим, поэтому важным является вопрос о соответствии результатов МД экспериментальным данным. В настоящее время значительные усилия направлены на совершенствование применяемых методов моделирования, устранение недостатков и попытки улучшить сходимость результатов, полученных при исследовании молекул с использованием различных силовых полей [17–19]. При выборе силового поля для расчета МД пептида Тк-hefu2 было обнаружено, что для различных силовых полей и других условий компьютерного моделирования динамическое поведение одной и той же молекулы может быть различным. Основным критерием для выбора протокола был расчет по МД-траекториям химических сдвигов для атомов, измеренных в прямом ЯМР-эксперименте. Также различия были проиллюстрированы с помощью таких показателей как величина СКО от начальной структуры, углы скрещивания спиралей, число образующихся конформационных кластеров, расстояние в ионном мостике между остатками Glu-6 и Lys-18.

С помощью дисперсионного статистического анализа было показано, что различия в значениях СКО в семи группах траекторий МД (см. табл. 2) статистически значимы. Наименьшие средние значения наблюдали в 5, 6, 7 группах. Кроме этого, в 6 и 7 груп-

Таблица 3. **Результаты расчета параметров траекторий МД пептида Тк-АМР-Х2. В скобках указаны значения для ЯМР-структуры**

№ ¹	Число кластеров	Среднее СКО	Ионный мостик ² (0.521 нм)	Угол скрещивания α -спиралей, град. (143°)
1	4	0.201	0.765±0.478	130±3, 152±10
1	2	0.207	1.249±0.139	161±7, –165±4
1	3	0.229	0.983±0.229	112±7, 149±9
1	3	0.234	1.167±0.269	–159±10
1	3	0.250	1.332±0.128	–160±9
1	3	0.205	1.305±0.176	162±7, –166±4
2	8	0.195	0.936±0.335	151±15
3	1	0.192	1.065±0.216	153±8
4	1	0.115	0.775±0.174	153±7
4	3	0.225	1.113±0.238	–164±8
4	4	0.217	0.765±0.286	159±7
5	3	0.199	1.066±0.372	153±10
5	1	0.135	0.547±0.236	139±9
5	6	0.213	0.845±0.457	137±7, 163±6
5	1	0.185	1.033±0.223	153±8
5	1	0.114	0.760±0.203	148±7
6	1	0.168	1.024±0.216	163±4, –166±4
6	1	0.177	1.188±0.164	172±5, –169±6
6	1	0.200	1.124±0.193	164±7
6	1	0.095	1.027±0.165	162±8
7	5	0.177	1.002±0.271	151.8±10, –160±7
7	1	0.198	1.172±0.214	168±7, –157±10
7	1	0.187	1.155±0.156	169.6±5, –166±9
7	1	0.096	0.822±0.178	153±7

¹ Номер группы из табл. 2.

² Среднее расстояние между центрами масс заряженных групп Lys-18(+) и Glu-6(–)

пах были зарегистрированы самые низкие значения числа кластеров, что говорит о наиболее высокой стабильности соответствующих структур. Отметим, что на основе сравнительного анализа был сделан вывод о том, что МД Тк-АМР-Х2, рассчитанная с помощью протокола под номером 7 в табл. 2, лучше всего описывает данные, полученные с помощью ЯМР-спектроскопии. Результаты некоторых расчетов представлены в табл. 3.

2.2. В водном растворе реализуются два различных состояния одной модели Тк-hefu2

Методом МД были получены две группы траекторий. Первая группа – Тк-hefu2(Тк-АМР-Х2) – содержит траектории модели Тк-hefu2, полученные на основе структурного шаблона Тк-АМР-Х2. Во второй группе – Тк-hefu2(Тк-hefu1) – при построении стартовых моделей были использованы шаблоны Тк-hefu1. Ожидается, что в результате расчета траекторий МД на равновесных участках траекторий МД заселенности состояний будут примерно одинаковыми в обеих группах, и при этом не будут появляться новые

Таблица 4. **Результат расчета траекторий МД пептида Тк-hefu2, построенного по двум структурным шаблонам. Для траекторий, в которых наблюдали конформационный переход, показаны результаты расчета после перехода**

Шаблон	СКО ¹ , нм	χ_3 (9-21/5-25) ² , град.	Число клас-теров	Среднее расстояние Lys-22-Tyr-6, нм	Конформа-ционный переход
Tk-AMP-X2	0.20±0.02	86.6±9 (95.0)/ 75.4±9 (101.1)	5	1.06±0.13	–
Tk-AMP-X2	0.27±0.06	99.0±10 (96.0)/ 80.1±8 (101.3)	8	0.98±0.16	–
Tk-AMP-X2	0.15±0.02	92.6±10 (96.9)/ 83.5±8 (100.0)	9	1.02±0.12	–
Tk-AMP-X2	0.22±0.04	80.1±12 (95.0)/ 84.8±10 (101.1)	11	0.90±0.17	–
Tk-AMP-X2	0.22±0.03	–73.7±9 (96.9)/ 90.4±10 (100.0)	8	1.03±0.12	–
Tk-AMP-X2	0.07±0.01	–82.6±9 (–93.8)/ –84.8±8 (–95.9)	2	0.52±0.01	+
Tk-AMP-X2	0.10±0.02	–86.5±8 (–89.0)/ 97.3±12 (101.3)	3	0.88±0.11	–
Tk-AMP-X2	0.11±0.01	–87.0±7 (–93.7)/ –83.5±8 (–92.5)	3	0.42±0.09	+
Tk-AMP-X2	0.09±0.02	–83.7±8 (–93.8)/ –82.3±10 (–95.9)	5	0.67±0.21	+
Tk-AMP-X2	0.13±0.02	–86.6±7 (–93.7)/ –82.6±8 (–92.5)	1	0.86±0.09	–
Tk-AMP-X2	0.07±0.02	–81.8±8 (–93.7)/ –84.7±7 (–92.5)	4	0.54±0.05	+
Tk-hefu1	0.07±0.01	–80.7±7 (–86.1)/ –76.4±8 (–80.2)	1	0.45±0.07	–
Tk-hefu1	0.06±0.01	–82.2±7 (–91.3)/ –82.4±7 (–74.4)	1	0.52±0.05	–
Tk-hefu1	0.07±0.01	–80.8±7 (–74.7)/ –77.2±8 (–78.3)	1	0.48±0.07	–
Tk-hefu1	0.08±0.02	–83.1±8 (–68.2)/ –83.4±9 (113.1)	2	0.50±0.07	–

¹ СКО от стартового состояния.

² Среднее значение угла χ_3 для двух дисульфидных связей Cys-9-Cys-21 и Cys-5-Cys-25. В скобках указаны значения углов для начального состояния.

состояния. Таким образом, будет получен представительный конформационный ансамбль системы в равновесном состоянии.

На основании анализа результатов расчетов МД было отмечено, что в группе Тк-hefu2(Тк-hefu1) значения СКО наименьшие (см табл. 4), в то время как структуры в группе Тк-hefu2(Тк-AMP-X2), хотя и сохраняют тип пространственной укладки полипептидной цепи (т.н. «фолд»), характерный для α -гарпонинов, но далеко уходят от стартовой модели. В результате расчета значений их СКО от наиболее часто встречающихся структур, полученных из объединенной траектории Тк-hefu2(Тк-hefu1), было обнаружено, что приближение структур из Тк-hefu2(Тк-AMP-X2) к структурам из Тк-hefu2(Тк-hefu1) происходит в четырех случаях из десяти (рис. 2), то есть наблюдается конформационная гетерогенность семейства моделей Тк-hefu2(Тк-AMP-X2). Структурные различия описывали с помощью таких характеристик как расстояние в функционально важной диаде Tyr-6-Lys-22, число контактов белок-белок, угол скрещивания спиралей. Обнаружено, что в момент «приближения» МД-конформаций к модели Тк-hefu1 происходит поворот спирали 5-10, который регулирует расстояние в диаде Tyr-6-Lys-22, за счет чего увеличивается число контактов белок-белок (рис. 3), то есть происходит конформационный переход.

Таким образом, выявлены два структурно-различных состояния модели Тк-hefu2. Установлены ключевые параметры, определяющие различия в этих структурах. Для четырех траекторий МД Тк-hefu2(Тк-AMP-X2), в которых наблюдали конформационный переход, был описан механизм переключения, реализующийся одинаково во всех четырех случаях, из чего следует, что событие не является случайным.

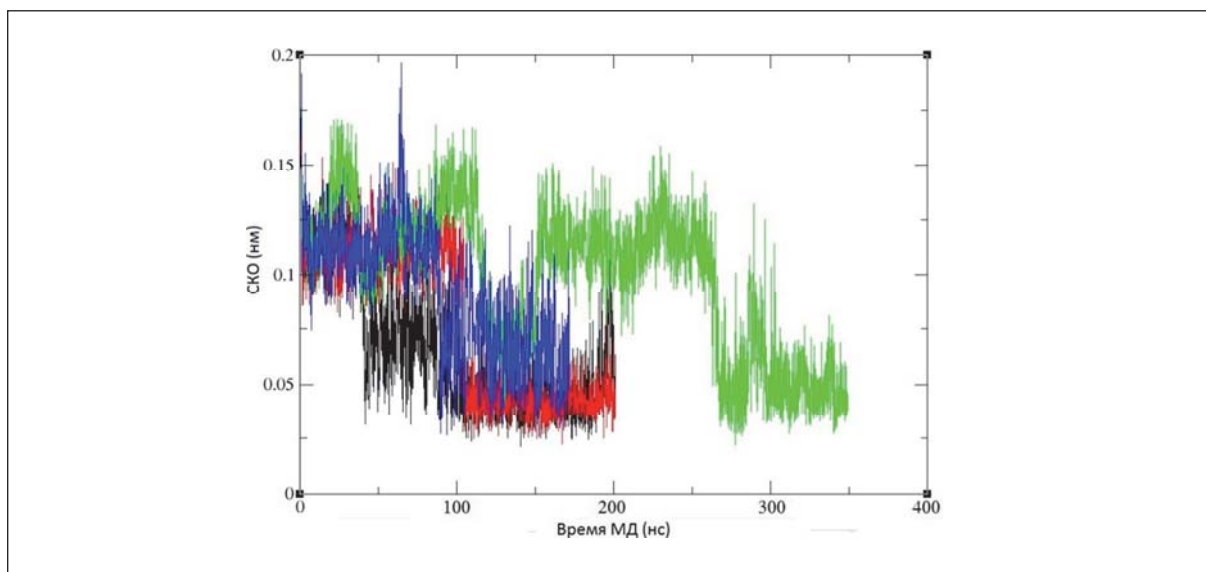


Рис. 2. Зависимость величины СКО от времени МД для четырех траекторий МД пептида Tk-hefu2(Tk-AMP-X2) от наиболее часто встречающегося состояния в траекториях Tk-hefu2(Tk-hefu1). С течением времени величина СКО уменьшается, а, значит, эти четыре модели Tk-hefu2(Tk-AMP-X2) в динамике начинают «приближаться» к моделям Tk-hefu2(Tk-hefu1).

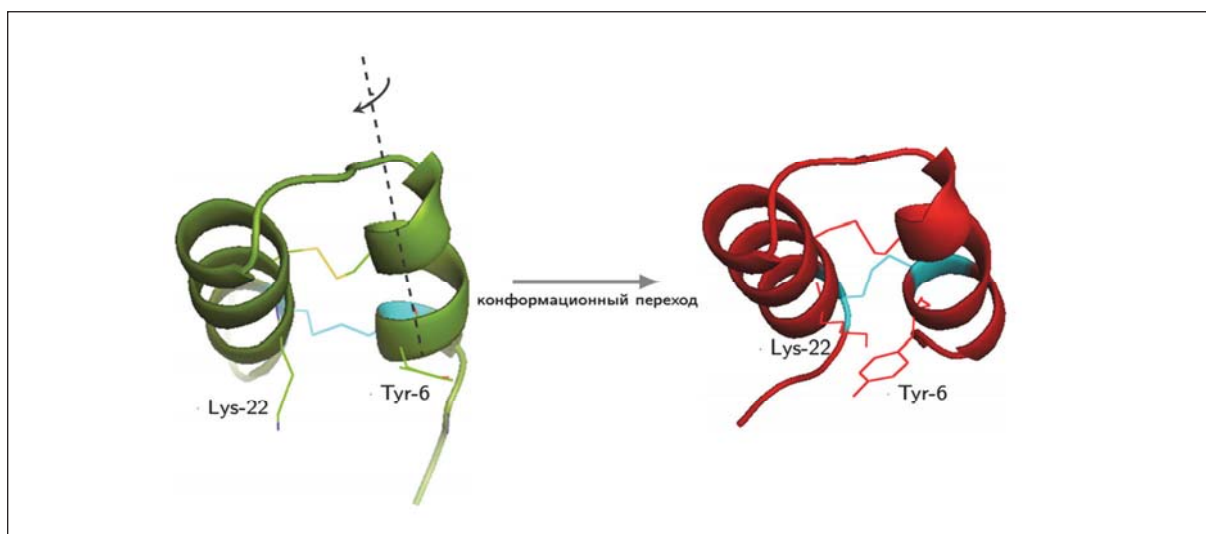


Рис. 3. Конформационный переход, наблюдаемый в молекуле Tk-hefu2 в ходе МД в воде. Слева изображена молекула Tk-hefu2 до перестройки, справа — после приближения к структуре, близкой к Tk-hefu1. Голубым цветом выделены дисульфидные связи, которые меняют конфигурацию в момент перестройки. Обозначены остатки Lys-22 и Tyr-6, которые после перестройки заметно сближаются, за счет чего увеличивается число контактов белок-белок.

Также обнаружены различия в динамическом поведении моделей Tk-hefu2(Tk-AMP-X2) в зависимости от угла χ_3 в дисульфидной связи Cys-9-Cys-21. Пептид с отрицательным значением угла в исходной конформации ведет себя более стабильно, что видно по числу кластеров и средней величине СКО от стартовой модели. Кроме того, конформационный переход наблюдается только в траекториях Tk-hefu2(Tk-AMP-X2) с отрицательными значениями угла χ_3 в двух дисульфидных связях. Данное наблюдение важно, поскольку в ЯМР-структурах Tk-AMP-X2 есть как отрицательные, так и поло-

жительные значения углов χ_3 в равных пропорциях, поскольку лишь на основании экспериментальных ЯМР-данных точное значение углов χ_3 определить не удастся. Поэтому, если бы для моделирования были выбраны структуры только с положительными величинами углов, переходов могло не произойти, а, значит, не была бы найдена единая конформация при старте МД с разных шаблонов. Отсюда можно сделать вывод для дальнейших исследований – при построении стартовых структур α -гарпининов (и, видимо, других полипептидов со сходной организацией дисульфидных связей) нужно обращать внимание на гетерогенность структур, полученных в эксперименте, а именно на конфигурации дисульфидных связей, и для расчетов использовать различные варианты.

2.3. Лишь одно из наблюдаемых в ходе МД в воде состояний Tk-hefu2 потенциально активно в блокировании K^+ -канала Kv1.3

Как указано выше, расчеты МД в воде позволили выявить два конформационных состояния пептида Tk-hefu2, одно из которых ближе к антимикробному пептиду (АМП) Tk-AMP-X2, а второе – к блокатору калиевого канала Kv1.3 Tk-hefu1. Предположительно, между этими двумя состояниями в растворе существует динамическое равновесие, которое существенно смещается в сторону одной из конформаций в случае аминокислотных замен в «горячих точках», меняющих пептид структурно и функционально в направлении АМП или блокатора канала. Мы провели анализ пространственного и физико-химического соответствия каждой из этих конформаций мишени действия пептида Tk-hefu2 – каналу Kv1.3, – смоделировав возможную пространственную структуру комплекса Tk-hefu2—Kv1.3 на основе экспериментально определенной модели комплекса харибдотоксина с близким каналом (Kv1.2-2.1) [20]. Выбранная методика сравнения, основанная на применении метода «белковой топографии» [21], позволяет «картировать» поверхности взаимодействующих биомолекул и количественно оценивать степень их соответствия друг другу.

Результаты сравнения (данные не приведены и готовятся к отдельной публикации) показали, что именно состояние Tk-hefu2, близкое к конформации пептида-блокатора Tk-hefu1, хорошо соответствует структуре K^+ -канала, позволяя выдвинуть гипотезу, что лишь одно из двух найденных конформационных состояний соответствует биологически-активной структуре данного пептида.

3. Заключение

В результате проделанной работы методами компьютерного моделирования были предложены две модели пространственной структуры пептида Tk-hefu2 и исследованы возможности метода МД для небольших и сравнительно жестких пептидов, таких как α -гарпинины. Показано, что метод МД не всегда позволяет эффективно исследовать конфигурационное пространство макромолекул, даже таких небольших и конформационно-ограниченных. Одна из очевидных рекомендаций – не ограничиваться в расчетах единственной МД-траекторией, но накапливать больше статистики, производя несколько независимых стартов с различающихся конформационных состояний одной и той же молекулы.

Было показано, что разные силовые поля и параметры протокола МД даже для такой простой (с точки зрения биолога) системы, как α -гарпинины, работают по-разному. В результате расчетов был выбран протокол, который хорошо описывает экспериментальные данные (химические сдвиги из ЯМР-экспериментов).

Жесткость пространственной структуры α -гарпининов объясняется наличием в ней двух дисульфидных связей, которые крепко удерживают две спирали. Именно поэтому осуществлять переход из одного состояния в другое для такой молекулы достаточно сложно (по крайней мере, такие события довольно редко наблюдаются в МД). В данной

работе было показано, что переходы к структуре, близкой к Tk-hefu1, осуществлялись только в случае отрицательных значений углов χ_3 в обеих дисульфидных связях (около -90°) и не наблюдались в случае положительных углов χ_3 (около $+90^\circ$) хотя бы в одной дисульфидной связи. Поэтому, чтобы понизить вероятность неполного анализа конформационного фазового пространства пептида в воде, в расчетах следует использовать наиболее полную выборку из экспериментальных данных, а именно структуры с различными значениями углов χ_3 в дисульфидных связях.

Наконец, детальный анализ модели комплекса Tk-hefu2 с K^+ -каналом показал, что только в одной из полученных наиболее заселенных конформаций взаимодействие с белком-мишенью может быть выгодным. Это свидетельствует о том, что даже небольшие структурные отличия в пептидах могут быть критически важными для проявления пептидами семейства α -гарпининов биологической активности.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (№ 14-24-00118), гранта Президента РФ (№ МК-6310.2015.4) и Программы Президиума РАН «Молекулярная и клеточная биология». Мы благодарим Светлану Нольде за помощь в сопоставлении данных МД и спектроскопии ЯМР и выборе оптимального силового поля, а также Александра Василевского за обсуждение результатов. Л.А.Ф. выражает благодарность Программе фундаментальных исследований НИУ ВШЭ за поддержку. Часть расчетов МД проводили с использованием вычислительных ресурсов Суперкомпьютерного центра «Политехнический» СПбГТУ.

Литература

1. Berkut A. A., Usmanova D. R., Peigneur S., Oparin P. B., Mineev K. S., Odintsova T.I., Tytgat J., Arseniev A. S., Grishin E. V., and Vassilevski A.A. "Structural Similarity between Defense Peptide from Wheat and Scorpion Neurotoxin Permits Rational Functional Design." *J. Biol Chem.* 289(20), 14331-14340, 2014
2. Oparin P. B., Mineev K. S., Dunaevsky Y. E., Arseniev A. S., Belozersky M. A., Grishin E. V., Egorov T. A., and Vassilevski A. A. "Buckwheat trypsin inhibitor with helical hairpin structure belongs to a new family of plant defence peptides." *Biochem. J.* 446, 69–77, 2012.
3. Nolde S. B., Vassilevski A. A., Rogozhin E. A., Barinov N. A., Balashova T. A., Samsonova O.V., Baranov Y. V., Feofanov A. V., Egorov T. A., Arseniev A. S., and Grishin E. V. "Disulfidestabilized helical hairpin structure and activity of a novel antifungal peptide EcAMP1 from seeds of barnyard grass (*Echinochloa crus-galli*)." *J. Biol. Chem.* 286, 25145–25153, 2011.
4. Connors R., Konarev A. V., Forsyth J., Lovegrove A., Marsh J., Joseph-Horne T., Shewry P., and Brady R. L. "An unusual helix-turn-helix protease inhibitory motif in a novel trypsin inhibitor from seeds of Veronica (*Veronica hederifolia* L.)." *J.Biol. Chem.* 282, 27760-27768, 2007.
5. Srinivasan K. N., Sivaraja V., Huys I., Sasaki T., Cheng B., Kumar T. K., Sato K., Tytgat J., Yu C., San B. C., Ranganathan S., Bowie H.J., Kini R. M., and Gopalakrishnakone P. " κ -hefutoxin1, a novel toxin from the scorpion *Heterometrus fulvipes* with unique structure and function. Importance of the functional diad in potassium channel selectivity." *J. Biol.Chem.* 277, 30040-30047, 2002.
6. Nirthanan S., Pil J., Abdel-Mottaleb Y., Sugahara Y., Gopalakrishnakone P., Joseph J. S., Sato K., and Tytgat J. "Assignment of voltage-gated potassium channel blocking activity to κ -KTx1.3, a non-toxic homologue of κ -hefutoxin-1, from *Heterometrus sprinifer* venom." *Biochem.Pharmacol.* 69, 669-678, 2004.
7. DeLano W. L. "The PyMol Molecular Graphics System.", <http://www.pymol.org>, 2002.
8. Schuler L. D., Daura X., and Van Gunsteren W. F. "An improved GROMOS96 force field for aliphatic hydrocarbons in the condensed phase." *J. Comput. Chem.* 22, 1205-1218, 2001.
9. Lindorff-Larsen K., Piana S., Palmo K., Maragakis P., Klepeis J. L., Dror R. O., and Shaw D. E. "Improved Side-Chain Torsion Potentials For The Amberff99SB Protein Force Field." *Proteins: Struct., Funct., Genet.* 78, 1950-1958, 2010.
10. Best R. B., Zhu X., Shim J., Lopes P. E. M., Mittal J., Feig M., and MacKerell A. D. "Optimization of the Additive CHARMM All-Atom Protein Force Field Targeting Improved Sampling of the Backbone

- φ , ψ and Side-Chain χ_1 and χ_2 Dihedral Angles." *Journal of Chemical Theory and Computation*. 8(9), 3257-3273, 2012.
11. Daura X., Gademann K., Jaun B., Seebach D., van Gunsteren W. F., and Mark A. E. *Angew. Chem. Int. Ed.* 38, 236-240, 1999.
 12. Hockney R. W., Goel S. P., Eastwood J. "Quiet High Resolution Computer Models of a Plasma." *J. Comp. Phys.* 14, 148-158, 1974.
 13. Bussi G., Donadio D., Parrinello M. "Canonical sampling through velocity rescaling." *J. Chem. Phys.* 126, 014101, 2007.
 14. Berendsen H. J. C., Postma J. P. M., DiNola A., Haak J. R. "Molecular dynamics with coupling to an external bath." *J. Chem. Phys.* 81, 3684-3690, 1984.
 15. Pronk S., Páll S., Schulz R., Larsson P., Bjelkmar P., Apostolov R., Shirts M.R., Smith J.C., Kasson P.M., Van der Spoel D., Hess B., Lindahl E. "GROMACS 4.5: a high-throughput and highly parallel open source molecular simulation toolkit." *Bioinformatics*. 29, 845-854, 2013.
 16. Abraham M. J., Van der Spoel D., Lindahl E., Hess B. "GROMACS user manual version 5.0.4." www.gromacs.org, 2014.
 17. Van Gunsteren W.F., Bakowies D., Baron R. "Biomolecular modeling: goals, problems, perspectives." *Angewandte Chemie International Edition*. 45, 4064-4092, 2006.
 18. Feig M., MacKerell A., Brooks C. "Force field influence on the observation of π -helical protein structures in molecular dynamics simulations." *Journal of Computational Chemistry*. 107, 2831-2836, 2003.
 19. Hornak V., Abel R., Okur A. "Comparison of multiple AMBER force fields and development of improved protein backbone parameters." *Proteins*. 65, 712-725, 2006.
 20. Banerjee A., Lee A., Campbell E., and Mackinnon R. "Structure of a pore-blocking toxin in complex with a eukaryotic voltage-dependent K(+) channel". *Elife Sciences*. e00594, 2013.
 21. Koromyslova A. D., Chugunov A. O., and Efremov R. G. "Deciphering Fine Molecular Details of Proteins' Structure and Function with a Protein Surface Topography (PST) Method." *Chemical information and Modeling*. 54(4), 1189-1199, 2014.

STRUCTURE AND DYNAMICS OF α -HAIRPININ PEPTIDE Tk-hefu2 IN WATER: COMPUTER SIMULATIONS

Lihonosova A.F.^{1,2}, Chugunov A.O.², Efremov R.G.^{1,2}

¹*National Research University HSE*

²*IBCh RAS*

alihonosova@gmail.com

Received 19.08.2016

α -Hairpinin peptides is the novel family of defense peptides that adopt a common fold – two α -helices stabilised by two disulphide bonds – carrying out a variety of functions. Theoretically, universal α -hairpinin scaffold could be used for rational design and further construction of novel molecules with desired biological functions. In this research, we explored the dynamics of the model of bioengineered α -hairpinin peptide Tk-hefu2, which spatial structure is unsolved. Computer modelling reveals two major conformational states of Tk-hefu2 in water. Structural and dynamic parameters are described. Further analysis identifies one of the states as probably functionally active, exhibiting potassium channel blocking activity. This result provides basis for understanding the quantitative structure–function relationships of α -hairpinins and therefore for the rational design of novel blockers/modulators of voltage-gated potassium channels.

СПЕКТРАЛЬНЫЕ КЛАСТЕРЫ ПЛАНАРНОЙ ЛОВУШКИ ПЕННИНГА С РЕЗОНАНСНЫМ НАРУШЕНИЕМ АКСИАЛЬНОЙ СИММЕТРИИ

Е.М. Новикова

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

emnovikova@hse.ru

Поступила 15.11.2015

Дано описание спектральных характеристик планарной ловушки Пеннинга с кольцевой конфигурацией электродов и магнитным полем, отклоненным от аксиальной оси. Найдены соотношения между физическими параметрами, при которых наступает комбинированный частотный резонанс в гармонической (квадратичной) части гамильтониана вблизи центра ловушки. Усредненная ангармоническая часть гамильтониана представлена обыкновенным дифференциальным оператором второго порядка с полиномиальными коэффициентами, найдена асимптотика его собственных значений и собственных функций. Получена формула для асимптотики собственных состояний исходного гамильтониана ловушки в спектральных кластерах вблизи собственных значений гармонической части.

УДК 517.955.8

Введение

Ловушки Пеннинга являются важными физическими устройствами, изучению которых посвящена большая литература. Они широко используются, например, для целей точных измерений или для реализации моделей квантовой информатики [1-7]. Математическая модель ловушки Пеннинга становится нетривиальной при наличии ангармонических членов в потенциалах, которые задаются внешними полями (электрическим и магнитным). Анализ влияния ангармонизма может быть эффективно проведен в режиме частотного резонанса, что является для нас главным моментом.

Данная работа продолжает цикл статей [8–11], посвященных исследованию спектральной задачи для электрона в планарной ловушке Пеннинга. В исследуемой ловушке электрон удерживается с помощью неоднородного электрического поля, порожденного кольцевыми концентрическими электродами, и однородного магнитного поля. Магнитное поле слегка отклонено от оси симметрии ловушки.

Первый параграф содержит описание модели и математическую постановку задачи. В нем сначала (раздел 1.1) подробно описывается конфигурация электромагнитного поля и объясняется процедура обезразмеривания. Затем (раздел 1.2) приводятся соотношения между физическими параметрами, при которых наступает комбинированный частотный резонанс в гармонической части гамильтониана вблизи центра ловушки, и выписывается эффективный гамильтониан, описывающий движение

электрона в планарной квантовой ловушке Пеннинга (раздел 1.3). Далее, с помощью линейной замены переменных его старшая часть $\hat{H}_0$ приводится к нормальной квадратичной форме с гиперболическим резонансом 2:(-1):2 между частотами. И наконец, формулируется спектральная задача в пространстве $L^2(\mathbb{R}^3)$ для возмущенного эффективного гамильтониана $\hat{H}_0 + \varepsilon \hat{H}_1 + \varepsilon^2 \hat{H}_2$ (раздел 1.4).

Следуя [12], для решения спектральной задачи мы последовательно применяем два метода: квантовое усреднение и когерентное преобразование.

Квантовое усреднение описывается в параграфе 2. Оно применяется в два этапа. Сначала возмущение $\hat{H}_1 + \varepsilon \hat{H}_2$ преобразуется к оператору $\hat{H}_{10} + \varepsilon \hat{H}_{20}$, коммутирующему со старшей частью $\hat{H}_0$ (раздел 2.1). При этом усредненное возмущение $\hat{H}_{10} + \varepsilon \hat{H}_{20}$ выражается через образующие алгебры квантовых симметрий гармонической части $\hat{H}_0$. Затем оператор $\hat{H}_{20}$ преобразуется к оператору $\hat{H}_{200}$, который коммутирует и со старшей частью $\hat{H}_0$, и с главной частью $\hat{H}_{10}$ возмущения (раздел 2.2), и в результате исходная спектральная задача сводится к спектральной задаче для трех коммутирующих гамильтонианов: $\hat{H}_0$, $\hat{H}_{10}$, и $\hat{H}_{200}$. Алгебру совместных симметрий операторов $\hat{H}_0$ и $\hat{H}_{10}$ мы называем резонансной [11]. Это алгебра с квадратичными коммутационными соотношениями (раздел 2.3). Дважды усредненный гамильтониан $\hat{H}_{200}$ явно выражается через образующие этой алгебры (разделе 2.4). Поскольку в редуцированной спектральной задаче спектр гамильтониана $\hat{H}_{200}$ вычисляется лишь на совместных собственных подпространствах операторов $\hat{H}_0$ и $\hat{H}_{10}$, то гамильтониан $\hat{H}_{200}$ далее рассматривается только в неприводимой компоненте представления резонансной алгебры (раздел 2.5).

В параграфе 3 исследуется классическая версия резонансной алгебры. Здесь приводятся скобки Пуассона между классическими симметриями функций Гамильтона H_0 и H_{10} (раздел 3.1) и описываются симплектические листы этой пуассоновой алгебры (раздел 3.2), на которых вводится классическая кэлерова структура.

Затем рассматривается квантовая версия резонансной алгебры. Для нее строятся неприводимые представления двух типов: в параграфе 4 – антиголоморфные (т.е. голоморфные по $\bar{z} \in \mathbb{C}$) представления на комплексной плоскости, а в параграфе 5 – представления над кривой в симплектическом листе.

Более подробно, в параграфе 4 описывается гильбертово пространство неприводимого антиголоморфного представления (раздел 4.1) и приводятся формулы для операторов этого представления (раздел 4.2). Голоморфные когерентные состояния резонансной алгебры сначала строятся в абстрактном гильбертовом пространстве (раздел 4.3), а затем вычисляются в исходной реализации резонансной алгебры в $L^2(\mathbb{R}^3)$ (раздел 4.4). Далее, рассматривается скалярное произведение пары когерентных (раздел 4.5). Оно является воспроизводящим ядром единичного оператора в подпространстве неприводимого антиголоморфного представления. С помощью когерентных состояний определяется когерентное преобразование, сплетающее произвольное представление резонансной алгебры в абстрактном гильбертовом пространстве с неприводимым антиголоморфным представлением (раздел 4.6). Метод построения неприводимых антиголоморфных представлений и голоморфных когерентных состояний подробно изложен в [13]. В работе [14] с помощью этого метода строятся неприводимые представления и когерентные состояния алгебр для многочастотного (в том числе, трехчастотного) резонанса.

В параграфе 5 для квантованной кривой Λ в симплектическом листе определяются Λ -когерентные состояния и амплитуда перехода (раздел 5.1). Следуя [15, 16],

с помощью амплитуды перехода мы вводим гильбертово пространство функций над кривой Λ (раздел 5.2), и на этом пространстве строим дифференциальные операторы неприводимого представления над Λ (раздел 5.3).

В параграфе 6 сначала (раздел 6.1) описывается общая процедура когерентного преобразования спектральной задачи, с помощью которой задача может быть переформулирована в терминах дифференциального уравнения либо в голоморфной карте на симплектическом листе, либо глобально на кривой в симплектическом листе. А затем эта процедура применяется к усредненной спектральной задаче для электрона в плоской ловушке Пеннинга. В результате эта задача переписывается в виде дифференциального уравнения второго порядка в пространстве антиголоморфных функций (раздел 6.2). Решения исходной спектральной задачи выражаются через решения этого дифференциального уравнения.

В параграфе 7 к спектральной задаче, записанной в представлении на кривой в симплектическом листе, применяется квазиклассическое приближение (см. подробное описание этой процедуры в [11]). Сначала демонстрируется геометрический смысл образующих резонансной алгебры и дважды усредненного гамильтониана, записанных в представлении на кривой (раздел 7.1). Затем выбирается кривая (раздел 7.2). Она должна быть подчинена некоторому условию квантования. В результате в квазиклассическом приближении спектральная задача в представлении над кривой переписывается в виде элементарного дифференциального уравнения первого порядка (раздел 7.3). Решения исходной спектральной задачи выражаются через решения этого уравнения.

1 Описание резонансной ловушки Пеннинга

1.1 Электромагнитное поле ловушки

В рассматриваемой модели планарной ловушки Пеннинга электрическое поле создается тремя concentрическими электродами, лежащими в одной плоскости, а именно: кругом с радиусом ρ_1 , на котором поддерживается потенциал 0, кольцом с радиусами $\rho_1 < \rho_2$, к которому приложен постоянный потенциал W , а также внешностью кольца, где поддерживается потенциал 0. Обозначим через (q_1, q_2) координаты в этой плоскости с началом в центре кругового электрода, $r \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{q_1^2 + q_2^2}$, а через q_3 обозначим координату в направлении, перпендикулярном плоскости. Обезразмерим эти координаты так:

$$x \stackrel{\text{def}}{=} \frac{q_1}{\rho_1}, \quad y \stackrel{\text{def}}{=} \frac{q_2}{\rho_1}, \quad \rho \stackrel{\text{def}}{=} \frac{r}{\rho_1}, \quad z = \frac{q_3}{\rho_1}.$$

Будем рассматривать случай, когда внешний радиус кольцевого электрода много больше внутреннего радиуса:

$$\delta \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\rho_1}{\rho_2} \leq 1.$$

В полупространстве $q_3 \geq 0$ потенциал V , создаваемый электродами, имеет стационарную точку с координатой

$$z^0 \stackrel{\text{def}}{=} \delta^{-1/3}(1 + \delta^{2/3})^{-1/2} = \delta^{-1/3} \left(1 - \frac{1}{2}\delta^{2/3} + O(\delta^{4/3}) \right).$$

В окрестности этой точки потенциальная энергия (с учетом отрицательности заряда электрона) имеет разложение:

$$-eV = cV_0 \cdot u, \quad u = \text{const} + \frac{\omega_0^2}{2}u^{[2]} + \varepsilon\beta u^{[3]} + \varepsilon^2\gamma u^{[4]} + \dots,$$

где V_0 – это некоторая калибровка напряжения, которую мы фиксируем ниже, а $u^{[j]}$ – однородные полиномы j -ой степени от координат ρ, z :

$$\begin{aligned} u^{[2]} &= (z - z^0)^2 - \frac{1}{2}\rho^2, & u^{[3]} &= (z - z^0) \left[(z - z^0)^2 - \frac{3}{2}\rho^2 \right], \\ u^{[4]} &= (z - z^0)^4 - 3(z - z^0)^2\rho^2 + \frac{3}{8}\rho^4. \end{aligned}$$

Формулы для коэффициентов имеют следующий вид (см. подробнее в [11]):

$$\begin{aligned} \omega_0^2 &= 3\frac{W}{V_0}\delta^{4/3}\left(1 - \frac{1}{2}\delta^{2/3} + O(\delta^{4/3})\right), & \beta &= -2\frac{W}{V_0}\delta^{5/3}(1 + O(\delta^{2/3})), \\ \gamma &= \frac{5}{2}\frac{W}{V_0}\delta^2(1 + O(\delta^{2/3})). \end{aligned}$$

Помимо электрического потенциала, в ловушке имеется однородное магнитное поле $\mathcal{B}$, которое отклонено на малый угол ε от оси (от перпендикуляра к плоскости электродов). Предположим, что магнитное поле направлено в сторону от стационарной точки электрического потенциала к плоскости электродов.

Введем теперь калибровку напряжения, которая задается удельной энергией магнитного поля, удерживающего заряженную частицу в объеме ловушки: $V_0 = \frac{e|\mathcal{B}|^2\rho_1^2}{mc^2}$. Здесь m и e – масса и величина заряда частицы (электрона), c – скорость света. Введем также магнитную длину $\rho_0 = \sqrt{\frac{\hbar c}{e|\mathcal{B}|}}$ и определим эффективную постоянную Планка $\hbar = (\rho_0/\rho_1)^2$.

В единицах энергии eV_0 полный гамильтониан модели имеет вид

$$\hat{H} = (\hat{p} - \mathcal{A})^2/2 + u.$$

Здесь $\mathcal{A}$ – эффективный магнитный потенциал, связанный с магнитным полем так: $(\nabla \times \mathcal{A}) = \mathcal{B}/|\mathcal{B}|$, а $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ – это эффективный квантовый импульс, и операция $\nabla = (\nabla_x, \nabla_y, \nabla_z)$ берется в безразмерных координатах (x, y, z) .

Эффективное (безразмерное) магнитное поле задано единичным вектором $\mathcal{B}/|\mathcal{B}|$, который имеет три компоненты: $\mathcal{B}/|\mathcal{B}| = (\sin \varepsilon, 0, \cos \varepsilon)$ в предположении, что координатная ось x направлена вдоль проекции магнитного поля на плоскость электродов. Пренебрегая малыми членами по ε , получим: $\mathcal{B}/|\mathcal{B}| = b + \varepsilon\tilde{b} + O(\varepsilon^3)$, где $b = (0, 0, \omega)$, $\tilde{b} = (1, 0, 1/4)$ и $\omega = 1 - \varepsilon/4 - \varepsilon^2/2$. Таким образом, эффективное магнитное поле в виде “главной части” b , направленной вдоль оси ловушки, и малого возмущения $\varepsilon\tilde{b}$, у которого осевая и продольная компоненты соотносятся как 1:4. Это специально подобранное нарушение коммутативности аксиальной симметрии ловушки.

Величина ω представляет частоту вращения в (x, y) – плоскости. Кроме этого, в квадратичной части потенциала u имеется частота ω_0 колебаний в направлении оси z . Как известно [5], соотношение $\omega > \sqrt{2}\omega_0$ гарантирует ловушечный режим (ограниченность траекторий частицы).

1.2 Условие резонанса

Чтобы обеспечить не только ограниченность, но и периодичность траекторий, наложим на частоты более сильное резонансное условие:

$$\omega = \frac{3}{2}\omega_0.$$

В силу представленных выше явных формул для частот ω и ω_0 условие резонанса выглядит так:

$$\frac{4}{9}\left(1 - \frac{\varepsilon}{4} - \frac{\varepsilon^2}{2}\right)^2 = 3\frac{W}{V_0}\delta^{4/3}\left(1 - \frac{1}{2}\delta^{2/3} + O(\delta^{4/3})\right).$$

Предположим, что геометрические параметры ловушки по масштабу малости соотносятся между собой следующим образом:

$$\delta^{1/3} = k\varepsilon, \quad k \sim 1. \quad (1.1)$$

Тогда условие резонанса можно, с точностью $O(\varepsilon^3)$, представить так:

$$\frac{W}{V_0} = \frac{4}{27\delta^{4/3}}\left(1 - \frac{1}{2}\varepsilon + \frac{1}{2}\left(\delta^{2/3} - \frac{15}{8}\varepsilon^2\right)\right). \quad (1.2)$$

Это соотношение комбинированного резонанса связывает между собой потенциал W кольцевого электрода ловушки, величину магнитного поля (определяющую напряжение V_0), угол ε отклонения магнитного поля от оси ловушки, и отношение радиусов кольцевого электрода $\delta = \rho_1/\rho_2$.

При условии комбинированного резонанса (1.2) коэффициенты разложения эффективного потенциала u по степеням малого параметра ε задаются формулами:

$$\omega_0 = \frac{2}{3}\left(1 - \frac{\varepsilon}{4} - \frac{\varepsilon^2}{2}\right), \quad \beta = -\frac{8k}{27} + O(\varepsilon), \quad \gamma = \frac{10k^2}{27}.$$

1.3 Гамильтониан электрона в резонансной ловушке

Эффективный гамильтониан, описывающий движение электрона в планарной квантовой ловушке Пеннинга, запишется в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon\hat{H}_1 + \varepsilon^2\hat{H}_2 + O(\varepsilon^3), \quad (1.3)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \frac{1}{2}\left[\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 - \frac{3}{2}\omega_0(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) + \omega_0^2(z - z^0)^2 + \frac{1}{16}\omega_0^2(x^2 + y^2)\right], \\ \hat{H}_1 &= \frac{1}{8}\left[y\hat{p}_x + (4(z - z^0) - x)\hat{p}_y - 4y\hat{p}_z - 3\omega_0(z - z^0)x + \frac{3}{4}\omega_0(x^2 + y^2)\right] \\ &\quad + \beta(z - z^0)\left[(z - z^0)^2 - \frac{3}{2}(x^2 + y^2)\right], \\ \hat{H}_2 &= \frac{1}{128}\left[17y^2 + (x - 4(z - z^0))^2\right] + \gamma\left[(z - z^0)^4 - 3(z - z^0)^2(x^2 + y^2) + \frac{3}{8}(x^2 + y^2)^2\right]. \end{aligned}$$

С помощью линейной замены

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\frac{2}{\omega_0}}(x_+ + x_-), & y &= \sqrt{\frac{2}{\omega_0}}(\hat{p}_+ - \hat{p}_-), & z &= \frac{x_0}{\sqrt{\omega_0}} + z^0, \\ \hat{p}_x &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\omega_0}{2}}(\hat{p}_+ + \hat{p}_-), & \hat{p}_y &= -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\omega_0}{2}}(x_+ - x_-), & \hat{p}_z &= \sqrt{\omega_0}\hat{p}_0 \end{aligned}$$

главную часть $\hat{H}_0$ этого гамильтониана можно привести к нормальной форме

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{4}\omega_0(2(\hat{p}_+^2 + x_+^2) - (\hat{p}_-^2 + x_-^2) + 2(\hat{p}_0^2 + x_0^2))$$

с гиперболическим резонансом $2 : (-1) : 2$ между частотами.

1.4 Спектральная задача

Рассмотрим в пространстве $L^2(\mathbb{R}^3)$ задачу на собственные значения для возмущенного гамильтониана (1.3):

$$(\hat{H}_0 + \varepsilon\hat{H}_1 + \varepsilon^2\hat{H}_2)\Psi = E\Psi, \quad \Psi \in L^2(\mathbb{R}^3). \quad (1.4)$$

Здесь отброшены малые члены порядка ε^3 . Для решения этой задачи мы дважды применим операторное усреднение, а затем усредненную задачу упростим с помощью когерентного преобразования.

2 Редукция спектральной задачи и резонансная алгебра

2.1 Первое усреднение спектральной задачи

Введем операторы комплексной структуры

$$\hat{\xi}_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_j + i\hat{p}_j), \quad j \in \{+, -, 0\},$$

и сопряженные к ним в $L^2(\mathbb{R}^3)$ операторы $\hat{\xi}_j^*$, а также определим операторы действие

$$\hat{S}_\pm = \hat{\xi}_\pm^* \hat{\xi}_\pm, \quad \hat{S}_3 = \hat{\xi}_0^* \hat{\xi}_0, \quad \hat{S}_0 = 2\hat{S}_+ - \hat{S}_- + 2\hat{S}_3,$$

у которых спектр состоит из чисел кратных h . Тогда

$$\hat{H}_0 = \frac{\omega_0}{2}(\hat{S}_0 + \frac{3h}{2}),$$

причем $\text{Spec}(\hat{S}_0) = \{hn \mid n \in \mathbb{Z}\}$. Поскольку группа $\exp\{-it\hat{S}_0/h\}$ периодична, то, при условии $\varepsilon \ll 1$, применяя процедуру квантового усреднения

$$U^{-1}\hat{H}U = \hat{H}_0 + \varepsilon\hat{H}_{10} + \varepsilon^2\hat{H}_{20} + O(\varepsilon^3),$$

можно перейти к новым возмущающим операторам $\hat{H}_{10}$ и $\hat{H}_{20}$, которые коммутируют со старшей частью:

$$[\hat{H}_0, \hat{H}_{10}] = [\hat{H}_0, \hat{H}_{20}] = 0.$$

Здесь U – унитарный деусредняющий оператор:

$$U = \exp\left\{-\frac{i\varepsilon}{h}(\hat{H}_1^\# + \varepsilon\hat{H}_2^\#)\right\}, \quad (2.1)$$

где

$$\hat{H}_j^\# = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (\pi - t) \exp\left\{-\frac{it\hat{S}_0}{h}\right\} \hat{H}_j \exp\left\{\frac{it\hat{S}_0}{h}\right\} dt, \quad j = 1, 2.$$

При дополнительном предположении $\varepsilon = O(h)$ он принимает более простую форму:

$$U = \exp\left\{-\frac{i\varepsilon}{h}\hat{H}_1^\#\right\} + O(\varepsilon).$$

В результате спектральная задача (1.4) запишется в виде системы

$$\begin{cases} \hat{H}_0 \tilde{\Psi} = \frac{h\omega_0}{2}(n + \frac{3}{2})\tilde{\Psi}, \\ (\hat{H}_{10} + \varepsilon^2 \hat{H}_{20}) \tilde{\Psi} = (E - \frac{h\omega_0}{2}(n + \frac{3}{2}))\tilde{\Psi} \end{cases}$$

для двух коммутирующих гамильтонианов $\hat{H}_0$ и $\hat{H}_{10} + \varepsilon\hat{H}_{20}$. Собственные функции спектральной задачи (1.4) связаны с собственными функциями усредненной спектральной задачи с помощью деусредняющего оператора U :

$$\Psi = U\tilde{\Psi} + O(\varepsilon).$$

Подробные вычисления приведены в [8]. Гамильтониан $\hat{H}_{10}$ можно записать в виде линейной комбинации

$$\hat{H}_{10} = \frac{1}{4} \left(4\hat{A}_+ - 2\hat{A}_- + \hat{A}_0 + \frac{3h}{2} \right) \quad (2.2)$$

следующих трех коммутирующих операторов, спектр которых состоит из чисел, кратных h :

$$\begin{aligned} \hat{A}_0 &= \hat{S}_-, & \hat{A}_+ &= \frac{1}{3}[2\hat{S}_+ + \hat{S}_3 - \sqrt{2}(\hat{A}_\rho + \hat{A}_\rho^*)], \\ \hat{A}_- &= \frac{1}{3}[\hat{S}_+ + 2\hat{S}_3 + \sqrt{2}(\hat{A}_\rho + \hat{A}_\rho^*)]. \end{aligned} \quad (2.3)$$

В этих формулах участвует один из трех генераторов

$$\hat{A}_\rho = \hat{\xi}_+^* \hat{\xi}_0, \quad \hat{A}_\sigma = \hat{\xi}_+^* (\hat{\xi}_-^*)^2, \quad \hat{A}_\theta = (\hat{\xi}_-^*)^2 \hat{\xi}_0^*$$

алгебры симметрий оператора $\hat{H}_0$.

2.2 Второе усреднение спектральной задачи

В гамильтониане (2.2) мы получаем новый (вторичный) резонанс $4 : (-2) : 1$, который обеспечивается выбранной выше пропорцией $1 : 4$ между осевой и продольной компонентами добавки порядка ε в магнитном поле. Благодаря этому резонансу удается еще раз применить процедуру усреднения, теперь к гамильтониану $\hat{H}_{10} + \varepsilon \hat{H}_{20}$.

На n -ом собственном подпространстве, где $\hat{H}_0$ принимает значение $\frac{h\omega_0}{2}(n + \frac{3}{2})$, спектр старшей части $\hat{H}_{10}$ усредненного гамильтониана состоит из чисел

$$\frac{h}{4}(6m - n + \frac{3}{2}), \quad m \in \mathbb{Z}_+.$$

Каждое собственное значение бесконечно вырождено.

С помощью унитарного оператора

$$\tilde{U} = \exp\left\{-\frac{i\varepsilon}{h} \sharp \hat{H}_{20}\right\}, \quad (2.4)$$

где

$$\sharp \hat{H}_{20} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (\pi - t) \exp\left\{-\frac{2it}{3h} \hat{H}_{10}\right\} \hat{H}_{20} \exp\left\{\frac{2it}{3h} \hat{H}_{10}\right\} dt,$$

гамильтониан $\hat{H}_{10} + \varepsilon \hat{H}_{20}$ приводится к виду

$$\tilde{U}^{-1}(\hat{H}_{10} + \varepsilon \hat{H}_{20})\tilde{U} = \hat{H}_{10} + \varepsilon \hat{H}_{200} + O(\varepsilon^2), \quad \text{где } [\hat{H}_{10}, \hat{H}_{200}] = 0.$$

И мы приходим к спектральной задаче

$$\begin{cases} \hat{H}_0 \Phi = \frac{h\omega_0}{2}(n + \frac{3}{2})\Phi, \\ \hat{H}_{10} \Phi = \frac{h}{4}(6m - n + \frac{3}{2})\Phi, \\ \hat{H}_{200} \Phi = \lambda \Phi \end{cases} \quad (2.5)$$

для трех попарно коммутирующих гамильтонианов.

Таким образом, решение исходной спектральной задачи (1.4) сводится к решению спектральной задачи для дважды усредненного гамильтониана $\hat{H}_{200}$ на совместных собственных подпространствах операторов $\hat{H}_0$ и $\hat{H}_{10}$. Решения задач (1.4) и (2.5) связаны по формулам

$$E = \frac{h\omega_0}{2}(n + \frac{3}{2}) + \frac{\varepsilon h}{4}(6m - n + \frac{3}{2}) + \varepsilon^2 \lambda + O(\varepsilon^3), \quad \Psi = U\tilde{U}\Phi + O(\varepsilon). \quad (2.6)$$

Здесь $\lambda = \lambda_k^{(n,m)}$, $\Phi = \Phi_k^{(n,m)}$ нумеруются квантовыми числами n , m и дополнительным числом k .

2.3 Резонансная алгебра

Дважды усредненный гамильтониан $\hat{H}_{200}$ можно записать в виде функции от образующих алгебры совместных симметрий $\hat{H}_0$ и $\hat{H}_{10}$.

Теорема 2.1. Алгебра совместных симметрий $\hat{H}_0$ и $\hat{H}_{10}$ задается операторами $\hat{A}_0$, $\hat{A}_+$, $\hat{A}_-$, определенными в (2.3), и операторами

$$\hat{B} = \sqrt{\frac{2}{3}}(\hat{A}_\sigma + \sqrt{2}\hat{A}_\theta), \quad \hat{C} = \hat{B}^*. \quad (2.7)$$

Коммутационные соотношения между образующими (2.3), (2.7) имеют вид

$$\begin{aligned} [\hat{A}_0, \hat{A}_\pm] &= [\hat{A}_+, \hat{A}_-] = 0, \\ [\hat{A}_0, \hat{B}] &= 2h\hat{B}, \quad [\hat{A}_+, \hat{B}] = 0, \quad [\hat{A}_-, \hat{B}] = h\hat{B}, \\ [\hat{C}, \hat{B}] &= 2h(\hat{A}_0^2 + 4\hat{A}_0\hat{A}_- + 3h\hat{A}_0 + 2h\hat{A}_- + 2h^2), \end{aligned} \quad (2.8)$$

и плюс сопряженные соотношения. В этой алгебре имеются три элемента Казимира:

$$\hat{D} = 2\hat{A}_- - \hat{A}_0, \quad \hat{S}_1 = \hat{A}_+, \quad \hat{K} = \hat{B}\hat{C} - 2\hat{A}_0(\hat{A}_0 - h)\hat{A}_-.$$

В реализации (2.3), (2.7) элементы Казимира задаются операторами

$$\hat{D} = \frac{4}{3\omega_0}\hat{H}_0 - \frac{4}{3}\hat{H}_{10} - \frac{h}{2}, \quad \hat{S}_1 = \frac{1}{3\omega_0}\hat{H}_0 + \frac{2}{3}\hat{H}_{10} - \frac{h}{2}, \quad \hat{K} = 0.$$

2.4 Выражение дважды усредненного гамильтониана через образующие резонансной алгебры

Теорема 2.2. *Дважды усредненный гамильтониан $\hat{H}_{200}$ является квадратичной функцией*

$$\hat{H}_{200} = s \left(a\hat{A}_0^2 + \hat{b}\hat{A}_0 + \hat{c} - \frac{1}{2}(\hat{B} + \hat{C}) \right) \quad (2.9)$$

от образующих (2.3), (2.7) алгебры бисимметрий (2.8). Здесь мы обозначили

$$\begin{aligned} s &= \frac{4\sqrt{2}\beta}{\sqrt{3}\omega_0^{5/2}} = -\frac{8}{3}k, \quad a = \frac{298\omega_0^2\gamma - 881\beta^2}{48\omega_0^4s} \simeq \frac{1289}{1152}k, \\ \hat{b} &= \frac{1}{216\omega_0^4s} [1260(2\omega_0^2\gamma - 7\beta^2)\hat{S}_1 + 9(10\omega_0^2\gamma - 17\beta^2)\hat{S}_0 - 360\omega_0^3 - \\ &\quad - 18\omega_0^2\gamma(13 - 152h) + 9\beta^2(85 - 956h)] \simeq \\ &\simeq \frac{1}{576} [1820k\hat{S}_1 - 7k\hat{S}_0 + 540/k - 145k + 1896hk], \\ \hat{c} &= \frac{1}{432\omega_0^4s} [36(26\omega_0^2\gamma - 85\beta^2)\hat{S}_1^2 - 72(2\omega_0^2\gamma - 7\beta^2)\hat{S}_1\hat{S}_0 + 9(10\omega_0^2\gamma - 17\beta^2)\hat{S}_0^2 - \\ &\quad - (684\omega_0^3 - 72\omega_0^2\gamma(26 + 45h) + 36\beta^2(170 + 309h))\hat{S}_1 + \\ &\quad + (36\omega_0^3 - 36\omega_0^2\gamma(13 - 8h) + 90\beta^2(17 - 4h))\hat{S}_0 - \\ &\quad - 18h(36\omega_0^3 - 162h\omega_0^2\gamma + 537h\beta^2)] \simeq \\ &\simeq -\frac{1}{1152} \left[-580k\hat{S}_1^2 + 104k\hat{S}_1\hat{S}_0 + 7k\hat{S}_0^2 - (1026/k + 1160k + 2244hk)\hat{S}_1 + \right. \\ &\quad \left. + (54/k + 290k + 80hk)\hat{S}_0 - (972h/k + 1866h^2k) \right], \end{aligned} \quad (2.10)$$

где k – это отношение геометрических параметров ловушки (1.1). Операторы действия $\hat{S}_0$ и $\hat{S}_1$ коммутируют со всеми образующими алгебры и их спектр состоит из чисел, кратных h : $\text{Spec } \hat{S}_0 = \{hn \mid n \in \mathbb{Z}\}$, $\text{Spec } \hat{S}_1 = \{ht \mid t \in \mathbb{Z}\}$.

2.5 Неприводимые представления резонансной алгебры на подпространстве $\mathcal{L}[n, m] \subset L^2(\mathbb{R}^3)$

Таким образом, модель планарной резонансной ловушки Пеннинга сведена к гамильтониану

$$a\hat{A}_0^2 + b\hat{A}_0 - \frac{1}{2}(\hat{B} + \hat{C}) \quad (2.11)$$

с известными числовыми коэффициентами a, b над алгеброй

$$\begin{aligned} [\hat{A}_0, \hat{A}_-] &= 0, & [\hat{A}_0, \hat{B}] &= 2h\hat{B}, & [\hat{A}_-, \hat{B}] &= h\hat{B}, \\ [\hat{C}, \hat{B}] &= 2h(\hat{A}_0^2 + 4\hat{A}_0\hat{A}_- + 3h\hat{A}_0 + 2h\hat{A}_- + 2h^2) \end{aligned} \quad (2.12)$$

с условиями эрмитовости

$$\hat{A}_0^* = \hat{A}_0, \quad \hat{A}_-^* = \hat{A}_-, \quad \hat{B}^* = \hat{C} \quad (2.13)$$

и с элементами Казимира $\hat{D} = 2\hat{A}_- - \hat{A}_0$ и $\hat{K} = \hat{B}\hat{C} - 2\hat{A}_0(\hat{A}_0 - h)\hat{A}_-$. При этом гамильтониан (2.11) рассматривается только в неприводимом представлении этой алгебры на собственном подпространстве $\mathcal{L}[n, m] \subset L^2(\mathbb{R}^3)$, где оператор $\hat{D} = \hat{S}_0 - 2\hat{S}_1$ принимает значение $d = h(n - 2m)$, а элемент $\hat{K}$ равен 0.

3 Пуассонова резонансная алгебра

3.1 Классическая версия резонансной алгебры

На фазовом пространстве $\mathbb{R}_{(x,p)}^6$ с координатами $x = (x_+, x_-, x_0)$, $p = (p_+, p_-, p_0)$ рассмотрим функции

$$\begin{aligned} S_0 &= 2|\xi_+|^2 - |\xi_-|^2 + 2|\xi_0|^2, & S_1 &= \frac{1}{3}[2|\xi_+|^2 + |\xi_0|^2 - \sqrt{2}(\bar{\xi}_+\xi_0 + \xi_+\bar{\xi}_0)], \\ A_0 &= |\xi_-|^2, & A_- &= \frac{1}{3}[|\xi_+|^2 + 2|\xi_0|^2 + \sqrt{2}(\bar{\xi}_+\xi_0 + \xi_+\bar{\xi}_0)], \\ B &= \sqrt{\frac{2}{3}}(\bar{\xi}_-)^2(\bar{\xi}_+ + \sqrt{2}\bar{\xi}_0), & C &= \bar{B}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

где

$$\xi_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_j + ip_j), \quad j \in \{+, -, 0\}.$$

Функции (3.1) – это символы операторов “действие” $\hat{S}_0 = S_0(\hat{\xi}^1, \hat{\xi}^2)$, $\hat{S}_1 = S_1(\hat{\xi}^1, \hat{\xi}^2)$ и образующих $\hat{A}_0 = A_0(\hat{\xi}^1, \hat{\xi}^2)$, $\hat{A}_- = A_-(\hat{\xi}^1, \hat{\xi}^2)$, $\hat{B} = B(\hat{\xi}^1, \hat{\xi}^2)$, $\hat{C} = \hat{B}^*$ резонансной алгебры (2.12).

Поскольку операторы “действие” $\hat{S}_0$ и $\hat{S}_1$ коммутируют друг с другом и с операторами (2.3), (2.7), то соответствующие символы находятся в инволюции:

$$\begin{aligned} \{S_0, S_1\} &= 0, \\ \{S_0, A_0\} &= \{S_0, A_-\} = \{S_0, B\} = \{S_0, C\} = 0, \\ \{S_1, A_0\} &= \{S_1, A_-\} = \{S_1, B\} = \{S_1, C\} = 0, \end{aligned}$$

т.е. A_0, A_-, B, C являются совместными симметриями двух действий S_0 и S_1 . Переходя в (2.12) к квазиклассическому пределу (при $\hbar \rightarrow 0$), вместо коммутационных соотношений для операторов, получим скобки Пуассона их символов.

Теорема 3.1. *Скобки Пуассона между образующими алгебры совместных симметрий действий S_0 и S_1 имеют вид*

$$\{A_0, A_-\} = 0, \quad \{A_0, B\} = 2iB, \quad \{A_-, B\} = iB, \quad \{C, B\} = 2iA_0(A_0 + 4A_-). \quad (3.2)$$

3.2 Симплектические листы

Теорема 3.2. *Симплектические листы Ω алгебры (3.2) лежат на поверхностях уровня двух функций Казимира:*

$$D = 2A_- - A_0, \quad K = BC - 2A_0^2 A_-.$$

В реализации (3.1) вторая функция Казимира равна нулю:

$$K = 0,$$

и выполнены неравенства

$$A_0 > 0, \quad A_0 + D \geq 0.$$

Замыкание листа задается формулой

$$\bar{\Omega} = \{\mathcal{Y}_1^2 + \mathcal{Y}_2^2 = A_0^2(A_0 + d), 2A_- = A_0 + d, A_0 > 0, A_0 \geq -d\}. \quad (3.3)$$

Здесь введены обозначения $B = \mathcal{Y}_1 + i\mathcal{Y}_2, C = \mathcal{Y}_1 - i\mathcal{Y}_2; d \in \mathbb{R}$ – параметр, нумерующий листы.

Если $d < 0$, то лист Ω диффеоморфен двумерной плоскости.

Если $d \geq 0$, то двумерный лист Ω диффеоморфен цилиндру и получается из замыкания (3.3) путем выкидывания точки

$$(A_0, A_-, B, C) = (0, \frac{d}{2}, 0, 0).$$

(В общем случае существуют и другие симплектические листы алгебры (3.2). Но в реализации (3.1) они отсекаются неравенством $A_0 > 0$.)

Далее, для определенности, мы остановимся на случае $d < 0$.

На листах Ω введем следующую комплексную координату:

$$z = \frac{C}{A_0}. \quad (3.4)$$

Образующие $A_0|_\Omega, A_-|_\Omega, B|_\Omega, C|_\Omega$ выражаются через $z, \bar{z}$ по формулам:

$$A_0 = |z|^2 - d, \quad A_- = \frac{|z|^2}{2}, \quad B = \bar{z}(|z|^2 - d), \quad C = z(|z|^2 - d). \quad (3.5)$$

Симплектическая структура на листах Ω , соответствующая пуассоновой алгебре (3.2), имеет вид

$$\omega_0 = \frac{i}{2} d\bar{z} \wedge dz = \partial_{\bar{z}} \theta_0, \quad \theta_0 = \frac{i}{2} \bar{z} dz. \quad (3.6)$$

Кэлеров потенциал равен

$$F_0 = \frac{|z|^2}{2}.$$

4 Неприводимые антиголоморфные представления квантовой резонансной алгебры

4.1 Гильбертово пространство

Пусть n, m – целые, причем

$$m \geq 0, \quad 2m > n. \quad (4.1)$$

Обозначим $\Delta_{n,m} \stackrel{\text{def}}{=} m - \left[\frac{n}{2}\right]$. Тогда $\Delta_{n,m} \geq 1$.

Рассмотрим функцию

$$\ell_{n,m}(r) = \frac{\Gamma(\Delta_{n,m} + \frac{1}{2})}{2\Gamma(\Delta_{n,m} + \frac{1}{2} + \frac{(-1)^n}{2})} e^{-\frac{r}{2h}} \left(\frac{r}{2h}\right)^{\Delta_{n,m} - \frac{1}{2} + \frac{(-1)^n}{2}} \Psi\left(\Delta_{n,m} - \frac{1}{2}, \Delta_{n,m} + \frac{1 + (-1)^n}{2}; \frac{r}{2h}\right). \quad (4.2)$$

где функция

$$\Psi(a, c; x) = \frac{1}{\Gamma(a)} \int_0^\infty e^{-xt} t^{a-1} (1+t)^{c-a-1} dt \quad (\operatorname{Re} a > 0)$$

– это решение вырожденного гипергеометрического уравнения $xy''(x) + (c-x)y'(x) - ay = 0$ в полуплоскости $\operatorname{Re} x > 0$ [17]. Поэтому функция $\ell_{n,m}(r)$ является решением следующей задачи для вырожденного гипергеометрического уравнения:

$$2hr\ell''(r) + \left[h\left(3 - (-1)^n - 2\Delta_{n,m}\right) + r\right]\ell'(r) + \left(\frac{3}{2} - \Delta_{n,m}\right)\ell(r) = 0, \\ \int_0^\infty \ell(r) dr = h, \quad \ell(r) > 0.$$

В зависимости от значений параметров n, m при $r \rightarrow 0$ эта функция либо регулярна, либо имеет логарифмическую особенность:

$$\ell_{n,m}(r) \rightarrow \begin{cases} \text{const}, & \text{если } n \text{ – четное или } \Delta_{n,m} > 1, \\ \text{const} \ln \frac{1}{r}, & \text{если } n \text{ – нечетное и } \Delta_{n,m} = 1. \end{cases}$$

На бесконечности (при $r \rightarrow \infty$) она экспоненциально убывает:

$$\ell(r) \rightarrow \text{const } r^{-\frac{(-1)^n}{2}} e^{-\frac{r}{2h}}.$$

Обозначим через $\mathcal{P}[n, m]$ пространство антиголоморфных рядов

$$\psi(\bar{z}) = \sum_{j=0}^{\infty} \psi_j \bar{z}^j \quad (z \in \mathbb{C})$$

со скалярным произведением

$$\langle \varphi, \psi \rangle_{n,m} = \int_{\mathbb{C}} \varphi(\bar{z}) \overline{\psi(\bar{z})} d\mu_{n,m}(z, \bar{z}), \quad d\mu_{n,m}(z, \bar{z}) = \frac{1}{2\pi h} \ell_{n,m}(|z|^2) dz d\bar{z}. \quad (4.3)$$

В пространстве $\mathcal{P}[n, m]$ существует ортонормированный базис, состоящий из следующих мономов:

$$\rho_k^{n,m}(\bar{z}) = \gamma_k^{n,m} \bar{z}^k, \quad \text{где } \gamma_k^{n,m} = \sqrt{\frac{(\Delta_{n,m} + \frac{1}{2})_k}{k! (\Delta_{n,m} + \frac{1+(-1)^n}{2})_k (2h)^k}}, \quad k \in \mathbb{Z}_+. \quad (4.4)$$

4.2 Неприводимые представления

Теорема 4.1. Пусть n, m – целые, причем выполнены условия (4.1). Тогда операторы второго порядка в пространстве $\mathcal{P}[n, m]$

$$\begin{aligned}\overset{\circ}{A}_0 &= h\left(2m - n + 2\bar{z}\frac{d}{d\bar{z}}\right), \\ \overset{\circ}{A}_- &= h\bar{z}\frac{d}{d\bar{z}} \\ \overset{\circ}{B} &= 2h\bar{z}\left(m - \left[\frac{n}{2}\right] + \frac{1}{2} + \bar{z}\frac{d}{d\bar{z}}\right), \\ \overset{\circ}{C} &= 4h^2\left(m - \left[\frac{n+1}{2}\right] + 1 + \bar{z}\frac{d}{d\bar{z}}\right)\frac{d}{d\bar{z}}\end{aligned}\quad (4.5)$$

задают неприводимое эрмитово представление резонансной алгебры (2.12), (2.13). Это антиголоморфное представление соответствует симплектическому листу $\Omega = \Omega[n, m]$, диффеоморфному плоскости, с параметром

$$d = h(n - 2m) < 0.$$

4.3 Голоморфные когерентные состояния

Пусть выполнены условия (4.1). Пусть задано произвольное эрмитово представление $\mathbf{R} \stackrel{def}{=} (\mathbf{A}_0, \mathbf{A}_-, \mathbf{B}, \mathbf{C})$ соотношений (2.12), (2.13) в некотором гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$. Пусть $\chi_0^{n,m} \in \mathcal{H}$ – нормированный “вакуумный” вектор, удовлетворяющий условиям

$$\mathbf{C}\chi_0^{n,m} = 0, \quad \mathbf{A}_0\chi_0^{n,m} = h(2m - n)\chi_0^{n,m}, \quad \mathbf{A}_-\chi_0^{n,m} = 0. \quad (4.6)$$

Определим в $\mathcal{H}$ семейство векторов

$$\begin{aligned}\mathfrak{H}_z^{n,m} &= \Gamma\left(m - \left[\frac{n+1}{2}\right]\right)\left(\frac{\sqrt{z\mathbf{B}}}{2h}\right)^{\left[\frac{n+1}{2}\right]-m} I_{m-\left[\frac{n+1}{2}\right]}\left(\frac{\sqrt{z\mathbf{B}}}{h}\right)\chi_0^{n,m} = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(m - \left[\frac{n+1}{2}\right] + 1)}{k!\Gamma(k + m - \left[\frac{n+1}{2}\right] + 1)} \left(\frac{z\mathbf{B}}{4h^2}\right)^k \chi_0^{n,m},\end{aligned}\quad (4.7)$$

параметризованное комплексной переменной $z \in \mathbb{C}$. Здесь

$$I_\nu(y) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!\Gamma(k + \nu + 1)} \left(\frac{y}{2}\right)^{2k+\nu}$$

– функция Бесселя мнимого аргумента.

Обозначим через $\mathcal{H}[n, m] \subset \mathcal{H}$ подпространство в $\mathcal{H}$, на котором реализуется неприводимое представление с вакуумным вектором $\chi_0^{n,m}$. Тогда

$$\mathfrak{H}_z^{n,m} = \sum_{k=0}^{\infty} \overline{\rho_k^{n,m}(\bar{z})} \chi_k^{n,m}, \quad (4.8)$$

где $\{\rho_k^{n,m}\}$ – ортонормированный базис (4.4) в пространстве $\mathcal{P}[n, m]$ антиголоморфного представления (4.5), а векторы

$$\{\chi_k^{n,m}\} = \frac{\Gamma(m - \left[\frac{n+1}{2}\right] + 1)}{k! \gamma_k^{n,m} \Gamma(k + m - \left[\frac{n+1}{2}\right] + 1)} \left(\frac{\mathbf{B}}{4h^2}\right)^k \chi_0^{n,m}, \quad k \in \mathbb{Z}_+ \quad (4.9)$$

образуют ортонормированный базис в подпространстве $\mathcal{H}[n, m] \subset \mathcal{H}$ неприводимого представления алгебры (2.12), (2.13). Базис $\{\chi_k^{n,m}\}$ является собственным для коммутирующих операторов $\mathbf{A}_0$ и $\mathbf{A}_-$. Операторы $\mathbf{A}_0$ и $\mathbf{A}_-$ принимают в этом базисе следующие значения:

$$\mathbf{A}_0 \chi_k^{n,m} = h(2m - n + 2k) \chi_k^{n,m}, \quad \mathbf{A}_- \chi_k^{n,m} = hk \chi_k^{n,m}.$$

Теорема 4.2. Семейство векторов $\{\mathfrak{H}_z^{n,m} \mid z \in \mathbb{C}\}$ является полным в $\mathcal{H}[n, m]$, т.е. для любого $\Psi \in \mathcal{H}[n, m]$,

$$\Psi = \int_{\mathbb{C}} (\Psi, \mathfrak{H}_z^{n,m})_{\mathcal{H}} \mathfrak{H}_z^{n,m} d\mu_{n,m}(z, \bar{z}).$$

Таким образом, (4.7) является семейством когерентных состояний.

4.4 Голоморфные когерентные состояния в $L^2(\mathbb{R}^3)$

Рассмотрим теперь исходное представление $\mathbf{R} = \hat{R} = (\hat{A}_0, \hat{A}_-, \hat{B}, \hat{C})$ (2.3), (2.7) в гильбертовом пространстве $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$. Тогда базис $\{\chi_k^{n,m}\}$ (4.9), (4.6) имеет вид

$$\chi_k^{n,m}(x_+, x_-, x_0) = c_k^{n,m} (\sqrt{2}\hat{\xi}_+^* - \hat{\xi}_0^*)^m (\hat{\xi}_+^* + \sqrt{2}\hat{\xi}_0^*)^k (\hat{\xi}_-^*)^{2m-n+2k} \chi_0^{0,0}(x_+, x_-, x_0). \quad (4.10)$$

Здесь

$$\chi_0^{0,0}(x_+, x_-, x_0) = \frac{1}{(\pi h)^{3/4}} \exp \left\{ -\frac{x_+^2 + x_-^2 + x_0^2}{2h} \right\} \quad (4.11)$$

– нормированный вектор, который аннулируется операторами комплексной структуры $\hat{\xi}_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_j + i\hat{p}_j)$:

$$\hat{\xi}_j \chi_0^{0,0} = 0, \quad j \in \{+, -, 0\};$$

$c_k^{n,m}$ – нормировочная константа:

$$c_k^{n,m} = \frac{1}{\sqrt{3^{m+k} h^{3m+3k-n} (2m - n + 2k)! m! k!}}. \quad (4.12)$$

Формулы (4.8), (4.10) – (4.12) задают семейство когерентных состояний в $L^2(\mathbb{R}^3)$.

4.5 Воспроизводящее ядро

Вернемся к произвольному эрмитову представлению $\mathbf{R}$ алгебры (2.12), (2.13) в некотором абстрактном гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$. Скалярное произведение двух когерентных состояний (4.7) обозначим через

$$\mathcal{K}^{n,m}(z', \bar{z}'') \stackrel{\text{def}}{=} (\mathfrak{H}_{z'}^{n,m}, \mathfrak{H}_{z''}^{n,m})_{\mathcal{H}}. \quad (4.13)$$

Тогда из (4.8), (4.4) получим

$$\begin{aligned} \mathcal{K}^{n,m}(z', \bar{z}'') &= \sum_{k=0}^{\infty} \overline{\rho_k^{n,m}(z')} \rho_k^{n,m}(z'') = \sum_{k=0}^{\infty} \gamma_k^{n,m} (z' \bar{z}'')^k = \\ &= \Phi \left(\Delta_{n,m} + \frac{1}{2}, \Delta_{n,m} + \frac{1}{2} + \frac{(-1)^n}{2}; \frac{z' \bar{z}''}{2h} \right) \stackrel{\text{def}}{=} k^{n,m}(z' \bar{z}''). \end{aligned} \quad (4.14)$$

Здесь использованы обозначения из раздела 4.1; $\Phi(a, c; x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k}{k!(c)_k} x^k$ – вырожденный гипергеометрический ряд.

Ряд $k_{n,m}(r)$ является единственным решением следующей задачи для вырожденного гипергеометрического уравнения:

$$2hrk''(r) + \left[2h \left(\Delta_{n,m} + \frac{1}{2} + \frac{(-1)^n}{2} \right) - r \right] k'(r) - \left(\Delta_{n,m} + \frac{1}{2} \right) k(r) = 0, \quad k(0) = 1.$$

Теорема 4.3. Функция $\mathcal{K}^{n,m}(z', \bar{z}'')$ (4.14) является воспроизводящим ядром в подпространстве $\mathcal{P}[n, m]$ неприводимого антиголоморфного представления (4.5). Она удовлетворяет следующему воспроизводящему свойству:

$$\int \mathcal{K}^{n,m}(z', \bar{z}) \mathcal{K}^{n,m}(z', \bar{z}'') d\mu_{n,m}(z, \bar{z}) = \mathcal{K}^{n,m}(z', \bar{z}''), \quad (4.15)$$

где мера $d\mu_{n,m}(z, \bar{z})$ определена по формулам (4.3), (4.2). Таким образом, $\mathcal{K}^{n,m}$ является в $\mathcal{P}[n, m]$ ядром единичного оператора.

4.6 Когерентное преобразование пространства антиголоморфного представления

Лемма 4.1. Когерентные состояния $\mathfrak{H}_z^{n,m}$ (4.7) обладают следующим сплетающим свойством:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_0 \mathfrak{H}_z^{n,m} &= \bar{\mathbf{A}}_0 \mathfrak{H}_z^{n,m}, & \mathbf{A}_- \mathfrak{H}_z^{n,m} &= \bar{\mathbf{A}}_- \mathfrak{H}_z^{n,m}, \\ \mathbf{B} \mathfrak{H}_z^{n,m} &= \bar{\mathbf{C}} \mathfrak{H}_z^{n,m}, & \mathbf{C} \mathfrak{H}_z^{n,m} &= \bar{\mathbf{B}} \mathfrak{H}_z^{n,m}. \end{aligned}$$

Операторы $\bar{\mathbf{A}}_j$, $\bar{\mathbf{B}}$, $\bar{\mathbf{C}}$, стоящие в правых частях этих формул, получаются путем комплексного сопряжения операторов $\mathbf{A}_j$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$ (4.5), т.е. они действуют по переменной z .

Зададим отображение $\mathfrak{H} : \mathcal{P}[n, m] \rightarrow \mathcal{H}[n, m]$:

$$\mathfrak{H}(\varphi) \stackrel{\text{def}}{=} \int \varphi(\bar{z}) \mathfrak{H}_z^{n,m} d\mu_{n,m}(z, \bar{z}), \quad \varphi \in \mathcal{P}[n, m]. \quad (4.16)$$

Теорема 4.4. Когерентное преобразование $\mathfrak{H} : \mathcal{P}[n, m] \rightarrow \mathcal{H}[n, m]$, заданное формулой (4.16), является унитарным. Обратное преобразование имеет вид

$$(\mathfrak{H}^{-1}\Psi)(\bar{z}) = (\Psi, \mathfrak{H}_z^{n,m})_{\mathcal{H}} \quad \forall \Psi \in \mathcal{H}[n, m].$$

При этом для каждого фиксированного $w \in \mathbb{C}$ преобразование $\mathfrak{H}$ переводит вырожденный гипергеометрический ряд $k_{n,m}(w\bar{z})$ в когерентное состояние $\mathfrak{H}_w^{n,m}$. Выполнены формулы композиции:

$$\mathbf{R} \circ \mathfrak{H} = \mathfrak{H} \circ \mathring{\mathbf{R}}, \quad \text{где} \quad \mathbf{R} = (\mathbf{A}_0, \mathbf{A}_-, \mathbf{B}, \mathbf{C}), \quad \mathring{\mathbf{R}} = (\mathring{\mathbf{A}}_0, \mathring{\mathbf{A}}_-, \mathring{\mathbf{B}}, \mathring{\mathbf{C}}),$$

т.е. $\mathfrak{H}$ сплетает абстрактное представление $\mathbf{R}$ резонансной алгебры в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ с неприводимым антиголоморфным представлением $\mathring{\mathbf{R}}$ этой алгебры в гильбертовом пространстве $\mathcal{P}[n, m]$.

5 Неприводимое представление резонансной алгебры над кривой в симплектическом листе

5.1 Λ -когерентные состояния и амплитуда перехода

На симплектическом листе $\Omega[n, m]$ (3.3) с параметром $d = h(n - 2m) < 0$ рассмотрим одномерную замкнутую кривую Λ :

$$\Lambda = \{z = z(\alpha)\},$$

где z комплексная координата (3.4) на листе $\Omega[n, m]$. Подчиним Λ следующему условию квантования

$$\left(\frac{1}{2\pi h} \int_{\Sigma} \omega_0 - \frac{1}{4} m(\Sigma) \right) \in \mathbb{Z} \quad (5.1)$$

для любой двумерной пленки $\Sigma \subset \Omega[n, m]$ с границей $\partial\Sigma = \Lambda$. Здесь ω_0 - симплектическая форма (3.6) на $\Omega[n, m]$; $m(\Sigma)$ - индекс пленки (см. [18, 19]).

Λ -когерентные состояния определим по формуле

$$\mathfrak{h}_{\alpha}^{n,m} \stackrel{der}{=} \sqrt{z'(\alpha)} \exp \left\{ \frac{i}{h} \int_{\alpha_0}^{\alpha} \theta_0 \right\} \mathfrak{H}_{z(\alpha)}^{n,m}(x_+, x_-, x_0). \quad (5.2)$$

Здесь $\mathfrak{H}_{z(\alpha)}^{n,m}(x_+, x_-, x_0)$ - голоморфные когерентные состояния (4.8), (4.10) в гильбертовом пространстве $L^2(\mathbb{R}^3)$; первообразная θ_0 (3.6) симплектической формы ω_0 интегрируется вдоль кривой Λ ; $z'(\alpha) \equiv dz(\alpha)/d\alpha$.

Семейство Λ -когерентных состояний (5.2) на кривой является гладкой функцией от $\alpha \in \Lambda$.

Введем *амплитуду перехода* на Λ :

$$a_{\Lambda}(\beta|\alpha) = (\mathfrak{h}_{\alpha}^{n,m}, \mathfrak{h}_{\beta}^{n,m})_{L^2(\mathbb{R}^3)}.$$

В силу (4.15), для амплитуды перехода имеет место формула

$$a_{\Lambda}(\beta|\alpha) = \sqrt{z'(\alpha)\overline{z'(\beta)}} \exp \left\{ \frac{i}{h} \int_{\alpha_0}^{\alpha} \theta_0 - \frac{i}{h} \int_{\beta_0}^{\beta} \bar{\theta}_0 \right\} k^{n,m}(z(\alpha), \overline{z(\beta)}).$$

где $k^{n,m}$ - вырожденный гипергеометрический ряд (4.14).

5.2 Гильбертово пространство представления над кривой

Чтобы определить скалярное произведение в пространстве функций над кривой $\Lambda \subset \Omega[n, m]$, мы используем амплитуду a_{Λ} (см. [15]). А именно, для $\phi, \phi' \in C^{\infty}(\Lambda)$ положим

$$(\phi, \phi')_{\Lambda} = \int_{\Lambda} d\alpha \int_{\Lambda} d\beta a(\beta|\alpha) \phi(\alpha) \overline{\phi'(\beta)}. \quad (5.3)$$

Пусть $\mathcal{L}_{\Lambda}$ - ортогональное дополнение к ядру $\{\phi | (\phi, \phi')_{\Lambda} = 0\}$ этой билинейной формы. Тогда $\mathcal{L}_{\Lambda}$ - гильбертово пространство со скалярным произведением (5.3).

Пространство $\mathcal{L}_{\Lambda}$ можно описать явно. Для этого определим функции $a_j \in C^{\infty}(\Lambda)$:

$$a_k(\alpha) = \sqrt{\bar{z}'(\alpha)} \exp \left\{ -\frac{i}{h} \int_{\alpha_0}^{\alpha} \theta_0 \right\} \rho_k^{n,m}(\bar{z}(\alpha)), \quad (5.4)$$

где $\rho_k^{n,m}$ - мономы (4.4).

Теорема 5.1. [12] Гильбертово пространство $\mathcal{L}_\Lambda$ функций над кривой Λ совпадает с линейной оболочкой функций $\{a_j | j = 0, 1, \dots\}$, заданных формулой (5.4). Отображение $\tau_\Lambda : \mathcal{L}_\Lambda \rightarrow \mathcal{P}[n, m]$:

$$\begin{aligned} \tau_\Lambda(\phi)(\bar{z}) &\stackrel{\text{def}}{=} \int_\Lambda \phi(\alpha) \sqrt{z'(\alpha)} \exp \left\{ \frac{i}{h} \int_{\alpha_0}^\alpha \theta_0 \right\} k_{n,m}(z(\alpha) \bar{z}) d\alpha \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \rho_k^{n,m}(\bar{z}) \int_\Lambda \overline{a_k(\alpha)} \phi(\alpha) d\alpha. \end{aligned} \quad (5.5)$$

является унитарным изоморфизмом.

5.3 Операторы неприводимого представления над кривой

Используя изоморфизм τ_Λ (5.5), мы переведем неприводимое представление резонансной алгебры (2.12), (2.13), заданное в (4.5), из пространства антиголоморфных функций $\mathcal{P}[n, m]$ в пространство $\mathcal{L}_\Lambda$ функций над кривой Λ .

Теорема 5.2. Пусть n, m целые, удовлетворяющие условиям (4.1). Предположим, что замкнутая кривая $\Lambda \subset \Omega[n, m]$ удовлетворяет условию квантования (5.1). Тогда имеют место следующие утверждения.

(а) Операторы второго порядка

$$\begin{aligned} \check{A}_0 &= |z|^2 + h(2m - n - 1) - 2hD[z], \\ \check{A}_- &= \frac{|z|^2}{2} - \frac{h}{2} - hD[z], \\ \check{B} &= \frac{2}{z}(\check{A}_- + h) \left(\check{A}_0 + \frac{h(3 + (-1)^n)}{2} \right) = \bar{z} \left(|z|^2 + h \left(2m - 2 \left[\frac{n+1}{1} \right] \right) \right) - \\ &\quad - 4hD \left[|z|^2 + h \left(m - \left[\frac{n+1}{1} \right] \right) \right] + 2h^2(D[1]D[z] + D[z]D[1]), \\ \check{C} &= z \left(\check{A}_0 - \frac{h(1 + (-1)^n)}{2} \right) = z \left(|z|^2 + h \left(2m - n - \frac{1 + (-1)^n}{2} \right) \right) - 2hD[z^2] \end{aligned} \quad (5.6)$$

задают неприводимое эрмитово представление резонансной алгебры (2.12), (2.13) в пространстве $\mathcal{L}_\Lambda$ функций на кривой. Здесь через $D[f]$ для каждой гладкой функции $f(z, \bar{z})$ обозначен дифференциальный оператор первого порядка, заданный на пространстве гладких функций на симплектическом листе $\Omega[n, m]$:

$$D[f] = \frac{f(z(\alpha), \bar{z}(\alpha))}{z'(\alpha)} \frac{d}{d\alpha} + \frac{1}{2} \frac{d}{d\alpha} \left(\frac{f(z(\alpha), \bar{z}(\alpha))}{z'(\alpha)} \right).$$

(б) Λ -когерентные состояния $\mathfrak{h}_\alpha$ (5.2) сплетают представление (2.3), (2.7) резонансной алгебры (2.12), (2.13) с неприводимым представлением (5.6) в пространстве $\mathcal{L}_\Lambda$. А именно, интегральное преобразование

$$\mathfrak{h} : \mathcal{L}_\Lambda \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3), \quad \mathfrak{h}(\phi) \stackrel{\text{def}}{=} \int_\Lambda \phi(\alpha) \mathfrak{h}_\alpha^{n,m} d\alpha \quad (5.7)$$

переводит представление $\check{R} = (\check{A}_0, \check{A}_-, \check{B}, \check{C})$ над кривой в представление $\hat{R} = (\hat{A}_0, \hat{A}_-, \hat{B}, \hat{C})$ в пространстве $L^2(\mathbb{R}^3)$:

$$\hat{R} \circ \mathfrak{h} = \mathfrak{h} \circ \check{R}.$$

Преобразование $\mathfrak{h}$ является унитарным изоморфизмом из $\mathcal{L}_\Lambda$ в подпространство $L[n, m]$ неприводимого представления резонансной алгебры в $L^2(\mathbb{R}^3)$.

6 Когерентное преобразование спектральной задачи

6.1 Спектральная задача в различных представлениях резонансной алгебры

С помощью теоремы 5.2 спектральная задача в любом представлении резонансной алгебры (2.12), (2.13) может быть переформулирована в терминах дифференциального уравнения либо в голоморфной карте на $\Omega[n, m]$, либо глобально на кривой $\Lambda \subset \Omega[n, m]$. В частности, это можно сделать для спектральной задачи в представлении (2.3), (2.7), заданном в пространстве $L^2(\mathbb{R}^3)$.

Более подробно, пусть задано некоторое представление $\mathbf{R} = (\mathbf{A}_0, \mathbf{A}_-, \mathbf{B}, \mathbf{C})$ соотношений (2.12), (2.13) в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$. Предположим, что исходная спектральная задача в этом представлении имеет вид

$$g(\mathbf{R})\Phi = \lambda\Phi, \quad \Phi \in \mathcal{H}, \quad (6.1)$$

где g – функция четырех переменных. Тогда интегральное преобразование (4.16)

$$\Phi = \mathfrak{H}(\varphi) = \int_{\mathbb{C}} \varphi(\bar{z}) \mathfrak{H}_z^{n,m} d\mu_{n,m}(z, \bar{z}) \quad (6.2)$$

преобразует задачу (6.1) к задаче

$$g(\overset{\circ}{R})\varphi = \lambda\varphi, \quad \varphi \in \mathcal{P}[n, m]. \quad (6.3)$$

в неприводимом эрмитовом представлении $\overset{\circ}{R}$ (4.5) соотношений (2.12), (2.13) над $\Omega[n, m]$.

Решением задачи (6.3) является некоторый ряд

$$\varphi(\bar{z}) = \sum_{j=0}^{\infty} \varphi_j^j \rho_j^{n,m}(\bar{z}), \quad (6.4)$$

где $\{\rho_j^{n,m}\}$ – ортонормированный базис мономов (4.4) в $\mathcal{P}[n, m]$. Поэтому формула (6.2) принимает вид

$$\Phi = \sum_{j=0}^{\infty} \varphi_j^j \chi_j^{n,m}, \quad (6.5)$$

где $\{\chi_j^{n,m}\}$ – ортонормированный базис (4.9) в подпространстве $\mathcal{H}[n, m] \subset \mathcal{H}$, на котором задано неприводимое представление алгебры (2.12).

Аналогично, с помощью интегрального преобразования (5.7)

$$\Phi = \mathfrak{h}(\phi) = \int_{\Lambda} \phi(\alpha) \mathfrak{h}_{\alpha}^{n,m} d\alpha,$$

задачу (6.1) можно преобразовать к задаче над кривой Λ :

$$g(\check{R})\phi = \lambda\phi, \quad \phi \in \mathcal{L}_{\Lambda} \quad (6.6)$$

в неприводимом представлении $\check{R}$ (5.6) соотношений (2.12).

Решения задач (6.3) и (6.6) связаны соотношением

$$\varphi = \tau_{\Lambda}(\phi),$$

где τ_{Λ} – оператор (5.5). Поскольку применяемые здесь интегральные преобразования унитарны, то

$$\|\Phi\|_{\mathcal{H}} = \|\varphi\|_{n,m} = \|\phi\|_{\Lambda}.$$

6.2 Спектральная задача в антиголоморфном представлении

Теперь рассмотрим дважды усредненную спектральную задачу (2.5) в гильбертовом пространстве $L^2(\mathbb{R}^3)$. В силу формул

$$\hat{S}_0 \mathfrak{H}_z^{n,m} = hn \mathfrak{H}_z^{n,m}, \quad \hat{S}_1 \mathfrak{H}_z^{n,m} = hm \mathfrak{H}_z^{n,m},$$

при любых амплитудах φ интегральное представление $\Phi = \mathfrak{H}(\varphi)$ задает точные решения первых двух уравнений (2.5). В третьем уравнении (2.5) в гильбертовом пространстве $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ используется представление $\mathbf{R} = \hat{R}$ (2.3), (2.7). В силу формулы (2.9), это уравнение имеет вид

$$s \left(a \hat{A}_0^2 + \hat{b} \hat{A}_0 + \hat{c} - \frac{1}{2} (\hat{B} + \hat{C}) \right) \Phi = \lambda \Phi,$$

где коэффициенты $a, \hat{b}, \hat{c}$ заданы в (2.10). В антиголоморфном представлении ему соответствует уравнение (6.3) для ряда φ . Оно является дифференциальным уравнением второго порядка:

$$s \left(a \overset{\circ}{A}_0^2 + b \overset{\circ}{A}_0 + c - \frac{1}{2} (\overset{\circ}{B} + \overset{\circ}{C}) \right) \varphi(\bar{z}) = \lambda \varphi(\bar{z}), \quad (6.7)$$

или, более подробно,

$$\begin{aligned} \bar{z}(2a\bar{z} - 1) \frac{d^2 \varphi}{d\bar{z}^2} - \left(\frac{\bar{z}^2}{2h} - \left(2a(2m - n + 1) + \frac{b}{h} \right) \bar{z} + \left(m - \left[\frac{n+1}{2} \right] + 1 \right) \right) \frac{d\varphi}{d\bar{z}} - \\ - \left(\frac{1}{2h} \left(m - \left[\frac{n}{2} \right] + \frac{1}{2} \right) \bar{z} - \frac{a}{2} (2m - n)^2 - \frac{b}{2h} (2m - n) - \frac{1}{2h^2} \left(c - \frac{\lambda}{s} \right) \right) \varphi(\bar{z}) = 0. \end{aligned}$$

Здесь коэффициенты b и c получаются из операторов $\hat{b}, \hat{c}$ путем формальной замены $\hat{S}_0, \hat{S}_1$ их собственными значениями hn, hm .

Собственные числа и нормированные собственные функции этого уравнения обозначим через $\lambda_k^{n,m}$ и $\varphi_k^{n,m}$ ($k \in \mathbb{Z}_+$), или более кратко λ_k и φ_k . Разложим φ_k по ортонормированному базису в $\mathcal{P}[n, m]$:

$$\varphi_k(\bar{z}) = \sum_{j=0}^{\infty} \varphi_k^j \rho_j(\bar{z}).$$

Тогда для нормированных собственных функций $\Phi_k \in \mathcal{L}[n, m]$ задачи (2.5) получим представление в виде (6.5), т.е.

$$\Phi_k = \sum_{j=0}^{\infty} \varphi_k^j \chi_j.$$

Используя формулы (2.6), отсюда получаем следующее утверждение.

Теорема 6.1. Пусть $\varepsilon \ll 1$. Собственные значения и собственные функции гамильтониана (1.3) электрона в плоской ловушке Пеннинга имеют вид

$$E = E_k^{n,m} = \frac{\omega_0 h}{2} \left(n + \frac{3}{2} \right) + \frac{\varepsilon h}{4} \left(6m - n + \frac{3}{2} \right) + \varepsilon^2 \lambda_k + O(\varepsilon^3),$$

$$\Psi = \Psi_k^{n,m} = \int_{\mathbb{C}} \varphi_k(\bar{z}) U \tilde{U} \mathfrak{H}_z^{n,m} d\mu_{n,m}(z, \bar{z}) + O(\varepsilon) = \sum_{j=0}^{\infty} \varphi_k^j U \tilde{U} \chi_k^{n,m} + O(\varepsilon).$$

Здесь $\lambda_k, \varphi_k(\bar{z})$ – решения уравнения (6.7) в пространстве антиголоморфных рядов, а $U, \tilde{U}$ – деусредняющие операторы (2.1), (2.4).

7 Квазиклассическое приближение

7.1 Геометрический смысл операторов представления на кривой

Теперь рассмотрим когерентное преобразование $\mathfrak{h}$ (5.7) в пространстве функций над кривой $\Lambda \subset \Omega[n, m]$. Оно удобно с точки зрения квазиклассического приближения по параметру $h \rightarrow 0$. Ключевым моментом является геометрический смысл операторов (5.6).

Напомним, что на симплектических листах $\Omega[n, m]$ координатные функции A_0, A_-, B, C выражаются через $z, \bar{z}$ (3.4) по формулам (3.5). Далее, из (3.2) следует, что функциям A_0, A_-, B, C соответствуют следующие гамильтоновы поля:

$$\begin{aligned} ad(A_0) &= -2iz \frac{\partial}{\partial z} + 2i\bar{z} \frac{\partial}{\partial \bar{z}}, & ad(A_-) &= -iz \frac{\partial}{\partial z} + i\bar{z} \frac{\partial}{\partial \bar{z}}, \\ ad(B) &= -2i(2|z|^2 + h(2m - n)) \frac{\partial}{\partial z} + 2i\bar{z}^2 \frac{\partial}{\partial \bar{z}}, \\ ad(C) &= -2iz^2 \frac{\partial}{\partial z} + 2i(2|z|^2 + h(2m - n)) \frac{\partial}{\partial \bar{z}}, \end{aligned} \quad (7.1)$$

Сравнивая формулы (5.6) с (3.5), (7.1), получаем следующее утверждение.

Теорема 7.1. *А. При $h \rightarrow 0$ для операторов $\check{A}_0, \check{A}_-, \check{B}, \check{C}$ (5.6) выполнены следующие асимптотические формулы:*

$$\begin{aligned} \check{A}_0 &= A_0|_{\Lambda} - h - ih \left(\check{w}_{A_0} + \frac{1}{2} \operatorname{div} \check{w}_{A_0} \right) + O(h^2), \\ \check{A}_- &= A_-|_{\Lambda} - \frac{h}{2} - ih \left(\check{w}_{A_-} + \frac{1}{2} \operatorname{div} \check{w}_{A_-} \right) + O(h^2), \\ \check{B} &= B|_{\Lambda} - \frac{h(1 - (-1)^n)}{2} \bar{z} - ih \left(\check{w}_B + \frac{1}{2} \operatorname{div} \check{w}_B \right) + O(h^2), \\ \check{C} &= C|_{\Lambda} - \frac{h(1 + (-1)^n)}{2} z - ih \left(\check{w}_C + \frac{1}{2} \operatorname{div} \check{w}_C \right) + O(h^2). \end{aligned}$$

Здесь A_0, A_-, B, C – координатные функции (3.5) на $\mathbb{R}^4 \supset \Omega[n, m]$, $\check{w}_{A_0}, \check{w}_{A_-}, \check{w}_B, \check{w}_C$ – проекции гамильтоновых полей $ad(A_0), ad(A_-), ad(B), ad(C)$ на кривую $\Lambda \subset \Omega[n, m]$ вдоль $\partial/\partial \bar{z}$, а через $\operatorname{div} \check{w}$ обозначена дивергенция векторного поля $\check{w}$ на Λ относительно меры $d\alpha$.

В. В частности, для квадратичной функции

$$g(A_0, B, C) = aA_0^2 + bA_0 + c - \frac{1}{2}(B + C)$$

имеет место асимптотика

$$g(\check{A}_0, \check{B}, \check{C}) = g(A_0, B, C)|_{\Lambda} - ih \left(\check{w}_{g(A_0, B, C)} + \frac{1}{2} \operatorname{div} \check{w}_{g(A_0, B, C)} \right) + hr(A_0, B, C)|_{\Lambda} + O(h^2),$$

где $\check{w}_{g(A_0, B, C)}$ – проекция поля $ad(g(A_0, B, C))$ на Λ вдоль $\partial/\partial \bar{z}$, а функция r задается формулой

$$r(A_0, B, C) = -2aA_0 - b + \frac{C + B}{4A_0} + \frac{(-1)^n(C - B)}{4A_0}. \quad (7.2)$$

С. Пусть кривая Λ - это траектория поля $\text{ad}(g(A_0, B, C))$, т.е. $g(A_0, B, C)|_{\Lambda} = \text{const}$. Выберем в качестве координаты α на Λ гамильтоново время t на траектории. Тогда выполнена следующая асимптотика:

$$g(\check{A}_0, \check{B}, \check{C}) = \text{const} - i\hbar \frac{d}{dt} + \hbar r(A_0, B, C)|_{\Lambda} + O(\hbar^2).$$

С помощью Теоремы 7.1(С) получим квазиклассическую асимптотику собственных функций сначала дважды усредненной спектральной задачи (2.5), а затем и исходной спектральной задачи (1.4).

7.2 Выбор кривой Λ

В качестве кривых Λ будем брать линии уровня дважды усредненной функции Гамильтона

$$H_{200} = s(aA_0^2 + bA_0 + c - \frac{1}{2}(B + C)) = s g(A_0, B, C)$$

на $\Omega[n, m]$. Здесь коэффициенты a, b, c - это значения операторов (2.10) на подпространстве, где $\hat{S}_0 = \hbar n$, $\hat{S}_1 = \hbar m$.

Укажем достаточные условия, при которых линии уровня

$$\Lambda(\mu) = \{H_{200} = s\mu\} = \{g(A_0, B, C) = \mu\} \quad (7.3)$$

являются замкнутыми кривыми. Для этого рассмотрим кубическое уравнение

$$y^3 + Py + Q = 0,$$

где

$$P = 2ab - 4a^2d - \frac{3}{4}, \quad Q = ab - \frac{1}{4}, \quad d = \hbar(n - 2m).$$

Если дискриминант

$$D = \left(\frac{P}{3}\right)^3 + \left(\frac{Q}{3}\right)^2$$

этого уравнения больше нуля, то оно имеет единственный вещественный корень

$$y_1 = \sqrt[3]{-\frac{Q}{2} + \sqrt{D}} + \sqrt[3]{-\frac{Q}{2} - \sqrt{D}},$$

причем $y_1 > -1/2$. Пусть

$$\mu^* = \frac{1}{16a^3} \left(y_1 + \frac{1}{2}\right)^4 - \frac{1}{8a^3} \left(y_1 + \frac{1}{2}\right)^3 + \left(\frac{b}{4a^2} - \frac{d}{2a}\right) \left(y_1 + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{d}{2a} \left(y_1 + \frac{1}{2}\right) + ad^2 - bd + c.$$

Тогда в случае $\mu < \mu^*$ симплектический лист $\Omega[n, m]$ не пересекается с поверхностью уровня $\{g(A_0, B, C) = \mu\}$. В случае $\mu = \mu^*$ эта поверхность касается листа $\Omega[n, m]$ в одной точке. А при $\mu > \mu^*$ их пересечением является замкнутая кривая. Таким образом, приходим к следующему утверждению.

Лемма 7.1. Пусть выполнены условия (4.1), а также неравенства

$$D > 0, \quad \mu > \mu^*.$$

Тогда кривая (7.3) на симплектическом листе $\Omega[n, m]$ диффеоморфна окружности.

Предположим, что для кривой $\Lambda(\mu)$ выполнено условие квантования (5.1). Оно имеет вид:

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\Sigma_{\Lambda(\mu)}} \omega_0 = k + \frac{1}{2}, \quad k \in \mathbb{Z}. \quad (7.4)$$

где ω_0 – симплектическая форма (3.6) на листе $\Omega[n, m]$, а Σ_{Λ} – двумерная пленка на $\Omega[n, m]$ с границей Λ .

Площадь пленки $S(\mu) = \int_{\Sigma_{\Lambda(\mu)}} \omega_0$ можно выразить через эллиптические интегралы, зависящие от энергии μ . Рассматривая (7.4) как уравнение относительно μ , и решая его, получим квантованные уровни энергии

$$\mu = \mu_k \stackrel{def}{=} S^{-1}((2k+1)\pi\hbar).$$

и соответствующие им квантованные кривые Λ : $\Lambda_k = \Lambda(\mu_k)$. Период на кривой Λ обозначим через T_k .

7.3 Квазиклассическая асимптотика

Из теоремы 7.1 следует, что гамильтониан $\check{H}_{200}$ над квантованной кривой Λ_k будет иметь вид дифференциального оператора первого порядка:

$$\check{H}_{200} = s \left(\mu_k - i\hbar \frac{d}{dt} + \hbar r(A_0, B, C)|_{\Lambda_k} + O(\hbar^2) \right),$$

где r – функция (7.2), число s задано в (2.10). Очевидно,

$$\phi_k(t) = \exp \left\{ \frac{i}{T_k} \int_0^{T_k} r(A_0, B, C)|_{\Lambda_k} dt - i \int_0^t r(A_0, B, C)|_{\Lambda_k} dt \right\} \pmod{O(\hbar)}, \quad (7.5)$$

является его собственной функцией, отвечающей собственному значению

$$\lambda_k = s \left(\mu_k + \frac{\hbar}{T_k} \int_0^{T_k} r(A_0, B, C)|_{\Lambda_k} dt + O(\hbar^2) \right).$$

Теорема 7.2. Пусть $\varepsilon = O(\hbar)$, $\hbar \ll 1$. Асимптотика собственных значений гамильтониана (1.3) электрона в планарной ловушке Пеннинга имеет вид

$$E = E_k^{n,m} = \frac{\omega_0 \hbar}{2} \left(n + \frac{3}{2} \right) + \frac{\varepsilon \hbar}{4} \left(6m - n + \frac{3}{2} \right) + \varepsilon^2 \left(s\mu_k + \frac{\hbar s}{T_k} \int_0^{T_k} r(A_0, B, C)|_{\Lambda_k} dt \right) + O(\hbar^2),$$

где μ_k – решения уравнения (7.4). Соответствующие собственные функции задаются формулой

$$\Psi = \Psi_k^{n,m} = \frac{1}{T_k} \int_0^{T_k} \phi_k(t) U \tilde{U} \mathfrak{h}_t^{n,m} dt + O(\hbar).$$

Здесь $\mathfrak{h}_t^{n,m}$ – Λ -когерентные состояния (5.2), ϕ_k – функции (7.5), T_k – период на траекториях (7.3), а $U, \tilde{U}$ – деусредняющие операторы (2.1), (2.4).

Благодарности.

Эта статья продолжает цикл совместных работ [8–11] с М.В. Карасевым и опирается на методы, изложенные в работах [12] – [14], также написанных в соавторстве с М.В. Карасевым. Автор выражает большую благодарность М.В. Карасеву за полезные обсуждения.

Работа поддержана РФФИ (грант № 15 – 01 – 08751 – а).

Список литературы

- [1] Blaum K. and Herfurth F. (eds.) Trapped Charged Particles and Fundamental Interactions // Springer-Verlag, 2008.
- [2] Ghosh P.K. Ion Traps // Callendon Press, Oxford, 1995.
- [3] Major F.G., Gheorghe V., and Werth G. Charged Particle Traps // Springer, 2002.
- [4] Segal D. and Shapiro M. Nanoscale Paul Trapping of a Single Electron // Nanoletters, 2006, 6 (8), 1622–1626.
- [5] Kretzschmar M. Single particle motion in a Penning trap: description in the classical canonical formalism // Physica Scripta, 1992, 46, 544–554.
- [6] Stahl S., Galve F., Alonso J., Djekic S., Quint W., Valenzuela T., Verdu J., Vogev M., Werth G. A planar Penning trap // Eur. Phys. J. D, 2005, 32, 139–145.
- [7] Goldman J., Gabrielse G. Optimized planar Penning traps for quantum information studies // Hyperfine Interact, 2011, 199, 279–289.
- [8] Karasev M.V., Novikova E.M. Secondary Resonances in Penning Traps. Non-Lie Symmetry Algebras and Quantum States // Russian Journal of Mathematical Physics, 2013, 20 (3), 283–294.
- [9] Karasev M.V., Novikova E.M. Inserted Perturbations Generating Asymptotical Integrability // Mathematical Notes, 2014, 96 (6), 965–970.
- [10] Karasev M.V., Novikova E.M. Planar Penning Trap with Combined Resonance and Top Dynamics on Quadratic Algebra // Russian Journal of Mathematical Physics, 2015, 22, 463–468.
- [11] Карасев М.В., Новикова Е.М. Устойчивые двумерные торы в ловушке Пеннинга при комбинированном частотном резонансе // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование, 2015, 13(2), 55–92.
- [12] Карасев М.В., Новикова Е.М. Представление точных и квазиклассических собственных функций через когерентные состояния. Атом водорода в магнитном поле // Теоретическая и математическая физика, 1996, 108 (3), 339–387.
- [13] Karasev M.V. and Novikova E.M. Non-Lie permutation relations, coherent states, and quantum embedding // in Amer. Math. Soc. Translations, Ser. 2, 187: Coherent Transform, Quantization, and Poisson Geometry (Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1998), 1–202.
- [14] Карасев М.В., Новикова Е.М. Алгебра и квантовая геометрия многочастотного резонанса // Известия РАН, серия математическая, 2010, 74 (6), 55–106.
- [15] Karasev M.V. Integrals over Membranes, Transition Amplitudes and Quantization // Russ. J. Math. Phys., 1993, 1 (4), 523–526.

- [16] Karasev M.V. Quantization and coherent states over Lagrangian submanifolds // Russ. J. Math. Phys., 1995, 3(3), 393–400.
- [17] Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции, т. 1 // Наука, 1965.
- [18] Карасев М.В. Асимптотика спектра смешанных состояний для уравнений самосогласованного поля // Теоретическая и математическая физика, 1984, 61(1), 118–127.
- [19] Карасев М.В. Пуассоновские алгебры симметрии и асимптотика спектральных серий // Функц. Анализ и его прилож., 1986, 20(1), 21–32.

SPECTRAL CLUSTERS IN PLANAR PENNING TRAP WITH RESONANCE BREAKING OF AXIAL SYMMETRY

E.M. Novikova

National Research University Higher School of Economics

emnovikova@hse.ru

Received 15.11.2015

The spectral characteristics of a planar Penning trap with ring electrode and magnetic field deviated from the axial direction are described. The relations between physical parameters are found under which there arises a combined frequency resonance in the harmonic (quadratic) part of the Hamiltonian near the trap center. The averaged anharmonic part of the Hamiltonian is represented as a second order ordinary differential operator with polynomial coefficients. The asymptotics of its eigenvalues and eigenfunctions is obtained. The formula for the asymptotics of eigenstates of the original trap Hamiltonian is found in spectral clusters near the eigenvalues of its harmonic part.

Информация и правила для авторов

Общие положения

Журнал «Наноструктуры. Математическая физика и моделирование» (сокращенно: НМФМ) публикуется с 2009 года и является периодическим научным изданием. Электронная версия журнала размещается на сайте <http://www.nano-journal.ru>. Основная цель издания: представление новых теоретических и вычислительных методов моделирования наноструктур и мягкой материи, общих подходов в исследовании мезосистем, а также ключевых экспериментальных результатов в данной области и связанных с этим проблем математической физики.

Журнал НМФМ имеет междисциплинарный характер и в силу этого несет определенную образовательную направленность, а не только узко научную. Работы, представляемые в журнал, должны содержать вводные сведения, которые обеспечат понимание постановок задач и восприятие результатов не только прямыми специалистами. Определения понятий, объяснение обозначений и терминов, оценки характерных параметров, теоретические предпосылки и идеи, используемые методы, и т.п., должны быть кратко объяснены в тексте статьи, имея в виду читателей, специализирующихся в иных направлениях. Должны быть описаны базовые математические модели и уравнения. Во Введении и в последующих разделах очерчивается стратегия и основные трудности, это увязывается с используемыми моделями. Структура статьи ориентируется на прояснение общей логики и методики исследования, содержит резюмирующие выводы. В тексте должны быть рассмотрены характерные примеры (хотя бы, методические), ясно иллюстрирующие предлагаемые алгоритмы.

Журнал публикует научные обзоры, исследовательские статьи и краткие научные сообщения, а также избранные аналитические и информационно-образовательные материалы, тексты докладов и циклов лекций, прочитанных в университетах, научных центрах, на школах-семинарах, конференциях, нигде ранее не публиковавшиеся и не принятые к публикации в других изданиях. Язык публикации в журнале НМФМ, как правило, русский. Работы, представляемые в журнал, не могут иметь научно-популярный или компилятивный характер. Все статьи рецензируются и могут быть отклонены редколлегией журнала. В случае принятия работы к печати ее авторы передают издателью журнала НМФМ право на разовую безвозмездную публикацию текста и его размещение в электронной версии на сайте журнала. Перевод опубликованных в журнале статей на другие языки может осуществляться только с разрешения и при участии авторов.

Порядок представления статей

- В редакцию изначально представляются:
 - файл статьи, файлы с иллюстрациями;
 - сопроводительное письмо, можно в электронной форме, содержащее сведения об объеме статьи и обо всех авторах (фамилии, имена, отчества, полные названия мест работы, почтовый адрес с индексом, номер контактного телефона с кодом города, электронный адрес автора, ответственного за переписку с редакцией); предпочтительно, чтобы это письмо было выполнено на бланке учреждения, в котором работает кто-то из авторов, было заверено печатью и содержало утверждение о возможности открытого опубликования статьи;
 - файл с переводом на английский язык названия статьи, фамилий и инициалов авторов, аннотации, ключевых слов.
- Авторские файлы могут быть присланы на электронный адрес: papers@nano-journal.ru; (резервный адрес в случаях затруднений с пересылкой: nano@miem.edu.ru) или переданы в редакцию на любом электронном носителе. Авторы получают из редакции подтверждение о получении их материалов.
- Телефон (факс) редакции: +7 (495) 916-8876. Адрес редакции: Москва 109028, Б. Трехсвятительский пер., 3/12, Московский институт электроники и математики (МИЭМ), комн. 449.

Общие требования к представляемым файлам

- Допускается использование текстовых редакторов WORD и LATEX. К рабочим файлам должна быть приложена их pdf-копия. В названии файлов используется латинский алфавит, пробелы заменяются знаком `_`. Шапка статьи содержит название, инициалы и фамилии авторов, место работы, электронный адрес, краткую аннотацию, ключевые слова. В аннотации не следует использовать формулы и ссылки на текст работы или список литературы; в конце она должна содержать индекс УДК (к английской версии аннотации можно добавить индексы зарубежных рубрикаторов).
- Объем кратких сообщений 4-8 страниц, исследовательских статей, как правило, до 20 страниц, а обзоров – более 20 страниц. Верхняя граница согласуется с редколлегией. При подсчете объема нужно ориентироваться на страницы формата А4, шрифт 12, знаков в строке 80, интервалов между строками 1.
- Авторы не должны злоупотреблять сокращениями, составленными из заглавных начальных букв терминов. Предпочтительней каждый раз использовать полное наименование объекта. Возможно использование только устоявшихся аббревиатур.

Требования к файлам Word

- Рекомендуемый шрифт – Times New Roman.
- Строки в пределах абзаца не должны разделяться символом возврата каретки (Enter).
- Нельзя использовать автоматическое создание сносков, автоматический перенос или автоматический запрет переносов, создание списков, автоматический отступ и т.п.
- Ссылки на список литературы даются цифрами в квадратных скобках: [1], [5,6,7], [1-9].
- Все без исключения формулы и обозначения размерности, даже состоящие из одной латинской буквы, и в тексте и вынесенные в отдельную строку, всегда набираются в формульном редакторе и никогда – в обычном текстовом редакторе.

- При создании таблицы рекомендуется использовать возможности Word или MS Excel. Таблицы, набранные вручную (с помощью большого числа пробелов), не принимаются.

Требования к иллюстрациям

- Иллюстрации представляются в отдельных файлах, черно-белыми. Они должны иметь разрешение не менее 600 dpi.
- Форматы файлов – TIFF, EPS, PSD, JPEG.

Требования к списку литературы

- Ф.И.О. авторов или редакторов выделяются курсивом.
- Для статей приводится название. Названия отделяются от выходных данных знаком //. Расположение выходных данных указано на образце ниже. Номер тома выделяется жирным шрифтом, номер выпуска дается в скобках. Указываются номера первой и последней страниц статьи, либо уникальный номер статьи и ее объем. Для книг желательно указывать их объем. Если известна ссылка на электронный архив или сайт, то ее желательно указать.

Фамилия И.О. Название статьи // Назв. журн., 2000, **1** (1), 1-6.

Family F.M. and Family F. Title of the paper // Name of the Journal, 2006, **73**, 165313, 9 pp.

Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название книги // Наука, С.-П., 1999, 176 стр.

Family F.M. Title of the paper // In book: *Family F.M. (et al. eds)*, Title of the collection, Publisher, Boston, 2005, 9-24.

Family F.M. (ed.), Title of the collection // Publisher, N.Y., 2005, 324 pp.

Фамилия И.О. Название доклада // Доклад на конференции «Название конференции (место и дата проведения)»; ссылка на электронный ресурс.

Наноструктуры. Математическая физика и моделирование

Журнал зарегистрирован

в Министерстве РФ по делам печати,
телерадиовещания и средств массовых коммуникаций.

Свидетельство о регистрации

ПИ № ФС77-34934 от 29 декабря 2008 г.

Учредители

Московский государственный институт электроники и математики (МИЭМ),

ФГУ ГНИИ ИТТ «Информика»,

Европейский центр по качеству

Председатель Совета Учредителей

Тихонов А.Н.

Издатель

Европейский центр по качеству

ПОДПИСКА НА ЖУРНАЛ НМФМ

На первое полугодие 2017 г. подписаться на журнал можно в любом отделении связи по каталогу

Агентства Роспечать «Журналы России»,

рубрика «Физико-математические науки», подписной индекс 70017.

Редакция предлагает подписчикам возможность безвозмездно получить подборку прошлых выпусков журнала. Пришлите на электронный адрес nanostructures@hse.ru (или на почтовый адрес:

123458, Москва, ул. Таллинская, д. 34, каб. 429, редакция журнала НМФМ)

копию подписной квитанции, а также адрес для отсылки выпусков.