



НАНОСТРУКТУРЫ

математическая физика и моделирование



Nanostructures. Mathematical physics & modelling

НАНОСТРУКТУРЫ

математическая физика и моделирование

Nanostructures.
Mathematical Physics & Modelling

2017, volume 16(2)

Наноструктуры. Математическая физика и моделирование

Редколлегия:

В.А. Аветисов, И.В. Волович, 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, Г.Э. Норман, Р.А. Сурис, 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

© 2017, Европейский центр по качеству

Содержание

Е.В. Борщева, В.А. Аветисов Роль конформационной динамики белка в регуляции ферментативной активности	5
О.В. Кравченко, О.А. Азарова Образование войдов в неподвижной и движущейся пылевой плазме	25
В.А. Морозов Математическое моделирование квантовых биений заселенности состояний трехуровневых наночастиц при спонтанной флуоресценции и при рассеянии монохроматического света	37
Х.Х. Муминов, Ф.Ш. Шокиров Динамика топологических трехсолитонных взаимодействий в нелинейной сигма-модели	53
Е.М. Новикова Резонансная планарная ловушка Пеннинга с прямоугольными электродами	69
М.В. Карасев Математические технологии на рубеже нанореволюции	89
Информация и правила для авторов	95

Contents

V. A. Avetisov, E.V. Borshcheva	
Protein conformational dynamics role in the regulation of enzymatic activity	5
Q.V. Kravchenko, O.A. Azarova	
Generation of voids in unmoving and moving dusty plasma	25
V.A. Morozov	
Mathematical modeling of quantum beats of population of states of three-level nanoparticles at the spontaneous fluorescence and the scattering of monochromatic light	37
Kh.Kh. Muminov, F.Sh. Shokirov	
Dynamics of topological three-soliton interactions in nonlinear sigma model	53
E.M. Novikova	
Resonance planar Penning trap with rectangular electrodes	69
M.V. Karasev	
Mathematical technologies at frontier of nanorevolution	89
The information and rules for authors	95

РОЛЬ КОНФОРМАЦИОННОЙ ДИНАМИКИ БЕЛКА В РЕГУЛЯЦИИ ФЕРМЕНТАТИВНОЙ АКТИВНОСТИ

Е.В. Борщева¹, В.А. Аветисов^{1,2}

¹Департамент прикладной математики Национального исследовательского университета “Высшая школа экономики”

²Институт химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук

katbr@yandex.ru, vladik.avetisov@gmail.com

Поступила 29.05.2017

В данной работе мы приводим результаты разносторонних исследований ультраметрической математической модели рабочего цикла белка-фермента, расширяющие распространенные представления о регуляции ферментативной активности, а также даем их физическую интерпретацию. Модель заключается в представлении многомерного сильно пересеченного энергетического ландшафта белка иерархией вложенных друг в друга бассейнов локальных минимумов и в аппроксимации динамики белка ультраметрическим случайным блужданием. Ультраметрическое случайное блуждание, в отличие от случайного блуждания в низкоразмерном евклидовом пространстве, релевантно многомасштабной конформационной динамике белка и согласуется с наблюдаемыми особенностями кинетики ферментативной реакции. Мы показываем, что противоречивые, на первый взгляд, регуляторные свойства ферментов следствие универсальной сложности конформационной динамики белка, обусловленной его энергетическим ландшафтом. Ультраметрическая модель позволяет увидеть различные пути регуляции ферментативной активности.

УДК 519.2+577.3

1. Введение

Ферменты, как известно, это белковые структуры, выполняющие в клетке различные операции на молекулярном уровне — специфическое связывание, образование и разрыв химической связи, перенос заряда и т.д. Понимание того, что функциональная способность белков-ферментов обусловлена не только специфической пространственной укладкой белковой макромолекулы, но и особой динамической подвиж-

ностью белковой структуры, сложилось достаточно давно (см, например, ставшее классическим изложение этого вопроса в [15]). Среди прочих полимерных структур белки выделяются очень широким диапазоном временных и пространственных масштабов движений, характерных и для неупорядоченной жидкости, и для жидкокристаллической фазы, и для твердого тела. Внутривуриструктурные движения в белке могут быть пикосекундными, если речь идет о смещениях небольших химических групп в пределах их стерических ограничений, но могут затрагивать и более крупные фрагменты, смещение которых возможно только при согласованных подвижках их соседних участков. Такие нелокальные, коллективные движения, которые обычно и имеют в виду, говоря о конформационной динамике белка, могут распространяться от $\sim 10^{-9}$ сек до $\sim 10^0$ сек и более. Именно они и представляют основной интерес при изучении связи между динамикой белка и его функцией.

В каждом конкретном виде фермента механизм, связывающий динамику белка и его функцию, может реализоваться по-своему (см, например, [17]). Вместе с тем, в этом вопросе имеется вполне общая теоретическая задача, состояние которой остается пока дискуссионным. Она заключается в описании динамики белка на всей шкале временных масштабов, относящихся к функции белка. Нетривиальность этой задачи видна уже из ее постановки. Действительно, возьмем N -частичную классическую систему, каждая частица которой имеет m степеней свободы. Множество состояний системы формально можно описать (евклидовым) пространством S размерности $d = Nm$, ассоциируя состояние системы с d -мерным вектором $\vec{R}$, описывающим положение изображающей точки в S . Формально, задав поверхность $\Phi(\vec{R})$ потенциальной энергии системы (энергетический ландшафт системы) над пространством S и выбрав подходящие (для рассматриваемого вопроса) уравнения движения на многообразии $\Phi(\vec{R})$, можно перейти к исследованию динамики системы, ставя и решая соответствующие задачи Коши.

В случае, когда энергетический ландшафт $\Phi(\vec{R})$ представляет собой достаточно низкоразмерное многообразие с относительно небольшим числом экстремумов, исследование задачи удастся провести аналитически или численно в ее исходной постановке (см., например, [12] и цитируемую там литературу). Белковые структуры, однако, не относятся к такому случаю. Типичное число степеней свободы белковой макромолекулы $\sim 10^3$ и, как уже отмечалось выше, в ее внутривуриструктурные движения могут вовлекаться фрагменты разного масштаба — как с малым, так и с большим числом степеней свободы. Выделить в конформационной динамике белка какой-то определенный масштаб движений, который играл бы ведущую роль в функции белка, затруднительно. С другой стороны, многочисленные ограничения на внутривуриструктурные движения, обусловленные неразрывностью белковой полимерной цепи и ее плотной пространственной укладкой, порождают астрономически большое число локальных энергетических минимумов, "долин" и "хребтов" различного масштаба. Энергетический ландшафт белка оказывается столь пересеченным, что его полное описание представляется недостижимым даже при рекордных вычислительных ресурсах. Численное исследование динамики макромолекулярных структур, сопоставимых по сложности с белками, способно дать либо детальное представление о поведении системы в ограниченной области пространства состояний, либо (при сильном огрублении) эскизное представление о поведении системы в целом. В этой связи, поиск моделей, которые были бы релевантны многомасштабной конформаци-

онной динамике белка в контексте ее связи с функцией белка, остается нетривиальной задачей теоретической биофизики.

В данной статье мы приводим результаты исследований весьма специальной математической модели рабочего цикла фермента, которая удерживает многомасштабность конформационной динамики белка уже в силу своей конструкции. Такую математическую модель удастся построить в рамках представления многомерных сильно пересеченных ландшафтов иерархией вложенных друг в друга бассейнов локальных минимумов и аппроксимации динамики системы ультраметрическим случайным процессом. Следует отметить, что ультраметрическое описание динамики белка, хорошо согласующееся с особенностями ферментативной кинетики на широкой шкале временных масштабов, было построено в работах [1–3; 9; 10; 14], а соответствующая этому описанию модель рабочего цикла фермента была анонсирована в [13]. В данной работе мы остаемся в русле этих же идей, но приводим результаты разносторонних исследований ультраметрической модели рабочего цикла фермента, расширяющие представления о регуляции ферментативной активности.

В излагаемом ниже подходе к описанию конформационной динамики белка мы отчасти полемизируем с работой [18], в которой была предложена одна из первых, насколько нам известно, теоретических моделей, связывающая явно конформационную динамику белка и его функцию. Аналогичные в своих принципиальных положениях модели имеются и в существенно более поздних работах, посвященных описанию функциональных циклов различных белков, в частности, так называемых ”молекулярных моторов“ (см, например, [5; 6]). В отношении всех этих работ, работа [18] представляется не только пионерской, но и основополагающей. Сразу подчеркнем, что использованная в [18] идея воспринимать конформационную динамику белка как случайный процесс, развивающийся в пространстве конформационных состояний белка, физически оправдана и конструктивна. Мы используем эту же идею. Однако предложенная в [18] модель, сводящая конформационную динамику белка к одномерной диффузии в потенциальном поле, по-видимому, является слишком упрощенной, лишаящей белковую динамику ее главных особенностей — многомасштабности и многомерности конформационных изменений. Эти особенности представляются важными для работы ферментов, поскольку отсутствие характерного масштаба движений в сочетании с многомерностью пространства состояний может приводить к критическим динамическим режимам. Такие ожидания оказываются оправданными и для ферментативной активности. Мы показываем, что присущая конформационной динамике белка многомасштабность предполагает более богатую связь между динамикой белка и его функцией, порождая, в частности, различные режимы работы цикла с высокой чувствительностью к изменениям управляющих параметров в относительно узкой области.

Статья построена следующим образом. Мы начинаем с общей для [18] и [13] архитектуры модели рабочего цикла фермента и краткого комментария к основным допущениям, сделанным в [18]. Затем, мы излагаем идею многомасштабного описания конформационной динамики белка, описываем ультраметрическую модель рабочего цикла фермента, акцентируя внимание на ее особенностях и отличии от модели [18], приводим результаты наших исследований и даем им физическую интерпретацию.

2. Архитектура модели

Как и в [18], рассматриваемая нами модель работы фермента построена по схеме циклического присоединения и отсоединения низкомолекулярного лиганда к белковой молекуле. В простейшем варианте этой схемы имеется два основных (равновесных) состояния системы белок–лиганд, одно из которых (E_1) относится к белку, связанному с лигандом, а другое (E_2) — к белку без лиганда. Предполагается, что состояния E_1 и E_2 относятся к существенно различным конформациям белковой молекулы. Присоединение лиганда к белку, находящемуся в состоянии E_2 , запускает конформационные перестройки из состояния E_2 к состоянию E_1 . Отсоединение лиганда от белка, достигшего состояния E_1 , запускает конформационные перестройки в обратном направлении — от состояния E_1 к состоянию E_2 . Таким образом, функция белка (связывание лиганда) управляется циклическими конформационными перестройками между состояниями E_1 и E_2 .

Формально, такой рабочий цикл можно описать следующим образом. Пусть пространство B конформационных состояний белковой молекулы задано, x есть конформационное состояние из этого пространства, и равновесные состояния связанного и несвязанного белка ($E_1 \equiv x_1$ и $E_2 \equiv x_2$) лежат в достаточно удаленных друг от друга областях $O_1 \subset B$ и $O_2 \subset B$, соответственно. Пусть $P_1(x, t)$ есть распределение концентраций связанных белковых молекул по конформационным состояниям x в момент времени t и $P_2(x, t)$ есть распределение для несвязанных белковых молекул. Суммарная по всем состояниям x концентрация связанных и несвязанных белков в рабочем цикле сохраняется:

$$\int_B (P_1(x, t) + P_2(x, t)) dx = 1. \quad (2.1)$$

Распределение $P_1(x, t)$ (соответственно, $P_2(x, t)$) можно понимать как переходную функцию случайного процесса $x(t)$, представляющего конформационную динамику связанного (соответственно, несвязанного) белка, т.е. как плотность вероятности обнаружить связанный (соответственно, несвязанный) белок в состоянии x в момент времени t , при условии, что в начальный момент времени ($t = 0$) он находился в некотором наперед заданном состоянии x_0 .

В этих представлениях функциональный цикл описывается системой кинетических уравнений вида:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_1(x, t)}{\partial t} &= [\mathbf{D}_x P_1](x, t) + \lambda_1(x) P_1(x, t) - \lambda_2(x) P_2(x, t) \\ \frac{\partial P_2(x, t)}{\partial t} &= [\mathbf{D}_x P_2](x, t) - \lambda_1(x) P_1(x, t) + \lambda_2(x) P_2(x, t), \end{aligned} \quad (2.2)$$

где формально введенный оператор $\mathbf{D}_x$ определяет случайный процесс, моделирующий конформационную динамику белка, а $\lambda_1(x)$ и $\lambda_2(x)$ есть константы скоростей реакций образования и разрыва связи между белковой молекулой и лигандом, принимающие ненулевые значения только в областях O_1 и O_2 , соответственно. Предполагается, что концентрация низкомолекулярного лиганда в реакционном объеме поддерживается постоянной, т.е. реакции связывания и разрыва мономолекулярные.

Оператор $\mathbf{D}_x$ является ключевым ингредиентом модели, и его явное определение требует каких-то предположений, упрощающих описание энергетического ландшафта белка. В его отношении авторы [18] сделали два принципиальных предположения.

Они предположили, что значимая для функции конформационная динамика существенно низкоразмерная и в простейшем случае может быть представлена одномерной диффузией в потенциале с энергетически выделенным основным состоянием (E_1 и E_2) и большим числом энергетически более высоких квазиравновесных состояний (локальных минимумов), разделенных барьерами. Иначе говоря, в модели [18] энергетический ландшафт белка предполагается низкоразмерным (одномерным) и сильно пересеченным. Далее, для описания такого ландшафта авторы [18] ввели два характерных масштаба, меньший из которых относился к многочисленным барьерам, разделяющим локальные минимумы, а больший — к общей форме потенциала, задающей основное состояние системы. Эти предположения позволили заменить нетривиальную задачу о стохастической динамике на многомерной сильно пересеченной потенциальной поверхности вполне стандартной задачей об одномерной диффузии во внешнем поле и выбрать в качестве основы описания конформационной динамики белка уравнение Фоккера-Планка

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{kT} P(x, t) \frac{\partial U(x)}{\partial x} \right]. \quad (2.3)$$

В уравнении 2.3 $P(x, t)$ есть распределение плотности вероятности вдоль "конформационной прямой" x , $U(x)$ — потенциал с энергетическим минимумом в некотором состоянии x_0 , D — коэффициент "конформационной диффузии", зависящий от температуры T и "вязкости" конформационного пространства, и k — константа Больцмана. Поскольку "вязкость" конформационного пространства связана с преодолением локальных барьеров, разделяющих конформационные состояния, предполагается, что коэффициент конформационной диффузии D зависит от температуры экспоненциально.

Соответственно всем этим допущениям, рабочий цикл фермента описывает система двух кинетических уравнений вида "реакция-диффузия":

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_1(x, t)}{\partial t} &= D \frac{\partial^2 P_1(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{kT} P_1(x, t) \frac{\partial U_1(x)}{\partial x} \right] + \lambda_1(x) P_1(x, t) - \lambda_2(x) P_2(x, t), \\ \frac{\partial P_2(x, t)}{\partial t} &= D \frac{\partial^2 P_2(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{kT} P_2(x, t) \frac{\partial U_2(x)}{\partial x} \right] - \lambda_1(x) P_1(x, t) + \lambda_2(x) P_2(x, t), \end{aligned} \quad (2.4)$$

где $U_1(x)$ и $U_2(x)$ — модельные потенциалы с минимумами в x_1 и x_2 , отвечающими основным состояниям E_1 и E_2 находящимся на "конформационном расстоянии" L . Релаксация к основному состоянию x_1 управляется потенциалом $U_1(x)$, обратная релаксация к состоянию x_2 — потенциалом $U_2(x)$, а присоединение и отсоединение лиганда в состояниях x_1 и x_2 , перебрасывает систему с энергетически более низкого уровня на более высокий согласно значениям $U_1(x)$ и $U_2(x)$ в этих состояниях.

Отталкиваясь от таких представлений и рассмотрев стационарное решение уравнений (2.4) авторы [18] заключили, что время рабочего цикла определяется, главным образом, соотношением $\tau = L/2D$ т.е. временем смещения диффузионного фронта между функционально активными состояниями x_1 и x_2 . Поскольку коэффициент диффузии D , а с ней и величина τ , экспоненциально зависят от T , то в тех случаях, когда лимитирующая стадия ферментативного цикла связана с конформационной динамикой белка, кинетика ферментативной реакции является аррениусовской, т.е. экспоненциально чувствительна к изменениям температуры, и никаких других особенностей в регуляции ферментативной активности не имеется.

Вместе с тем, хорошо известно, что у большинства ферментативных реакций скорость реакции зависит от температуры не только не экспоненциально, но даже и не монотонно, демонстрируя максимумы активности в относительно узком температурном интервале. Весьма показательной в этом отношении является кинетика связывания СО миоглобином, детально исследованная в работах [8; 11]. Примечательно, что эти эксперименты отмечались и в [18], где по этому поводу было заявлено, что модель (2.4) находится в согласии с данными работами. Нам же представляется обратное — модель (2.4) явно противоречит свойствам, установленным в [8; 11].

В экспериментах [8; 11] связанные с СО молекулы миоглобина облучали лазерным импульсом, разрывающим связь СО с гемовым железом в активном центре миоглобина, и затем следили за кинетикой обратного связывания миоглобина с СО на большой шкале временных масштабов ($10^{-7} \div 10^2$ сек) и в широком диапазоне температур от 300К до 60К. Нетрудно видеть, что эксперимент прямо соответствует стадии присоединения лиганда к белку в описанном выше рабочем цикле и, следовательно, должен описываться моделью (2.4). Сопоставим экспериментальные данные со свойствами модели (2.4). В работах [8; 11] были выявлены две особенности кинетики связывания СО миоглобином. Во-первых, выяснилось, что кинетика связывания, контролируемая конформационной динамикой белка, является степенной, а не экспоненциальной, во всем исследованном диапазоне временных масштабов от 10^{-7} сек и до 10^2 сек. Этот факт прямо противоречит предположению о том, что пересеченность ландшафтного рельефа может быть эффективно усреднена и представлена "вязкостью" конформационного пространства. Во-вторых, выяснилось, что с уменьшением температуры от 300К до 200К скорость реакции связывания растет, но при дальнейшем снижении температуры она падает. Такая аномальная температурная зависимость также не согласуется с моделью (2.4). Действительно, общее решение уравнения

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{kT} P(x, t) \frac{\partial U(x)}{\partial x} \right] - \lambda(x) P(x, t), \quad (2.5)$$

как известно, имеет вид

$$P(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} L(x, A_n, B_n, \gamma_n) e^{-\gamma_n D t}, \quad (2.6)$$

где функциональная зависимость $L(x)$ определяется функциями $\lambda(x)$ и $U(x)$, т.е. расположением реакционного стока и формой потенциала, а параметры A_n, B_n, γ_n задаются граничными и начальными условиями. Отсюда нетрудно видеть, что температурное поведение решения (2.6) определяется только зависимостью коэффициента диффузии D от температуры и никакого аномального поведения модели 2.4 тут ожидать не приходится.

Мы полагаем, что модель (2.4) не согласуется с конформационно зависимой кинетикой ферментативного связывания именно в своих основных положениях. Составленные на ее основе представления о конформационной динамике белка представляются нам слишком огрубленными и отчасти неверными. Это же можно отнести и к выводу, сделанному в [18] в отношении регуляции ферментативной активности.

3. Многомасштабное описание конформационной динамики белка

Многомасштабное описание конформационной динамики белка, согласованное с особенностями кинетики связывания СО миоглобином, дано в [1; 10; 14]. Здесь мы изложим только основные идеи этого подхода и поясним некоторые аналитические конструкции, которые используются ниже в нашей модели.

В основе подхода лежит идея иерархического масштабирования сложных энергетических рельефов с помощью эквипотенциальных сечений, подобно тому, как это делается, например, в топографии (см, например, [12]). Применяя этот прием в отношении сильно пересеченного ландшафта, можно построить иерархию вложенных друг в друга "бассейнов" локальных минимумов, в которой каждый бóльший бассейн состоит из меньших бассейнов, каждый из них состоит из еще меньших бассейнов *etc.* Соответственно, в этой картине бассейны локальных минимумов будут разделены иерархией барьеров: бóльшие бассейны — более высокими барьерами, а меньшие бассейны внутри бóльших — более низкими барьерами. Многомасштабность такого представления сохраняется по построению, но исходная метрика многомерного (евклидова) пространства состояний теряется.

Иерархия бассейнов естественным образом представляется в виде ветвящегося дерева, концевые узлы которого (листья дерева) отвечают локальным минимумам ландшафта, а поддеревья — бассейнам. В частности, регулярному дереву с фиксированным индексом ветвления p отвечает самоподобная иерархия бассейнов. В этих представлениях, образом пространства состояний системы является граница дерева (множество концевых узлов $i = 1, 2, \dots$), а образом динамики системы — случайный процесс на границе дерева, представляющий собой скачкообразные переходы между конечными узлами-листьями. Каждое состояние системы i параметризуется ветвью дерева, идущей от корня к границе, и любые два состояния отличаются несовпадающей частью соответствующей пары ветвей (эти ветви расходятся в вершине минимального поддерева, содержащего данные состояния). Такая параметризация отвечает метрике, подчиненной сильному неравенству треугольника $d(i, k) \leq \max(d(i, j), d(j, k))$. В результате, представление многомерного пересеченного ландшафта иерархией вложенных друг в друга бассейнов есть просто замена исходного многомерного пространства состояний с обычной (евклидовой) метрикой ультраметрическим пространством состояний. Заметим, что близкие в евклидовой метрике локальные минимумы могут ультраметрике оказаться далекими, если переход между ними сопряжен с преодолением высокого барьера, и наоборот.

Для регулярного дерева бассейнов с фиксированным индексом ветвления p картина выглядит достаточно просто. Для любых двух состояний (листьев) i и j , имеется одно (и только одно) минимальное поддерево, которому они принадлежат. Уровень иерархии $\gamma(i, j)$, $\gamma = 1, 2, \dots, \gamma_{\max}$, на котором лежит вершина этого поддерева, определяет все важные для описания величины, например, масштаб минимального поддерева-бассейна (в нем $p^{\gamma(i, j)}$ состояний), ультраметрическое расстояние между состояниями i и j (равное $p^{\gamma(i, j)}$), максимальный барьер $H_{\gamma(i, j)}$, лежащий на пути перехода из одного состояния в другое и ассоциируемый либо с переходным состоянием на пути из i в j , либо с характерным временем $\sim (p^{\gamma(i, j)})^\alpha$, $\alpha > 0$, выхода из минимального общего для i и j бассейна. Соответственно, константы скоростей переходов между состояниями определяются только номером уровня $\gamma(i, j)$ в иерархии бассей-

нов, а матрица переходов имеет характерный для *ультраметрического* случайного блуждания блочно-иерархический вид (см. рисунок 3.1).

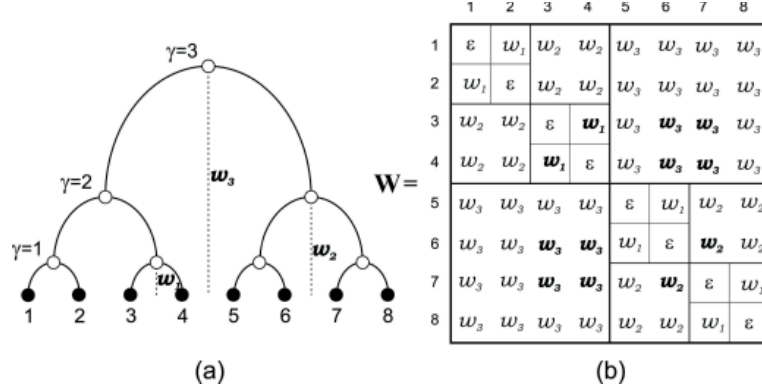


Рис. 3.1. (а) Регулярно-ветвящееся 2-адическое трехуровневое дерево бассейнов: $\gamma = 1, 2, 3$ — уровни иерархии, w_γ — константы переходов между листьями на границе дерева. (б) Блочно-иерархическая структура матрицы переходов между листьями

Отметим, что блочно-иерархический вид матрицы переходов сохраняется и для нерегулярно ветвящегося дерева, хотя в этом случае блоки, принадлежащие одному и тому же уровню γ , могут иметь разные размеры.

Опишем теперь случайное блуждание на границе дерева. Пусть $P(i, t|i_0, 0)$ (для краткости $P(i, t)$) есть переходная функция процесса, т.е. вероятность найти систему в состоянии i в момент времени t при условии, что в начальный момент времени она находилась в состоянии i_0 . Переходная функция определяет вероятностную меру всех траекторий длины t , стартующих из состояния i_0 и заканчивающихся в i . Подчиним переходную функцию $P(i, t)$ основному кинетическому уравнению (уравнению Колмогорова-Феллера) вида

$$\frac{\partial P(i, t)}{\partial t} = \sum_{i \neq j} w(i|j)P(j, t) - \sum_{i \neq j} w(j|i)P(i, t) \quad (3.1)$$

с начальным условием $P(i, 0) = \delta(i - i_0)$, где $w(i|j)$ — константа перехода из состояния j в состояние i . Полагая, что характерное время выхода из бассейна растет с ростом масштаба бассейна, и что при переходе в бассейн из другого бассейна система с равной вероятностью может оказаться в любом из его состояний, запишем константу перехода в виде $w(i|j) = w_0 p^{-(\alpha+1)\gamma(i,j)}$, где w_0 — размерный коэффициент. Уравнение (3.1) тогда примет вид

$$\frac{\partial P(i, t)}{\partial t} = \sum_{i \neq j} w(|i - j|_p)P(j, t) - \sum_{i \neq j} w(|i - j|_p)P(i, t) \quad (3.2)$$

где $|i - j|_p = p^{\gamma(i,j)}$ есть ультраметрическое расстояние между состояниями i и j .

Непрерывный предел для описанной выше дискретной модели (см. [2; 14]) приводит к p -адическому уравнению *ультраметрической диффузии*. (Для ознакомления с основами p -адического анализа можно обратиться, например, к [16]). Схема такого перехода выглядит следующим образом. Каждому листу i на границе дерева ставится в соответствие рациональное число x :

$$i \longleftrightarrow x = p^{-r} (a_0 + a_1 p + \dots + a_{m-1} p^{m-1}), \quad (3.3)$$

где p — простое число (индекс ветвления дерева), $0 \leq a_k \leq p-1$, $k = 0, 1, \dots, m-1$ и r — некоторое целое число. На множестве рациональных чисел $\{x\}$ вида (3.3) вводится p -адическая норма $|\cdot|_p$, определяемая как

$$|x|_p = |p^{-r} (a_0 + a_1 p + \dots + a_s p^s \dots + a_{m-1} p^{m-1})|_p = p^r$$

если $a_0 = a_1 = \dots = a_{s-1} = 0$ и $a_s \neq 0$. Тогда в пределе $m \rightarrow \infty$ при фиксированном r множество $\{x\}$, каждый элемент которого представляется бесконечным рядом

$$x = p^{-r} \sum_{i=0}^{\infty} a_i p^i, \quad (3.4)$$

сходящимся по p -адической норме $|\cdot|_p$, становится подмножеством B_r (p -адическим шаром радиуса p^r) поля p -адических чисел $\mathbb{Q}_p$. В пределе $r \rightarrow \infty$ множество B_r переходит в поле $\mathbb{Q}_p$. Любой элемент $\mathbb{Q}_p$ однозначно представим в виде (3.4). На поле $\mathbb{Q}_p$ можно ввести метрику $d(x, y) = |x - y|_p$, которая превращает $\mathbb{Q}_p$ в полное, сепарабельное, вполне несвязное, локально компактное ультраметрическое пространство.

В результате двойного предельного перехода $\{m \rightarrow \infty, r \rightarrow \infty\}$ состояния системы x становятся элементами поля p -адических чисел $\mathbb{Q}_p$, а уравнение (3.2) переходит в p -адическое уравнение Колмогорова–Феллера для однородного стационарного марковского процесса на $\mathbb{Q}_p$:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \int_{\mathbb{Q}_p} w(|x - y|_p) (P(y, t) - P(x, t)) d_p y. \quad (3.5)$$

В уравнении (3.5), величина

$$w(|x - y|_p) = \lim_{t' \rightarrow t} \frac{P(y, t' | x, t)}{|t' - t|},$$

где $P(y, t' | x, t) = P(|x - y|_p, t' - t)$ — переходная функция процесса, задает константы переходов между состояниями x и y .

Заметим, что функция $w(|x - y|_p)$ может иметь разный вид, т.е. уравнение (3.5) описывает семейство ультраметрических случайных процессов. Конкретный вид функции $w(|x - y|_p)$ в той или иной модели выбирается из соображений согласования свойств модели со свойствами рассматриваемой системы. В случае конформационной динамики белка выбор функции $w(|x - y|_p)$ согласован с особенностями кинетики связывания СО миоглобином. Как было показано в [9], этому требованию отвечает функция вида $w(|x - y|_p) = |x - y|_p^{-(\alpha+1)}$, где параметр $\alpha > 0$ имеет смысл обратной температуры ($\alpha \sim T_0/T$, T_0 некоторая реперная температура). Таким образом, в рассматриваемой нами ультраметрической модели рабочего цикла фермента конформационная динамика белка описывается не уравнением Фоккера–Планка, как в [18], а p -адическим уравнением ультраметрической диффузии вида

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \int_{B_r} \frac{P(y, t) - P(x, t)}{|y - x|_p^{\alpha+1}} d_p y, \quad (3.6)$$

где $B_r \subset \mathbb{Q}_p$ — ультраметрический шар, задающий пространство конформационных состояний белка, и $d_p y$ — мера интегрирования (мера Хаара) на $\mathbb{Q}_p$. Многомасштабность конформационной динамики белка в таком описании удерживается по

построению. Примечательно, что функция переходов вида $w(|x - y|_p) = |x - y|_p^{-(\alpha+1)}$ отвечает самоподобному энергетическому ландшафту, причем такому, на котором барьеры, разделяющие бассейны, растут с уровнем иерархии линейно. Заметим, что масштабное самоподобие может иметь вполне общее отношение к функциональным макромолекулярным структурам типа молекулярных машин (см., например, [4; 7]).

4. p -Адитивная модель рабочего цикла и предельные режимы

Переопределим модель (2.4) рабочего цикла фермента, рассматривая уравнение (3.6) как основу многомасштабного описания конформационной динамики белка. Пусть пространство конформационных состояний белка, на котором осуществляется рабочий цикл, есть ультраметрический шар $B_r = \{x \in \mathbb{Q}_p : |x|_p \leq p^r\}$ радиуса p^r , $r \gg 1$. В этом случае действие оператора $\mathbf{D}_x$ на функцию распределения $P(x, t)$ задается уравнением

$$[\mathbf{D}_x P](x, t) = \int_{B_r} \frac{P(y, t) - P(x, t)}{|y - x|_p^{\alpha+1}} d_p y$$

и, согласно модели (2.2), полный цикл описывается системой уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_1(x, t)}{\partial t} &= \int_{B_r} \frac{P(y, t) - P(x, t)}{|y - x|_p^{\alpha+1}} d_p y + \lambda_1 \Omega(|x|_p) P_2(x, t) - \lambda_2 \Omega(|x - a|_p) P_1(x, t) \\ \frac{\partial P_2(x, t)}{\partial t} &= \int_{B_r} \frac{P(y, t) - P(x, t)}{|y - x|_p^{\alpha+1}} d_p y - \lambda_1 \Omega(|x|_p) P_2(x, t) + \lambda_2 \Omega(|x - a|_p) P_1(x, t), \end{aligned} \quad (4.1)$$

где распределения $P_1(x, t)$ и $P_2(x, t)$ относятся соответственно к связанному и несвязанному состояниям белка, λ_1 и λ_2 есть константы реакции образования и разрыва химической связи между лигандом и белком, а функция $\Omega(|z|_p)$

$$\Omega(|z|_p) \equiv \begin{cases} 1, & |z|_p \leq 1 \\ 0, & |z|_p > 1, \end{cases}$$

есть индикатор ультраметрического шара единичного радиуса с центром в точке $z = 0$. Соответственно, ультраметрический шар $\Omega(|x|_p)$ с центром в точке $x = 0$ определяет область, в которой белок связывается с лигандом, т.е. область O_1 , ультраметрический шар $\Omega(|x - a|_p)$ с центром в точке $x = a$ определяет область O_2 , в которой белок освобождается от лиганда. Расстояние $|a|_p = p^m$ между этими областями задается параметром $0 < m < r$. Отметим, что тот факт, что области O_1 и O_2 в описании выше представлены ультраметрическими шарами единичного радиуса, не существенен. Важно лишь то, что эти области малы в сравнении с B_r .

Метод решения задач Коши для системы уравнений (4.1) обсуждался в [13]. Явно выписать полное решение тут не удастся, однако для наших целей достаточно иметь стационарное решение $P_{1st}(x)$ уравнений (4.1) и оценку характерного времени τ осуществления одного рабочего цикла. Стационарное решение уравнений (4.1)

выписывается явно:

$$\begin{aligned} P_{1st}(x) &= p^{-r} \cdot \frac{\lambda_1 + \lambda_1 \lambda_2 \left(I(0) - I(|a|_p) + I(|x|_p) - I(|x - a|_p) \right)}{\lambda_1 + \lambda_2 + 2\lambda_1 \lambda_2 \left(I(0) - I(|a|_p) \right)} \\ P_{2st}(x) &= p^{-r} \cdot \frac{\lambda_2 + \lambda_1 \lambda_2 \left(I(0) - I(|a|_p) - I(|x|_p) + I(|x - a|_p) \right)}{\lambda_1 + \lambda_2 + 2\lambda_1 \lambda_2 \left(I(0) - I(|a|_p) \right)}, \end{aligned} \quad (4.2)$$

где

$$\begin{aligned} I(|x|_p) &= \sum_{i=n}^{r-1} p^{-i} (1 - p^{-1}) \left(p^{-\alpha i} - (1 - p^{-1}) \frac{p^{-\alpha r}}{1 - p^{-\alpha-1}} \right)^{-1} - \\ &- \left(p^{\alpha(1-n)} - (1 - p^{-1}) \frac{p^{-\alpha r}}{1 - p^{-\alpha-1}} \right)^{-1} p^{-n} (1 - \Omega(|x|_p)) \end{aligned} \quad (4.3)$$

и n определяется из условия $|x|_p = p^n$. Отсюда непосредственно вычисляется стационарная концентрация $S(\alpha, \lambda_1, \lambda_2, m)$ всех белковых молекул, находящихся в связанном состоянии:

$$S(\alpha, \lambda_1, \lambda_2, m) = \int_{B_r} P_{1st}(x) d_p x = \frac{\lambda_1 + \lambda_1 \lambda_2 \cdot [I(0) - I(p^m)]}{\lambda_1 + \lambda_2 + 2\lambda_1 \lambda_2 \cdot [I(0) - I(p^m)]}. \quad (4.4)$$

Поверхность $S(\alpha, \lambda_1, \lambda_2, m)$ над пространством параметров мы называем ландшафтом стационарных состояний рабочего цикла. Особенности этого ландшафта описаны в следующем разделе.

Что касается характерного времени τ , то оно определяется наиболее медленными стадиями рабочего цикла. В одних случаях ими могут оказаться стадии образования и разрыва химической связи между лигандом и белком, и такой режим работы цикла мы будем называть режимом кинетического контроля. В других случаях наиболее медленная стадия может определяться конформационными перестройками белка, и этот режим естественно назвать режимом диффузионного контроля. В этом смысле особенности распространения фронта ультраметрической диффузии оказываются важными для работы цикла.

Действительно, рассмотрим решение $P(x, t)$ задачи Коши для уравнения (3.6) с начальным условием $P(x, 0) = \Omega(|x|_p)$. Это решение имеет вид (см. [2; 9; 10]):

$$\begin{aligned} P(x, t) &= (1 - p^{-1}) |x|_p^{-1} \sum_{\gamma=0}^{+\infty} p^{-\gamma} \Omega \left(\frac{p^{-\gamma}}{|x|_p} \right) \exp \left\{ \frac{p^{-\alpha \gamma}}{|x|_p^\alpha} \Gamma_p(-\alpha) w_0 t \right\} - \\ &- |x|_p^{-1} \Omega \left(\frac{p}{|x|_p} \right) \exp \left\{ \frac{p^\alpha}{|x|_p^\alpha} \Gamma_p(-\alpha) w_0 t \right\}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Зная распределение $P(x, t)$, нетрудно вычислить среднее ультраметрическое расстояние

$$\delta(t) = \int_{\mathbb{Q}_p} |x|_p P(x, t) d_p x, \quad (4.6)$$

на которое переместится диффузионный фронт к моменту времени t , и убедиться, что интеграл (4.6) конечен только при $\alpha > 1$. При $\alpha \leq 1$ интеграл (4.6) расходится и

величина $\delta(t)$ не определена. Таким образом, в отличие от обычной диффузии, о скорости распространения фронта ультраметрической диффузии можно говорить только когда $\alpha > 1$, т.е. когда диффузия "медленная". Диффузионно-контролируемый режим работы цикла соответствует именно этим условиям, и для оценки времени τ здесь можно использовать простое соотношение $\delta(\tau) = p^m$.

В противоположность этому, при $1 \geq \alpha > 0$ ультраметрическая диффузия протекает настолько быстро, что значения $P(x, t)$ почти сразу оказываются не малы во всех точках пространства состояний. Как показано в [3], в этом режиме мера невозвратных (в неограниченном пространстве) траекторий оказывается ненулевой и при $\alpha \rightarrow 0$ стремится к 1. Делокализация диффузионного фронта происходит скачкообразно, в точке $\alpha = 1$, и это одна из важных особенностей ультраметрической диффузии.

Если пространство состояний ограничено, как в модели (4.1), то невозвратных траекторий, естественно, нет, и быстрая диффузия проявляет себя в том, что типичные траектории вначале уходят в удаленные области пространства состояний и лишь затем возвращаются в близлежащие области. Для моделей типа реакция-диффузия такая картина физически отвечает быстрому перемешиванию. В этих условиях и возникает кинетически-контролируемый режим работы цикла. Отметим, что поскольку полное пространство конформационных состояний белка B_r много больше функционально активных областей O_1 и O_2 , то при быстром перемешивании на всем B_r стационарные распределения $P_{1st}(x)$ и $P_{2st}(x)$ будут почти везде однородными и концентрация связанных и не связанных белковых молекул будет практически одинаковой

$$\int_{B_r} P_{1st}(x) dx \approx \int_{B_r} P_{2st}(x) dx$$

даже при $\lambda_1 \neq \lambda_2$. Более детально такие режимы мы тоже обсудим ниже.

Существование определенного значения α , при котором фронт ультраметрической диффузии скачкообразно делокализуется, предполагает, что переход от режима диффузионного контроля к режиму кинетического контроля тоже может происходить в относительно узкой области значений параметров системы. В этом состоит одно из существенных отличий модели (4.1) от модели (2.4) из работы [18].

5. Ландшафт стационарных состояний рабочего цикла

Отклик стационарной концентрации S связанных белковых молекул на изменения параметров α , λ_1 , λ_2 и m позволяет составить представление о регуляции ферментативной активности при различных воздействиях на белковую молекулу или окружающую среду. Действительно, параметр α задает константы конформационных переходов, $w(x|y) = |x - y|_p^{\alpha+1}$ (см. уравнение (3.6)) и в этом смысле управляет конформационной подвижностью белковой молекулы. Большим значениям α соответствует более низкая конформационная подвижность белковой молекулы, что может иметь место, например, при понижении температуры, изменении вязкости среды, ее ионного состава, погружении белковой молекулы в клеточную мембрану, или ее нагружении высокомолекулярными соединениями. Изменение констант образования и разрыва химической связи между лигандом и белком (λ_1 и λ_2), помимо стандартной температурной зависимости, может быть обусловлено, например, химическими модификациями лиганда или центра связывания в белке. Наконец, параметр

m устанавливает, как далеко друг от друга расположены те функционально активные конформационные состояния (O_1 и O_2), в которых белок связывается с лигандом и освобождается от него. Выбирая то или иное m , мы задаем глубину конформационных перестроек, которая требуется для осуществления рабочего цикла. Величина m , образно говоря, задает "рабочий ход" белковой машины и может зависеть, например, от пути химического превращения исходного субстрата в конечный продукт.

Таким образом, все параметры модели (4.1) имеют вполне прозрачную физическую интерпретацию.

Обсудим теперь чувствительность стационарного состояния $S(\alpha, \lambda_1, \lambda_2)$ к изменению параметров рабочего цикла и, прежде всего, параметра α , управляющего конформационной подвижностью белка. Как уже отмечалось выше, важно, в какой области значений параметра α работает фермент — выше или ниже точки делокализации диффузионного фронта. Это наглядно демонстрирует поведение величины $\Delta I = I(0) - I(p^m)$ в выражении (4.4) от α , показанное на рисунке 5.1.

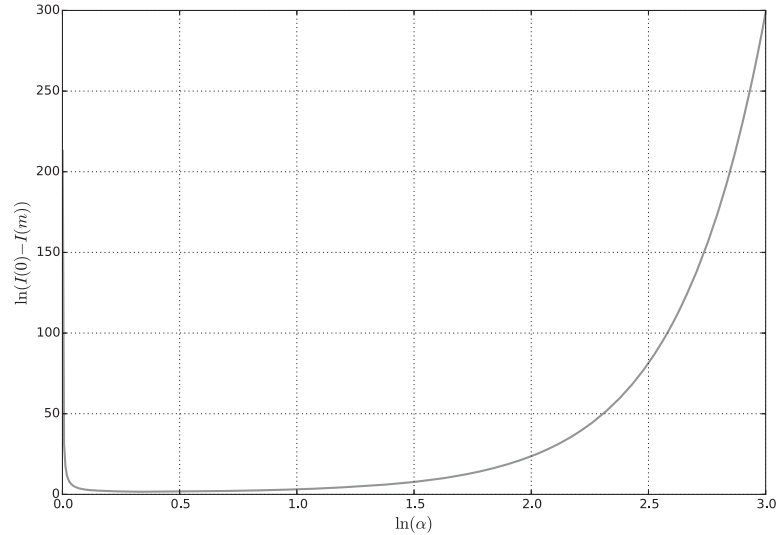


Рис. 5.1. Поведение величины $\Delta I = I(0) - I(p^m)$ из выражения (4.4) в зависимости от α

Отметим, прежде всего, что в той области значений α , в которой диффузионный фронт локализован ($\alpha > 1$), величина $\Delta I(m, \alpha)$ растет с ростом α , причем при достаточно больших α растет экспоненциально, как $\Delta I(m, \alpha) \sim e^{k(m)\alpha}$, где $k(m)$ зависит от m линейно. Действительно, используя выражение (4.3) и приняв во внимание, что в рассматриваемом случае $m \geq 1$ и $(1 - \Omega(p^m)) = 1$, запишем явное выражение для $\Delta I(m, \alpha)$

$$\Delta I(m, \alpha) = \sum_{i=0}^{m-1} p^{-i} (1 - p^{-1}) \left(p^{-\alpha i} - (1 - p^{-1}) \frac{p^{-\alpha r}}{1 - p^{-\alpha-1}} \right)^{-1} - \left(p^{\alpha} - (1 - p^{-1}) \frac{p^{-\alpha r}}{1 - p^{-\alpha-1}} \right)^{-1} + \left(p^{\alpha(1-m)} - (1 - p^{-1}) \frac{p^{-\alpha r}}{1 - p^{-\alpha-1}} \right)^{-1} p^{-m}.$$

Отсюда для больших α получаем

$$\Delta I(m, \alpha) \xrightarrow{\alpha \gg 1} p^{(m-1)(\alpha-1)}.$$

Из выражения выше нетрудно также увидеть, что величина $\Delta I(m, \alpha)$ расходится и при $\alpha \rightarrow 0$.

Между этими крайними значениями α , величина $\Delta I(m, \alpha)$ ведет себя монотонно. Там, где диффузионный фронт делокализован ($\alpha < 1$), величина $\Delta I(m, \alpha)$ мала почти везде и для этих значений из выражения (4.4) имеем

$$S(\alpha, \lambda_1, \lambda_2) \approx \frac{\lambda_1}{\lambda_1 + \lambda_2},$$

что и соответствует кинетически-контролируемому режиму работы цикла. В этом режиме стационарные состояния S нечувствительны к изменениям α , но чувствительны к изменениям параметров λ_1 и λ_2 . В режиме кинетического контроля стационарное состояние симметрично ($S(\alpha, \lambda_1, \lambda_2, m) = 0,5$) только при $\lambda_1 = \lambda_2$.

Примечательно, что режим кинетического контроля сохраняется практически до значений $\alpha \sim 1$ и лишь при $\alpha > 1$, когда диффузионный фронт становится локализованным, вклад $\Delta I(m, \alpha)$ в $S(\alpha, \lambda_1, \lambda_2, m)$ становится существенным. При достаточно больших α этот вклад оказывается доминирующим, чувствительность к изменениям λ_1 и λ_2 теряется, рабочий цикл переходит в диффузионно-контролируемый режим и стационарное состояние восстанавливает симметрию ($S(\alpha, \lambda_1, \lambda_2, m) \sim 0,5$) даже при $\lambda_1 \neq \lambda_2$. Симметрия стационарного состояния в этом режиме обусловлена просто тем, что работу цикла тут лимитирует время прохождения диффузионного фронта между областями O_1 и O_2 , а в прямом и обратном направлениях это время одинаковое. Заметим, что в диффузионно-контролируемом режиме характерный масштаб той области конформационного пространства, в которой осуществляется рабочий цикл, определяется "рабочим ходом" цикла, т.е. ультраметрическим расстоянием r^m . При этом, большая часть конформационного пространства B_r не используется и остается в в этом режиме "темной".

Как уже отмечалось, интерес представляет и тот факт, что $\Delta I(m, \alpha) \rightarrow \infty$ не только в "низкотемпературном пределе" ($\alpha \rightarrow \infty$) но и в "высокотемпературном пределе" ($\alpha \rightarrow 0$). При достаточно малых α вклад $\Delta I(m, \alpha)$ в выражении (4.4) тоже оказывается доминирующим, стационарное решение $S(\alpha, \lambda_1, \lambda_2, m)$ теряет чувствительность к изменениям λ_1 и λ_2 и состояние становится симметричным (см. рисунок 5.2).

Следует, однако, понимать принципиальное отличие тех причин, из-за которых возникает симметричное состояние при низкой и высокой конформационной подвижности белка. При низкой конформационной подвижности причина в диффузионно-контролируемом режиме. При высокой конформационной подвижности, напротив, имеет место быстрое перемешивание — типичные траектории вначале уходят в удаленные области пространства состояний и лишь затем возвращаются в близлежащие области. При достаточно малых значениях α быстрое перемешивание устанавливается на всем B_r и стационарное распределение $P_{1st}(x)$ становится однородным почти на всем пространстве за исключением функционально активных областей O_1 и O_2 , в которых непосредственно действуют "химический сток" и "химический источник". Поскольку полное пространство состояний B_r много больше области рабочего хода цикла, оно и определяет основной вклад в S , и симметрия стационарного состояния восстанавливается просто из-за того, что мера таких состояний для связанных и несвязанных белковых молекул одинакова. Важно подчеркнуть, что в подобных высокотемпературных режимах важную роль играет именно та часть конформаци-

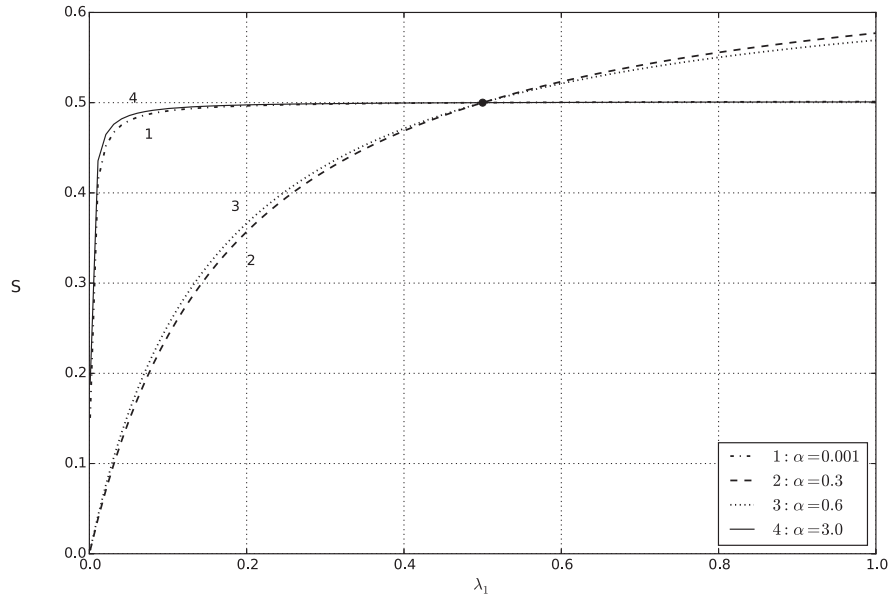


Рис. 5.2. Чувствительность стационарной концентрации S к изменению параметров λ_1 и λ_2 в режимах сильного перемешивания (кривая 1), кинетического контроля (кривые 2 и 3) и диффузионного контроля (кривая 4)

онного подпространства, которая во всех других режимах остается "темной". По мере увеличения конформационной подвижности и смещения от значения $\alpha = 1$ к значению $\alpha = 0$ (см. рисунок 5.2), цикл вначале остается в зоне кинетического контроля, и работа цикла чувствительна к изменениям λ_1 и λ_2 . Но затем, по мере распространения быстрого перемешивания на все B_r , цикл теряет чувствительность к изменению параметров λ_1 и λ_2 и восстанавливает свое симметричное состояние.

Обсудим теперь, как стационарные состояния рабочего цикла зависят от соотношения $q = \lambda_1 \setminus \lambda_2$ констант образования связи и ее разрыва в различных режимах работы цикла. На рисунках 5.3 и 5.4 показан ландшафт стационарных состояний $S(\lambda_1, \lambda_2)$ для двух значений параметра α , соответствующих медленной диффузии ($\alpha = 3$) с локализованным диффузионным фронтом и быстрой диффузии ($\alpha = 0.75$) с делокализованным фронтом.

При $q = 1$, как уже отмечалось выше, стационарное состояние симметрично во всех режимах. Это своеобразная "мертвая точка" рабочего цикла.

В режиме диффузионного контроля ($\alpha = 3$, рисунок 5.3) изменение параметров λ_1 или λ_2 не оказывает заметного влияния на стационарную концентрацию S , за исключением далеких от "мертвой точки" окрестностей $\lambda_1 \ll 1$ и $\lambda_2 \ll 1$, где значения этих параметров столь малы, что они лимитируют работу цикла даже при медленной диффузии. Всюду вне этих малых окрестностей цикл работает в диффузионно-контролируемом режиме, стационарная концентрация близка к значению $S = 0,5$ и симметричное состояние сохраняется для всех значений λ_1 или λ_2 .

При делокализации диффузионного фронта ($\alpha = 0.75$, рисунок 5.4), стационарное состояние S уже становится чувствительным и к изменениям λ_1 и λ_2 . При этом, если диффузия не слишком быстрая (значения α не слишком малы), то сохраняется чувствительность и к изменениям параметра α . Это демонстрируют зависимости

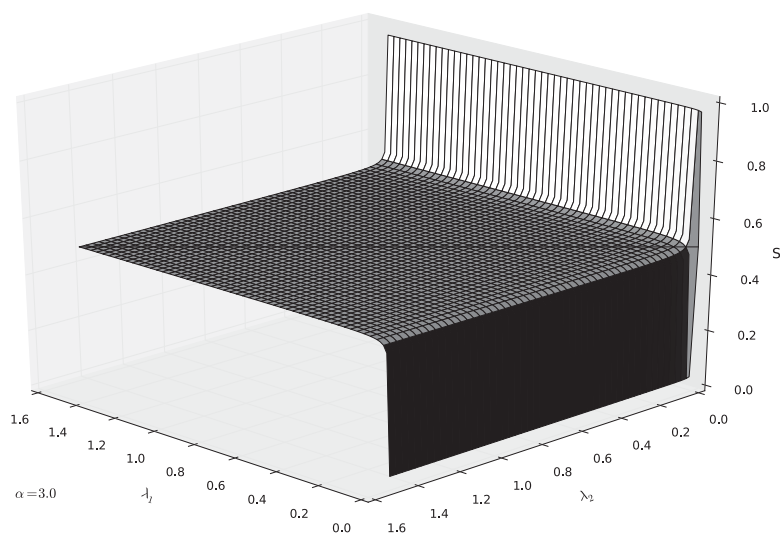


Рис. 5.3. 3-D представление ландшафта ферментативной активности при низкой конформационной подвижности: $\alpha = 3$. Значения других параметров следующие:
 $p = 2$, $r = 7$, $m = 5$

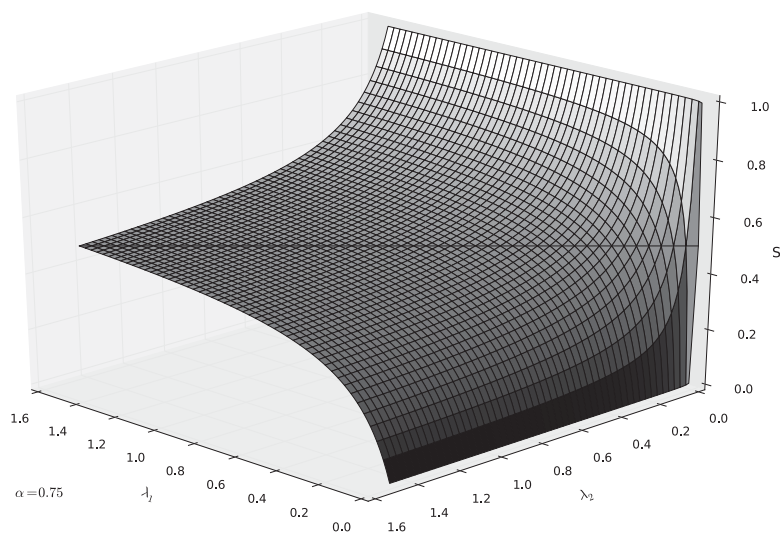


Рис. 5.4. 3-D представление ландшафта ферментативной активности при "быстрой" диффузии: $\alpha = 0.75$. Значения других параметров те же, что и для рисунка 5.3

стационарных состояний S от α при фиксированных значениях $\lambda_1 \neq \lambda_2$, показанные на рисунке 5.5.

Нетрудно заметить, что наиболее пригодная для регуляции ферментативной активности область расположена вблизи точки делокализации диффузионного фронта ($\alpha = 1$), при этом, что важно, работа цикла наиболее чувствительна к изменениям параметров в достаточно небольшой области, расположенной немногим выше точки делокализации $\alpha = 1$.

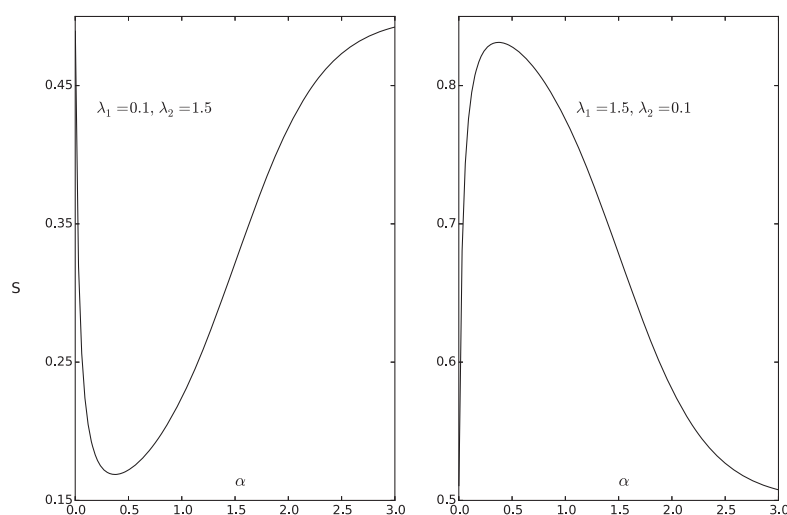


Рис. 5.5. Зависимость стационарной концентрации S от α в окрестности критической точки делокализации диффузионного фронта $\alpha = 1$ при фиксированных значениях $\lambda_1 \neq \lambda_2$

6. Заключение

Тот факт, что ферментативная активность многих белков нетривиальным образом зависит от внешних условий, известен давно. В ряде случаев ферментативная активность существенно меняется уже при небольших изменениях температуры, вязкости среды или ее ионного состава. В других случаях она, напротив, мало чувствительна к таким изменениям. У одних белков ферментативная активность монотонно растет с ростом температуры, у других, наоборот, монотонно падает, а у третьих — проходит через некоторый максимум. Действуя на конформационную подвижность белковой молекулы в одном и том же направлении, например, понижая температуру или нагружая белковую глобулу высокомолекулярными соединениями, можно получить прямо противоположные отклики — в одних случаях ферментативная активность может вырасти, а в других — резко упасть.

Столь различная реакция белков на однотипные воздействия сформировала устойчивое мнение, что регуляция ферментативной активности возможна только в узкой области значений соответствующих параметров. При этом, при одних и тех же воздействиях у разных белков ферментативная активность может меняться в прямо противоположных направлениях. Это никак не отражают относительно простые, низкоразмерные модели рабочего цикла фермента типа реакция-диффузия, подобные предложенной в [18]. У таких моделей, разнонаправленные отклики при однонаправленных воздействиях никак не следуют из свойств моделей, выглядят ”загадочно“ и могут быть оправданы только индивидуальностью тех или иных белков.

В данной статье мы показываем, что противоречивые, на первый взгляд, регуляторные свойства ферментов, на самом деле, есть следствие универсальной сложности конформационной динамики белка, обусловленной энергетическим ландшафтом белка и пространством его конформационных состояний. Ультраметрические моде-

ли, прежде всего, отражают именно эту универсальную сложность. Ультраметрическое описание рабочего цикла фермента удерживает многомасштабность конформационной динамики белка и экспоненциально большую емкость его пространства состояний уже по своей конструкции. Корни такого описания лежат в представлении многомерных сильно пересеченных ландшафтов иерархией вложенных друг в друга бассейнов локальных минимумов и аппроксимации динамики белка ультраметрическим случайным процессом. Важно подчеркнуть и то, что использованное нами ультраметрическое описание динамики белка, развитое ранее в работах [1–3; 9; 10; 13; 14], согласуется с реально наблюдаемыми особенностями конформационно контролируемой кинетики ферментативной реакции.

Ультраметрическая модель рабочего цикла фермента, анонсированная в [13] и детально рассмотренная нами в данной работе, позволяет увидеть различные пути регуляции ферментативной активности, остававшиеся скрытыми для стандартных низкоразмерных моделей типа реакция-диффузия. Важнейшей особенностью ультраметрической модели является существование в ней условий делокализации диффузионного фронта, что, заметим, характерно для случайных блужданий в многомерных пространствах. Эти условия устанавливают своеобразную границу между двумя режимами работы цикла — диффузионно-контролируемым режимом, возникающим при низкой конформационной подвижности, и кинетически-контролируемым режимом, возникающим при высокой конформационной подвижности. Существование порогового уровня конформационной подвижности, при которой фронт ультраметрической диффузии скачкообразно делокализуется, приводит к тому, что переход между режимами диффузионного контроля и кинетического контроля осуществляется в достаточно узкой области значений управляющих параметров, и именно в этой области чувствительность рабочего цикла фермента к изменению внешних условий оказывается наиболее высокой. Еще одной важной особенностью работы цикла является то, что при делокализации диффузионного фронта в работу цикла может вовлекаться все потенциально доступное пространство конформационных состояний белка и регуляторные механизмы ферментативной активности блокируются.

В целом, однонаправленное изменение внешних условий может по-разному влиять на ферментативную активность — все зависит от того, в каком режиме работает цикл. При этом важнейшее значение в регуляции ферментативной активности имеет многомасштабность конформационной динамики белка и комбинаторно большая емкость пространства его конформационных состояний. Ультраметрическая модель ферментативного рабочего цикла отражает игру этих факторов и позволяет увидеть гораздо более богатую картину регуляторных возможностей, в которой индивидуальная, на первый взгляд, реакция ферментов на однотипные изменения внешних условий на самом деле обусловлена универсальными особенностями динамики белка.

Список литературы

- [1] *Avetisov V. A., Bikulov A. K.* Protein ultrametricity and spectral diffusion in deeply frozen proteins // *Physical Reviews and Letters*, 2008, **3**, pp. 387–396.

- [2] *Avetisov V. A., Bikulov A. K., Kozyrev S. V.* Application of p -adic analysis to model of breaking of replica symmetry // *J. Phys. A: Math. Gen.*, 1999, **32**, pp. 8785–8791.
- [3] *Avetisov V. A., Bikulov A. K., Zubarev A. P.* First passage time distribution and the number of returns for ultrametric random walks // *J. Phys. A: Math Theor.*, 2009, **42**, pp. 08503–08521.
- [4] *Avetisov V. A., Nechaev S. K.* Fractal polymer globules: A new Insight on pre-biological evolution // *Geochemistry International*, 2014, **52** (13), pp. 1235–1242.
- [5] *Chowdhury D.* Modeling Stochastic Kinetics of Molecular Machines at Multiple Levels: From Molecules to Modules // *Biophysical Journal*, 2013, **104**, pp. 2331–2341.
- [6] *Chowdhury D.* Stochastic mechano-chemical kinetics of molecular motors: A multidisciplinary enterprise from a physicist’s perspective // *Physics Reports*, 2013, **529**, pp. 1–197.
- [7] *Avetisov V. A. [et al.]* Fractal globules: a new approach to artificial molecular machines // *Biophysical journal*, 2014, **107**, pp. 2361–2368.
- [8] *Steinbach P. J. [et al.]* Ligand binding to heme proteins: connections between dynamics and function // *Biochemistry*, 1991, **30**, pp. 3988–4001.
- [9] *Avetisov V. A. [et al.]* p -Adic description of characteristic relaxation in complex systems // *J. Phys. A: Math. Gen.*, 2003, **35**, pp. 4239–4246.
- [10] *Avetisov V. A. [et al.]* p -Adic models of ultrametric diffusion constrained by hierarchical energy landscapes // *J. Phys. A: Math. Gen.*, 2002, **35**, pp. 177–189.
- [11] *Ansary A. [et al.]* Protein states and proteinquakes // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 1985, **82**, pp. 5000–5003.
- [12] *Wales D.* Energy Landscapes. Applications to Clusters, Biomolecules and Glasses // Cambridge University Press, 2004, 681 pp.
- [13] *Аветисов В. А., Бикулов А. Х., Зубарев А. П.* О математическом моделировании молекулярных ”наномашин“ // *Вестник Самарского государственного технического университета, сер. физ-мат науки*, 2011, **1** (22), с. 9–15.
- [14] *Аветисов В. А., Бикулов А. Х., Зубарев А. П.* Ультраметрическое случайное блуждание и динамика белковых молекул // *Труды Математического института им В. А. Стеклова*, 2014, **285**, с. 3–25.
- [15] *Блюменфельд Л. А.* Проблемы биологической физики // М.: Наука, 1977, 336 с.
- [16] *Владимиров В. С., Волович И. В., Зеленов Е. И.* -Адический анализ и математическая физика // М.: Наука, 1994, 352 с.
- [17] *Ленинджер А.* Основы биохимии: в 3-х т. // М.: Мир, 1985, 367 с.
- [18] *Шайтан К. В., Рубин А. Б.* Конформационная динамика белков и простейшие молекулярные ”машины“ // *Биофизика*, 1982, **26**, с. 315–325.

PROTEIN CONFORMATIONAL DYNAMICS ROLE IN THE REGULATION OF ENZYMATIC ACTIVITY

V. A. Avetisov^{1,2}, E. V. Borshcheva¹

¹ *Department of Applied Mathematics at National Research University
“Higher School of Economics”*

² *Semenov Institute of Chemical Physics of Russian Academy of Sciences*

vladik.avetisov@gmail.com, katbr@yandex.ru

Received 29.05.2017

In this paper, we present the results of comprehensive studies of an ultrametric mathematical model for the protein operation cycle and give their physical interpretation. The results extend a familiar view on regulation of enzymatic activity. The model includes representation of a multidimensional rugged energy landscape of a protein by a hierarchy of nested basins of local minima and approximation of protein dynamics with an ultrametric random walk. In contrast to random walk in low-dimensional Euclidean space, the ultrametric model is relevant to multiscale protein conformational dynamics. The ultrametric model is also consistent with observed enzyme kinetics features. We show that the properties of regulatory of enzymes, contradictory at first glance, are a result of the universal complexity of protein conformational dynamics specified by protein energy landscape. The ultrametric model allows to see different ways to regulate enzymatic activity.

ОБРАЗОВАНИЕ ВОЙДОВ В НЕПОДВИЖНОЙ И ДВИЖУЩЕЙСЯ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЕ

О.В. Кравченко¹⁻³, О.А. Азарова⁴

¹Научно-технологический центр уникального приборостроения РАН, Москва

²Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Москва

³Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

⁴Вычислительный центр им. А.А. Дородницына Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» РАН, Москва

ok@bmstu.ru

Поступила 05.10.2017

В статье рассматривается моделирование образования устойчивых структур, свободных от пылевых частиц (войдов), в неподвижной и движущейся пылевой плазме. Моделирование проводится на основе известной модели Avinash, Bhattacharjee, Hu (ABH), описывающей динамику образования пылевого войда. Гидродинамическая часть модели была преобразована и записана в дивергентном виде, который использовался для расчетов по известным схемам первого и второго порядка (схема Лакса и комплексно-консервативная схема). Для различных режимов потока получена динамика кольцевых структур в неподвижной и движущейся пылевой плазме. Получены также установившиеся режимы течения, характеризующиеся формированием пылевых войдов.

УДК 533.9, 519.622, 519.63

1. Обозначения

n_d, n_e	=	плотности концентрации пылевой и электронной компоненты
v_d, v_i	=	скорости пылевой и электронной компоненты
E	=	напряженность электрического поля
F_d	=	сила ионного притяжения
D_0	=	коэффициент диффузии

t, x, y	=	временная и пространственная переменные
a, b	=	постоянные в выражении для силы ионного притяжения
μ	=	коэффициент мобильности ионов
α_0	=	коэффициент трения
τ_d, τ_i	=	коэффициент нормализованных температур для пылевой и ионной компонент
n_i	=	количество узлов сетки по x

Индекс “ θ ” относится к начальным данным

2. Введение

В последние годы был опубликован ряд исследований по динамике пылевой плазмы [1, 2]. Впервые области, свободные от пылевых частиц (войды), были обнаружены в ходе экспериментов на борту международной космической станции (МКС) в условиях микрогравитации [2]. Впоследствии войды были также получены экспериментально в лабораторных условиях в поле тяжести Земли [3-5]. Вместе с тем следует отметить относительно малое количество работ, относящихся к вопросам компьютерного моделирования образования пространственных структур в пылевой плазме.

Эволюция динамики образования одинарного симметричного войда была описана электро-гидродинамической моделью [6, 7], в основе которой лежит учет силы ионного притяжения как нелинейной функции, зависящей от скорости ионов. Алгоритм расчёта образования пылевого войда при помощи модели [7] был представлен в [8] для случая радиальной симметрии электрического поля. Образование одиночного симметричного войда и концентрических симметричных войдов в неподвижной среде было рассмотрено в [9].

В настоящей статье рассматривается образование войда в неподвижной и движущейся пылевой плазме. Моделирование проводится на основе модели [7] образования войда в потоке пылевой плазмы. Схема Лакса (первого порядка аппроксимации) и комплексно-консервативная разностная схема [10] (второго порядка аппроксимации) применяются для расчёта гидродинамической части модели.

Материалы статьи были представлены на Международной конференции 7th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (EUCASS) [11].

3. Моделирование

3.1 Описание математической модели

Численный расчёт проводится на основе модели [7] с использованием разностных схем первого и второго порядка аппроксимации. Модель рассматривается в безразмерном виде с использованием нормирующих параметров из [7]:

$$\frac{\partial v_d}{\partial t} + v_d \frac{\partial v_d}{\partial x} = F_d - E - \alpha_0 v_d - \frac{\tau_d}{n_d} \frac{\partial n_d}{\partial x}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_d}{\partial t} = - \frac{\partial(n_d v_d)}{\partial x} + D_0 \frac{\partial^2 n_d}{\partial x^2}, \quad (2)$$

$$\frac{dn_e}{dx} = - \frac{n_e E}{\tau_i}, \quad (3)$$

$$\frac{dE}{dx} = 1 - n_e - n_d, \quad (4)$$

$$F_d = \frac{aE}{b + |v_i|^3}, \quad v_i = \mu E. \quad (5)$$

Здесь n_d , n_e – плотности концентрации пылевой и электронной компонент, v_d , v_i – скорости пылевой и ионной компонент, E – напряженность электрического поля, F_d – сила ионного притяжения, D_0 – коэффициент диффузии. Гидродинамическая часть модели состоит из закона изменения количества движения (1) и уравнения неразрывности для пылевой компоненты (2). Электростатическая часть состоит из уравнения баланса для электронной компоненты (без учёта инерции электронов) (3) и закона Пуассона (4), который замыкает нелинейную систему уравнений в частных производных. Выражение для силы ионного притяжения представлено в (5). Следует отметить, что сила ионного притяжения (5) является силой, действующей на пылевые частицы со стороны ионов. Она аппроксимируется нелинейной функцией с параметрами аппроксимации a , b , которые являются положительными постоянными величинами. Одной из главных особенностей модели [7] является то, что сила F_d зависит от скорости ионов v_i , и её модуль уменьшается с ростом скорости v_i .

Модель представляет собой самосогласованную систему дифференциальных уравнений в частных производных, в которой динамика заряженных частиц влияет на изменение напряженности электрического поля E и наоборот, напряженность электрического поля влияет на динамику заряженных частиц. Неизвестными функциями являются плотности и скорости пылевых частиц, электронов и ионов, n_d , n_e и v_d , v_i , и напряженность электрического поля E . Скорость ионов v_i прямо пропорционально зависит от напряженности электрического поля E с коэффициентом пропорциональности μ .

3.2 Моделирование с использованием разностных схем первого и второго порядков

Общий алгоритм для численного моделирования с использованием схемы первого порядка был представлен ранее в [7], а также был описан в [9]. Он состоит в следующем:

- На текущем шаге интегрирования по времени t^n происходит решение начально-краевой задачи для (1), (2) с граничными условиями Неймана по явной консервативной схеме первого порядка (в качестве такой схемы рассматривалась схема Лакса), отсюда определяются значения функций n_d , v_d в узлах пространственной сетки.
- На том же шаге интегрирования по времени t^n происходит решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений (3),(4) явным методом Рунге-Кутты 4-го порядка. Отсюда находятся значения функций n_e , E в узлах пространственной сетки.
- На новом шаге интегрирования по времени t^{n+1} происходит повторное решение начально-краевой задачи для (1), (2) с граничными условиями Неймана. Отсюда становятся известными значения функций n_d , v_d в узлах пространственной сетки на новом шаге по времени.

Для расчёта с применением схемы первого порядка для гидродинамической части модели по схеме Лакса (при $D_0=0$) уравнения (1), (2) модели были переписаны в дивергентном виде:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = \mathbf{f}, \quad (6)$$

где

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} n_d \\ v_d \end{pmatrix}, \mathbf{F} = \begin{pmatrix} n_d v_d \\ 0.5 v_d^2 + \tau_d \ln n_d \end{pmatrix}, \mathbf{f} = \begin{pmatrix} D_0 \frac{\partial^2 n_d}{\partial x^2} \\ F_d - E - \alpha_0 v_d \end{pmatrix}.$$

Схема второго порядка для алгоритма [8, 9] была применена без шага повторного вычисления на основе подхода, описанного в [10] для увеличения порядка аппроксимации разностной схемы. Применяя такой подход для системы в дивергентном виде (6), запишем дополнительно систему дифференциальных следствий:

$$\frac{\partial \mathbf{u}_x}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_x}{\partial x} = \mathbf{0}, \quad (7)$$

где

$$\mathbf{u}_x = \begin{pmatrix} n_{dx} \\ v_{dx} \end{pmatrix}, \mathbf{F}_x = \begin{pmatrix} (n_d v_d - D_0 n_{dx})_x \\ (0.5 v_d^2 + \tau_d \ln n_d)_x + E - F_d + \alpha_0 v_d \end{pmatrix}.$$

В системе для производных (7), пространственные производные в правой части включаются в функцию потока. Такой приём позволяет избежать искусственных источников и стоков в расчетной области. На выходной границе использовались условия сноса. Для расчёта системы обыкновенных дифференциальных уравнений (3), (4) также применяется метод Рунге-Кутты 4-го порядка. В расчетах полагалось, что $n_d \leq 1$, причем если n_d превышало 1 (за счет численных осцилляций в схеме второго порядка), то значение n_d принималось равным 1, а значение v_d полагалось равным v_{d0} .

4. Численные результаты

Проводились численные эксперименты по генерации войдов для нулевой и ненулевой начальной скорости пылевой составляющей v_{d0} в комплексной плазме. Параметры модели представлены в Таблице 1.

4.1 Сравнение результатов моделирования по схемам первого и второго порядка

Сравнение результатов моделирования с применением разностных схем первого и второго порядка показано на Рис. 1. Отметим, что на начальном этапе распределения плотности n_d , полученные по схемам первого (кривая 1) и второго порядка (кривая 2), практически совпадают (Рис. 1а). Ограничение на значения скорости пылевых частиц v_d приводит к подавлению искусственных осцилляций численного решения распределения v_d (когда значение функции n_d превышает значение 1 в пространственных узлах сетки). Эти осцилляции показаны на графике численного решения n_d , которое было вычислено по схеме второго порядка (Рис. 1б, кривая 2). Наличие ненулевого коэффициента диффузии (который с вычислительной точки зрения играет роль искусственной вязкости в (2)) позволяет сгладить осцилляции (Рис. 1б, пунктир, $D_0=0.1$).

4.2 Моделирование динамики образования войда в неподвижной пылевой плазме

Динамика образования пылевого войда при первоначально неподвижной пылевой компоненте ($v_{d0}=0$) с применением схемы первого порядка для гидродинамической части модели представлена на Рис. 2. Двумерные распределения плотностей концентраций пылевых частиц n_d , которые представлены на Рис. 2а-2г, получены вращением вокруг оси Oz . Механизм образования войда связан с балансом между напряженностью электрического поля и силой ионного притяжения. Войд эволюционирует во времени при фиксированных параметрах модели и достигает насыщенного состояния в момент времени $t=200$ (Рис. 2д). Промежуточные состояния представлены на Рис. 2а-2в в мо-

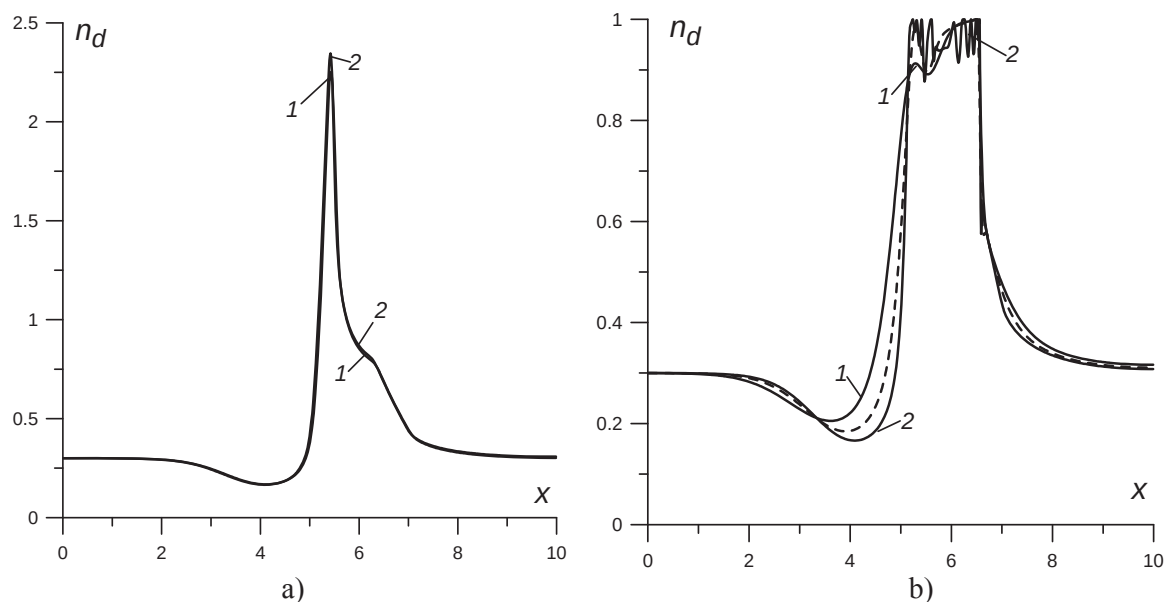


Рис. 1. Динамика изменения концентрации пылевой компоненты n_d в процессе образования войда, рассчитанная по схеме первого порядка (кривая 1, $D_0=0$) и второго порядка (кривая 2, $D_0=0$) для гидродинамической части модели, $n_{d0}=0.3$, $v_{d0}=0$, 1:
 а) начальная стадия процесса (без ограничений на n_d и v_d); б) промежуточная стадия (с ограничениями на n_d и v_d), пунктир - $D_0=0.1$

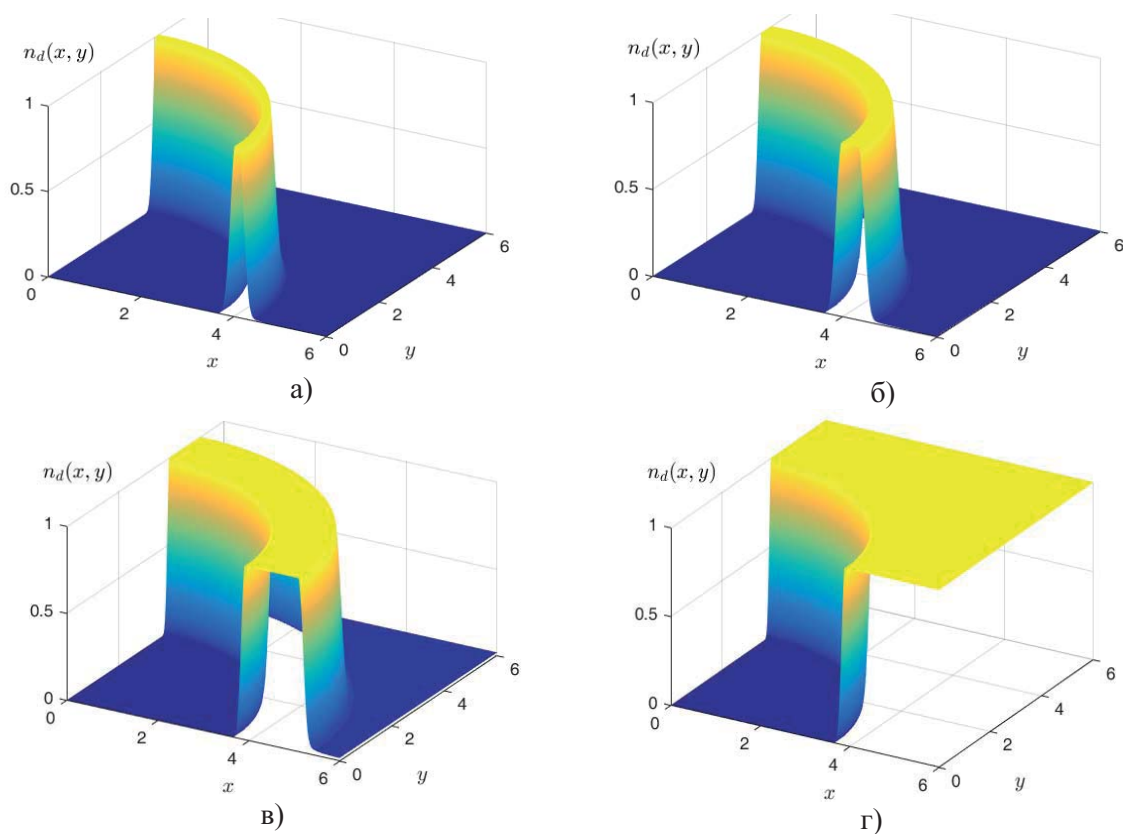


Рис. 2. Эволюция плотности концентрации распределения пылевой компоненты n_d в процессе образования войда, $E_0=4 \cdot 10^{-4}$ (схема первого порядка): а) – безразмерное время $t=70$ (неустойчивая кольцевая структура); б) - $t=100$; в) - $t=140$; г) - $t=200$ (установившийся режим)

менты времени $t=70, 100, 140$, соответственно. Следует отметить, что в начале эволюции образуется кольцевая структура, в центре которой находится войд. Далее правая граница кольцевой структуры распространяется вправо и впоследствии покидает расчетную область, а левая граница кольцевой структуры затормаживается и остаётся неподвижной.

Зависимость плотности распределения концентрации пылевых частиц n_d для различных начальных значений напряженности электрического поля E представлена на Рис. 3. Здесь в начале процесса генерации войда пылевые частицы образуют кольцевую структуру. Видно, что размер войда уменьшается при увеличении начальных значений напряженности электрического поля E_0 со значения 10^{-6} (Рис. 3а) до значения 10^{-3} (Рис. 3г). Для значения $E_0=10^{-6}$ радиус войда приближается к пространственному безразмерному значению, равному 4 (Рис. 3а), в то время как это значение становится равным 2.2 для начального значения напряженности $E_0=10^{-3}$ (Рис. 3г). Далее войд формируется внутри кольцевой структуры, правая граница которой расширяется до установившегося состояния.

Табл. 1.

Значения параметров расчета

Параметры	Значения
τ_i	0.125
τ_d	0.001
a	7.5
b	1.6
α_0	2
μ	1.5
n_{e0}	0.999

Динамика образования войда с применением схем второго порядка для гидродинамической части модели [7] приведена на Рис. 4 ($D_0=0.1$, $b=2$). *Кривая 1* показывает распределение плотности концентрации n_d в начальной стадии образования войда из кольцевой структуры пылевых частиц. *Кривые 2, 3* соответствуют установившемуся режиму, то есть соответствуют моменту времени, когда войд полностью образовался (Рис. 4а). Рис. 4б демонстрирует графики всех неизвестных плотностей концентраций, скоростей и сил, участвующих в процессе образования войда. Двумерные графики для плотности концентрации n_d , полученной вращением вокруг оси Oz представлены на Рис. 4в, 4г. Отметим, что наличие ненулевого коэффициента диффузии приводит к увеличению значений плотности концентрации n_d в центре войда (Рис. 4в). Однако это значение может быть уменьшено при изменении константы b в выражении для силы ионного притяжения F_d (5). Заметим, что при этом происходит увеличение радиуса войда.

4.3 Моделирование динамики образования войда в подвижной пылевой плазме

Динамика образования войда при наличии потока пылевых частиц ($v_{d0}=0.1$) с применением схемы первого порядка для гидродинамической части модели [7] представлена на Рис. 5. Здесь приведены все неизвестные величины для установившегося режима образования пылевого войда при наличии начальной скорости пылевых частиц (Рис. 5а, 5б). Распределение плотности концентрации пылевой компоненты n_d в режиме генерации войда из кольцевой структуры пылевой плазмы представлено на Рис. 5в.

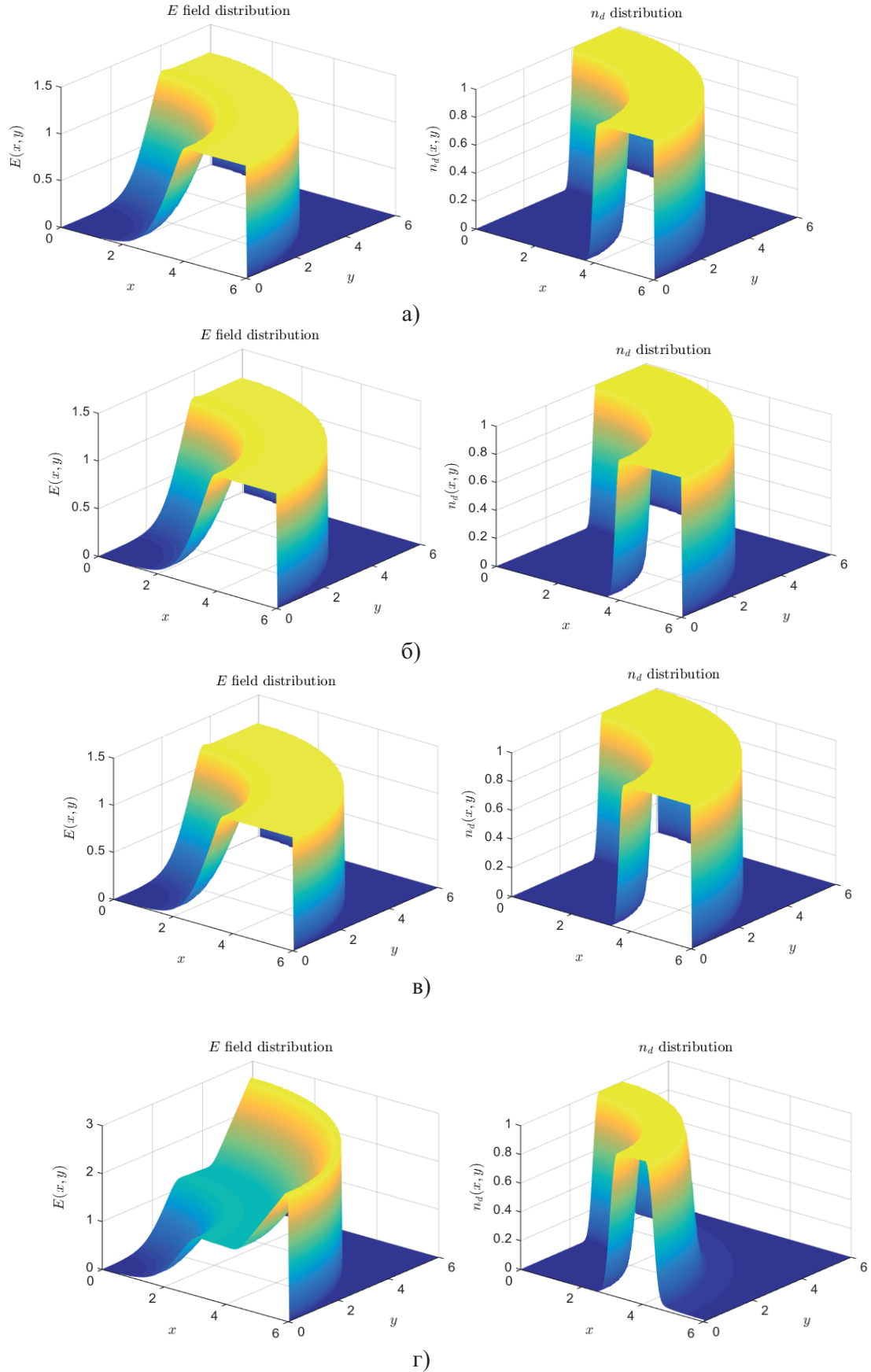


Рис. 3. Зависимость плотности распределения концентрации n_d от начальных значений напряженности электрического поля E_0 , $t=200$ (схема первого порядка): а) $E_0=4 \cdot 10^{-6}$; б) $E_0=4 \cdot 10^{-5}$; в) $E_0=4 \cdot 10^{-4}$; г) $E_0=4 \cdot 10^{-3}$

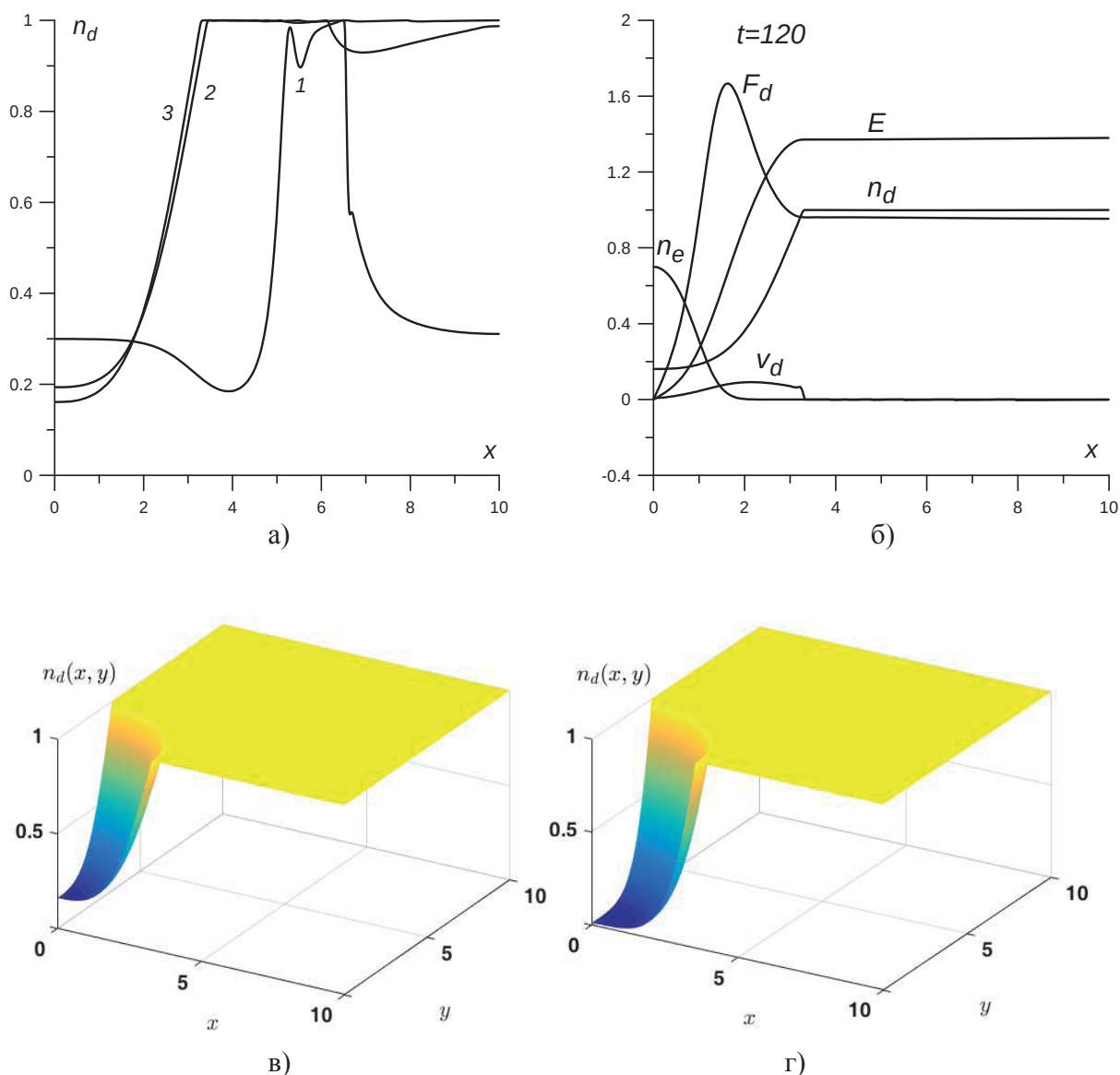


Рис. 4. Моделирование по схеме второго порядка с параметрами $n_{d0}=0.3$, $b=2$ (а) – (в), $n_{d0}=0.2$, $b=0.4$ (г), $v_{d0}=0$, $E_0=4 \cdot 10^{-5}$, $n_i=2000$, $D_0=0.1$: а) – динамика плотности концентрации пылевой компоненты n_d во время образования войда: $t=20$ (кривая 1), $t=60$ (кривая 2), $t=120$ (кривая 3); б) – графики неизвестных функций модели для установившегося режима при $t=120$; в), г) – двумерные плотности распределения концентрации пылевой компоненты n_d при $t=120$

Графики изменения плотности концентрации пылевой компоненты в граничной точке войда (кривая 1) и значение скорости пылевой компоненты v_d в точке $x(n_i)$ (кривая 2) представлены на Рис. 6. Кривая 2 демонстрирует осцилляции малой амплитуды скорости пылевой компоненты среды, которые вызваны наличием принятого ограничения на v_d . Тем не менее, граница войда (кривая 1) не содержит осцилляций. Следует отметить, что вопрос о реализации подобных осцилляций скорости пылевых частиц v_d на границе войда является открытым.

Динамика образования войда для случая $v_{d0}=0.3$ представлена на Рис. 7. На Рис. 7а, 7б приведена динамика определяющих параметров процесса. Плотность концентрации пылевой компоненты n_d в установившемся режиме полностью сформированного войда

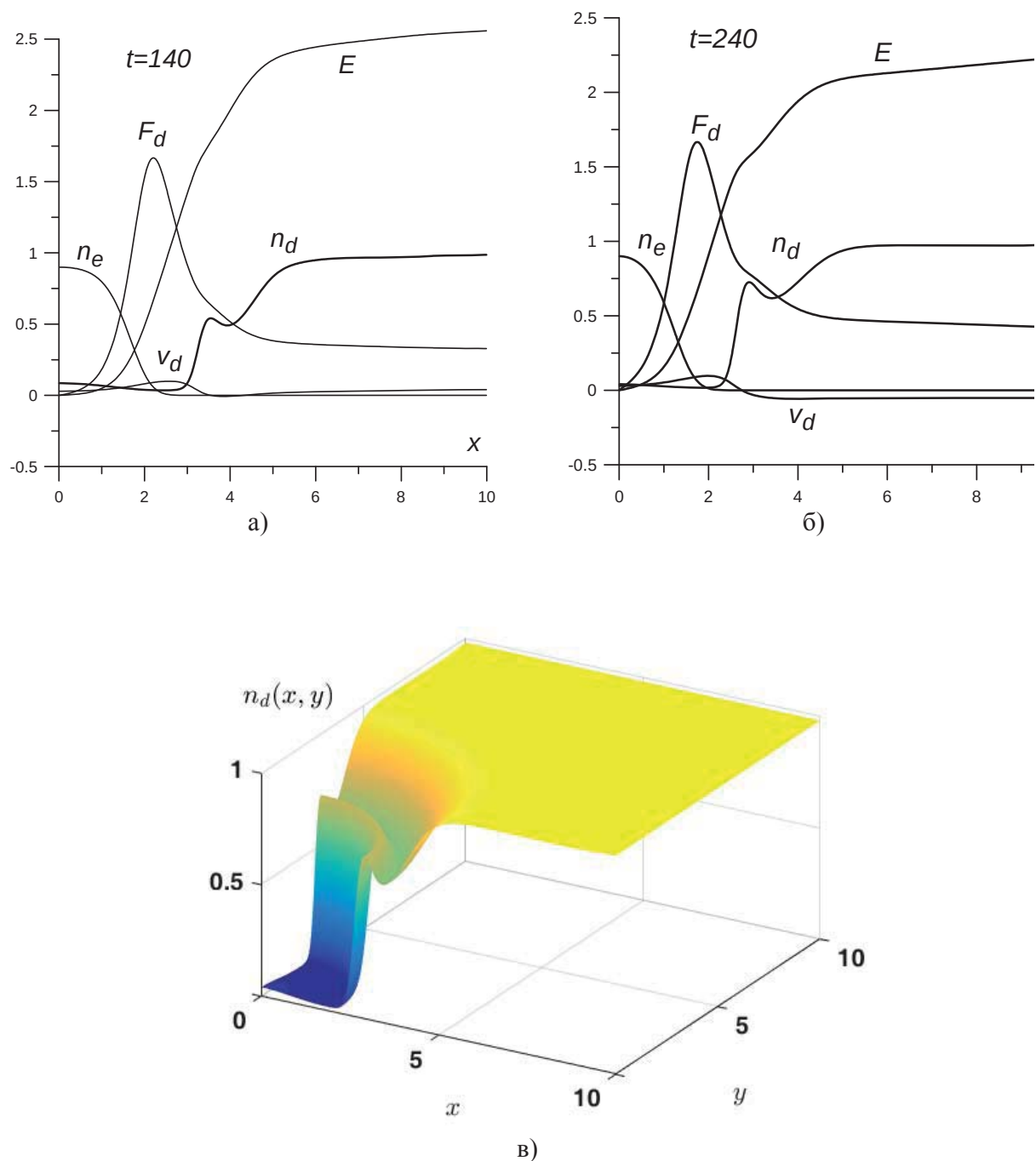


Рис. 5. Графики распределений неизвестных функций модели для установившегося режима образования войда, с применением схемы первого порядка, $n_{d0}=0.1$, $v_{d0}=0.1$, $E_0=4 \cdot 10^{-5}$, $n_i=2000$, $b=2$: а) - $t=140$; б) - $t=240$; в) – распределение плотности концентрации пылевой компоненты n_d в момент времени $t=240$ (установившийся режим)

представлена на Рис. 7в. Немонотонное поведение плотности пылевой компоненты n_d может быть связано с взаимодействием простых волн, происходящим на периферии войда. Следует отметить, что двумерные распределения потока на Рис. 5, 7 полученные техникой вращения, отражают установившийся характер течения, когда произошло формирование войда и скорость пылевых частиц в его центре стала равна нулю.

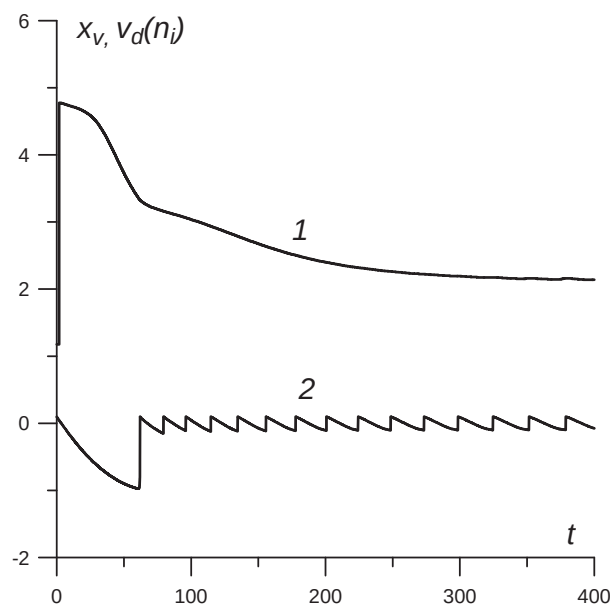
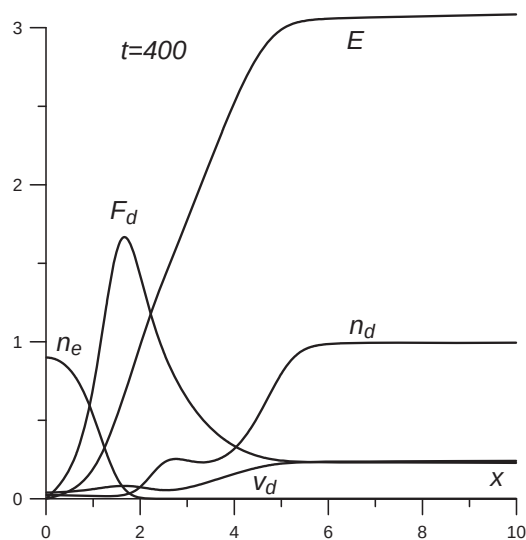
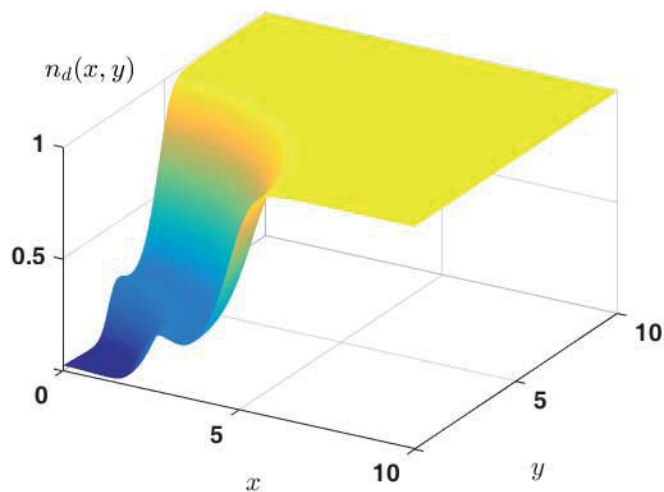


Рис. 6. Динамика границы войда (кривая 1) и значения скорости v_d в точке $x(n_i)$ (кривая 2), с применением схемы первого порядка, при значениях параметров $n_{d0}=0.1$, $v_{d0}=0.1$, $E_0=4 \cdot 10^{-5}$, $n_i=2000$



а)



б)

Рис. 7. а) – графики распределений неизвестных функций модели для установившегося режима динамики образования пылевого войда с применением схемы первого порядка, $n_{d0}=0.1$, $v_{d0}=0.3$, $E_0=4 \cdot 10^{-5}$, $n_i=2000$ при $t=400$; б) – двумерное распределение плотности пылевой компоненты n_d при $t=400$

5. Заключение

Известная модель Avinash – Bhattacharjee – Ну динамики образования войда в пылевой плазме преобразована и представлена в дивергентной форме. Для её расчёта разработан алгоритм, включающий схемы первого и второго порядка аппроксимации для

гидродинамической части модели. Проведён вычислительный эксперимент и получены результаты по образованию войда в неподвижной и движущейся пылевой плазме.

В неподвижной среде для различных режимов течения получена динамика кольцевых структур и установившиеся режимы течения, характеризующиеся образованием пылевых войдов. Исследована зависимость плотности концентрации пылевых частиц от начального значения напряженности электрического поля. Показано, что размер войда уменьшается при увеличении начального значения напряженности электрического поля.

В движущейся пылевой плазме исследовано поведение всех определяющих параметров процесса на этапе образования кольцевой структуры и в установившемся режиме, когда войд полностью сформирован.

Литература

1. *Molotkov V., Thomas H., Lipaev A., Naumkin V., Ivlev A., and Khrapak S.* Complex (dusty) plasma research under microgravity conditions: PK-3 Plus Laboratory on the International Space Station // *International Journal of Microgravity Science and Application*, 2015, **35** (3), pp. 1–8.
2. *Fortov V.E., Morgill G.E.* Complex and dusty plasmas: from laboratory to Space // CRC Press, 2009, 401 p.
3. *Feng H., Mao-Fu Y., Long W., and 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), p.1–7.
5. *Feng H., Maofu Y., and Long W.* Pattern phenomena in an RF discharge dusty plasma system // *Science in China Series G: Physics, Mechanics & Astronomy*, 2006, **49** (5), pp. 588–596.
6. *Ng C.S., Bhattacharjee A., Hu. S., Ma Z.W., and Avinash K.* Generalizations of a nonlinear fluid model for void formation in dusty plasmas // *Plasma Phys. Control. Fusion.*, 2007, **49**, pp. 1583–1597.
7. *Avinash K., Bhattacharjee A., and Hu S.* Nonlinear theory of void formation in colloidal plasmas // *Phys. Rev. Lett.*, 2003, **90** (7), pp. 1–4.
8. *Kravchenko O.V., and Pustovoi V.I.* Numerical simulation of dynamics of concentric dusty-plasma structures // *Proc. 15th International Workshop on Magneto-Plasma Aerodynamics (2016, IIHT RAS, Moscow, Russia)*, Edt. by V.A. Bityurin, pp. 153–155.
9. *Кравченко О.В.* Моделирование пространственно локализованных пылевых структур в комплексной плазме // *Наноструктуры. Математическая физика и моделирование*. 2016, **15** (2), с. 51–62.
10. *Azarova O.A.* Complex conservative difference schemes for computing supersonic flows past simple aerodynamic forms // *J. Comp. Math. Math. Phys.*, 2015, **55** (12), p. 2067–2092.
11. *Kravchenko O.V., Azarova O.A. and Lapushkina T.A.* Dusty Plasma Void Dynamics in Unmoving and Moving Flows // *Proc. 7th European Conference for Aeronautics and Space Sciences (EUCASS)*, Milan, Italy, 21–24 July 2017. DOI: 10.13009/EUCASS2017-412

GENERATION OF VOIDS IN UNMOVING AND MOVING DUSTY PLASMA

O.V. Kravchenko¹⁻³, O.A. Azarova⁴

¹*STC UI RAS, Moscow, Russia*

²*BMSTU, Moscow, Russia*

³*IRE RAS, Moscow, Russia*

⁴*CC FRS CSC RAS, Moscow, Russia*

ok@bmstu.ru

Received 05.10.2017

Simulation of steady structures with empty regions (voids) is considered numerically in unmoving and moving flows of dusty plasma. Modelling is based on the known model of Avinash, Bhattacharjee and Hu of formation of a void in a dusty plasma flow. The hydrodynamic part of the model has been reduced to the divergent form and two algorithms of first and second order of approximation have been introduced. The Lax's scheme and the complex conservative difference scheme have been used for the first and second order for the hydrodynamic part of the model. Results on the dynamics of voids have been obtained at the stage of a circular ring structure generation and a steady round void formation at the final stage. Behaviour of the defining flow parameters has been analyzed up to the steady dusty plasma void formation.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВЫХ БИЕНИЙ ЗАСЕЛЕННОСТИ СОСТОЯНИЙ ТРЕХУРОВНЕВЫХ НАНОЧАСТИЦ ПРИ СПОНТАННОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ И ПРИ РАССЕЯНИИ МОНОХРОМАТИЧЕСКОГО СВЕТА

В.А. Морозов

*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского
Российской академии наук, Москва*

morozov@mail.ioc.ac.ru

Поступила 08.10.2017

На основе использования решений уравнения Шредингера для составной системы из трехуровневой модели наночастицы и взаимодействующего с ней квантованного поля излучения получены выражения, в аналитическом виде описывающие биения заселенности состояний частицы при спонтанном излучении. Рассмотрены случаи начального возбуждения наночастицы в радиационное состояние и начального возбуждения в нерадиационное состояние, связанное динамическим взаимодействием с радиационным состоянием. Проведено также моделирование динамики заселенности состояний такой частицы при рассеянии длительного импульса монохроматического резонансного облучения. Установлено, что полученные выражения для динамики заселенности всех состояний частицы при спонтанном излучении являются точными решениями соответствующей системы оптических уравнений Блоха. Результаты моделирования динамики заселенности состояний частицы при рассеянии согласуются с результатами соответствующего моделирования на основе уравнений Блоха для заселенности радиационного состояния, но существенно различаются для заселенности нерадиационного и основного состояний частицы на начальном этапе рассеяния импульса облучения. Дано объяснение происхождения такого сходства и различия.

УДК 535.14

Введение

Под термином “квантовые биения состояний” подразумевают эффект периодического изменения заселенности состояний квантовой системы и обычно связывают их с проявлением периодического изменения интенсивности спонтанного излучения (флуоресценции) этой системы. Такие биения рассматривают как проявление интерференции одновременно возбужденных собственных состояний атома с различными значениями

их энергии (литературу см., например, в [1]), молекулы (литературу см., например, в [2]), а также проявлением “когерентного”, динамического взаимодействия между состояниями молекулы, одно из которых заселено в начальный момент времени [3].

В последние годы уделяется много внимания теоретическому изучению биений заселенности состояний изолированных наноструктур с использованием различных моделей наночастиц (см., например, в [4-9]). Анализ экспериментальных данных таких биений интенсивности флуоресценции квантовых точек, как, например, биения, связанные со свободной прецессией электронных и дырочных спинов, возбужденных состояний “горячего” триона и др., позволяет установить параметры обменного взаимодействия состояний этих наночастиц, зеемановского расщепления их спектральных линий и определить тонкую структуру состояний частицы, скрытую в неоднородно уширенном контуре полосы поглощения оптического перехода. Такая информация необходима для выбора или конструирования таких наночастиц, параметры которых подходят для использования их в качестве различных перспективных оптоэлектронных устройств (см. в монографии [10]).

Моделирование биений заселенности состояний наночастиц в отмеченных выше работах (кроме [7]) основано на применении представлений формализма оптических уравнений Блоха (ОУБ). Формализм ОУБ использует классическое описание поля облучения частицы при феноменологическом описании распада ее возбужденных состояний и является менее последовательным в отношении представлений о взаимодействии частицы с полем излучения и менее строгим в отношении применения математического аппарата по сравнению с формализмом, рассматривающим частицу как открытую динамическую квантовую систему, которая входит в состав общей (“составной”) системы из частицы и взаимодействующего с ней квантованного поля излучения (см., например, в [1, 11]). В последнее время этот формализм предусматривает использование представления о том, что естественное макроскопическое диссипативное окружение частицы выступает в роли детектора, который в режиме счета фотонов непрерывно определяет состояние поля излучения с отнесением считывания результата этого определения (“регистрации”) к определению состояния частицы, являющегося конечным для ее перехода с излучением соответствующего “зарегистрированного” фотона, или начальным – при регистрации неизменившегося состояния поля (см. в [12-14]).

В работах [15-17] установлено, что при использовании такого формализма квантовой теории составной системы (который будем обозначать как формализм “КТСС”) результаты моделирования динамики спектроскопических переходов (по терминологии [18]) трехуровневой частицы с диссипативной связью ее возбужденных состояний существенно отличаются от результатов соответствующего моделирования при использовании формализма ОУБ.

В настоящей работе проведено моделирование динамики квантовых биений заселенности состояний трехуровневой частицы при рассеянии длительного импульса монохроматического света и при спонтанном излучении для случая начального возбуждения наночастицы в ее радиационное состояние и для случая начального возбуждения в ее нерадиационное состояние, связанное динамическим взаимодействием с радиационным состоянием. Полученные результаты этого моделирования при использовании формализма КТСС сопоставлены с результатами, полученными на основе использования формализма ОУБ. Приведены причины сходства и различия этих результатов.

Модель составной системы

Основное состояние принятой трехуровневой модели частицы обозначено цифрой 1. Принято, что одно из возбужденных состояний является радиационным. Оно обозначено цифрой 2. Другое возбужденное состояние полагается нерадиационным (“темным”). Оно обозначено цифрой 3. Относительное положение уровней энергии учиты-

ваемых состояний такой частицы схематически приведено на рис. 1. Отрезками горизонтальных утолщенных линий отмечены уровни энергии E_n ($n = 1 \div 3$) такие, что $E_1 \ll E_2 = E_3$. Тонкими вертикальными линиями со стрелками обозначены учитываемые радиационные, а круговой линией – нерадиационные переходы между состояниями частицы, соответствующими приведенным значениям энергии. Рядом с каждой вертикальной линией со стрелкой приведена буква, обозначающая “сорт” соответствующего фотона, затрагиваемого переходом молекулы между состояниями, соединенными этой стрелкой. Например, буква λ означает сорт фотона облучения, буква σ – сорт фотона спонтанного излучения (флуоресценции) при переходе частицы из состояния 2 в состояние 1. Для сорта фотонов рассеянного света сохраним обозначение σ , отмечая при этом, что $\sigma \neq \lambda$.

Если под частицей подразумевать одноэлектронную двойную полупроводниковую квантовую точку – то состояния 1 и 2 можно отнести к одной квантовой точке, а состояние 3 к другой квантовой точке, отделенной от первой квантовой точки потенциальным барьером, сквозь который происходит туннелирование электрона, как в модели, рассмотренной в [4,8]. Состояния принятой модели частицы могут также рассматриваться как нижайшие по энергии состояния электрон-дырочных пар одиночной полупроводниковой квантовой точки, возбужденные электрон-фононные состояния которой связаны взаимодействиями, приводящими к процессам нерадиационного переноса энергии между ними, как в модели, принятой в [9] (и многих других работах, список которых приведен в этой работе).

Если под такой частицей подразумевать отдельную молекулу, то состояния 1 и 2 можно отнести к одной ее изомерной форме (первый изомер), а состояние 3 – к другой изомерной форме (второй изомер) [19,20]. Оператор энергии взаимодействия между частицей (молекулой) и полем излучения в дипольном приближении запишем в виде $V = -(\hat{e}\hat{d})$, где $\hat{d}$ – оператор дипольного момента частицы (электронной подсистемы молекулы), $\hat{e}$ – напряженность электрического поля световой волны (для простоты будем полагать, что вектор $\hat{e}$ параллелен вектору $\hat{d}$). При рассмотрении рассеяния света будем полагать, что монохроматический свет, напряжённость электрического поля которого $\hat{e}(t) = 2\hat{e}_0 \sin \omega_L t$, ($t \geq 0$), падает на частицу, положение которой соотносено с центром декартовой системы координат X, Y, Z , распространяется вдоль оси Z и поляризован вдоль оси X . Оператор энергии динамического взаимодействия между состояниями 2 и 3 частицы обозначаем буквой W . Предполагается, что отличны от нуля только матричные элементы W по состояниям 2 и 3. Для этих матричных элементов используется обозначение $W_{23} = W_{32} \equiv \hbar w$. Относительно конкретного вида этого оператора для молекул см., например, монографию [20].

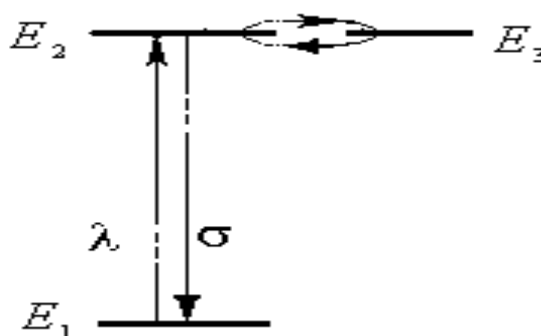


Рис. 1. Схема относительного положения уровней энергии модели частицы с указанием учитываемых переходов между ними

Для краткости, динамику заселенности состояний частицы при рассеянии длительного импульса монохроматического облучения будем называть динамикой рассеяния и динамику заселенности состояний частицы при спонтанном излучении из радиационного состояния – динамикой флуоресценции.

При рассмотрении динамики рассеяния учитываемые состояния составной системы обозначены как $\lambda 1, 02, 03, \sigma 1$. Состояние $\lambda 1$ означает, что частица находится в состоянии 1, а поле излучения содержит N фотонов сорта λ , состояние 02 (03) означает, что частица находится в состоянии $2(3)$, а поле излучения содержит $N-1$ фотонов λ ; состояние $\sigma 1$ – частица в состоянии 1, поле содержит $N-1$ фотонов λ и один фотон $\sigma \neq \lambda$. Используются обозначения: ω_λ – частота фотона λ и ω_σ – частота фотона σ .

При рассмотрении динамики флуоресценции состояние 02 (03) означает, что частица находится в состоянии $2(3)$, а поле излучения не содержит фотонов; состояние $\sigma 1$ означает, что частица находится в состоянии 1, а поле содержит фотон σ .

Для объема L^3 пространства, в котором находится частица и рассматриваемое поле излучения, и реального значения матричного элемента оператора дипольного момента частицы $\hat{d}$ при введенных обозначениях имеем, например, для матричного элемента оператора V по состояниям системы $\sigma 1$ и 02 при рассмотрении динамики флуоресценции такое выражение: $V_{\sigma 1}^{02} = iL^{-3/2} \sqrt{2\pi \cdot \hbar \omega_\sigma} \cdot (\hat{d}_\sigma)_{12}$, $(\hat{d}_\sigma)_{12}$ – матричный элемент по состояниям частицы 1 и 2 проекции оператора $\hat{d}$ на направление поляризации фотона σ , а при рассмотрении динамики рассеяния – $V_{\lambda 1}^{02} = iL^{-3/2} \sqrt{2\pi N \hbar \omega_\lambda} \cdot (\hat{d}_\lambda)_{12} \equiv i\hbar \Omega_R$; $(\hat{d}_\lambda)_{12}$ – матричный элемент по состояниям частицы 1 и 2 проекции оператора $\hat{d}$ на направление поляризации (ось X) фотона λ , N – число фотонов облучения, приходящихся на объем L^3 .

Динамика заселенности состояний частицы по формализму теории составной системы

Моделирование динамики заселенности состояния j составной системы основано на использовании решения уравнения Шредингера в представлении взаимодействия:

$$i\hbar \dot{b}_j(t) = \sum_k (V + W)_{jk} b_k(t) \cdot \exp[i(E_j - E_k)t / \hbar] + i\hbar \delta_{ji} \delta(t).$$

Здесь $b_j(t)$ – амплитуда вероятности заселенности состояния j как функция времени t , δ_{ji} – символ Кронекера, $\delta(t)$ – функция Дирака; i – начальное состояние системы.

При использовании фурье-представления

$$b_j(t) = i(2\pi)^{-1} \int G_j(E) \cdot \exp[i(E_j - E)t / \hbar] dE,$$

где E – формальная энергетическая переменная, решение уравнения Шредингера сводится к решению системы уравнений

$$(E - E_j) \cdot G_j(E) = \sum_k (V + W)_{jk} G_k(E) + \delta_{ji}.$$

При моделировании динамики флуоресценции частицы из первоначально возбужденного состояния 2 время t будет отсчитываться от того момента, когда возбуждавший частицу короткий световой импульс света с несущей частотой, равной частоте перехода частицы из основного состояния в это состояние, перестал взаимодействовать с ней. Относительно условий возбуждения квантовой частицы в одно из ее состояний коротким импульсом света см., например, в [21,22]. Также будет проведено моделирование динамики спонтанной флуоресценции частицы, первоначально возбужденной в темное состояние, например, в результате соударения с другой частицей.

При рассмотрении динамики флуоресценции при первоначальном возбуждении частицы с состояние 2 полагаем $b_{02}(0) = 1$ и получаем решение системы уравнений для $G_j(E)$ в виде:

$$\begin{aligned} G_{02}(E) &= \frac{E - E_{02}}{(E - E_{02} + i\hbar\gamma)(E - E_{02}) - (\hbar w)^2}, \\ G_{03}(E) &= \hbar w \zeta(E - E_{03}) G_{02}, \\ G_{\sigma 1}(E) &= V_{\sigma 1}^{02} \zeta(E - E_{\sigma 1}) G_{02}. \end{aligned}$$

Здесь использовано обычно вводимое (см., например, в [23]) обозначение:

$$\gamma = i\hbar^{-1} \sum_{\sigma} |V_{\sigma 1}^{02}|^2 \zeta(E - E_{\sigma 1}),$$

где $\zeta(E) = P/E - i\pi\delta(E)$, P/E – главное значение функции $1/E$. В дальнейшем под выражением γ подразумевается реальная часть приведенного выше определения этой величины, взятая при значении энергии составной системы в состоянии 02, а мнимая часть, отражающая радиационный сдвиг уровня энергии состояния 2 частицы, не учитывается (см. в [23]), так что константа

$$\gamma = \pi\hbar^{-2} \sum_{\sigma} |V_{\sigma 1}^{02}|^2 \delta(E_{02} - E_{\sigma 1}) = 2\omega_{21}^3 d_{21}^2 / 3\hbar c^3$$

характеризует скорость радиационного распада состояния 2 частицы. Предполагается, что $\gamma \ll \omega_{21} = \hbar^{-1}(E_2 - E_1)$.

Используя фурье-представление для амплитуд $b_j(t)$ и приведенные выше решения системы уравнений для $G_j(E)$, получаем:

$$\begin{aligned} b_{02}(t) &= \exp(-\gamma t / 2) [\cos(at) - (\gamma / 2a) \sin(at)], \\ b_{03}(t) &= -i w \exp(-\gamma t / 2) \sin(at) / a, \end{aligned}$$

$$b_{\sigma 1}(t) = V_{\sigma 1}^{02} \left\{ \frac{\Delta \exp(i\Delta t)}{w^2 - \Delta^2 + i\gamma\Delta} + \frac{\exp(-\gamma t / 2)}{2a} \left[\frac{(a - i\gamma/2) \exp(-iat)}{\Delta + a - i\gamma/2} + \frac{(a + i\gamma/2) \exp(iat)}{\Delta - a - i\gamma/2} \right] \right\},$$

где $a = \sqrt{w^2 - \gamma^2 / 4}$ для $w > \gamma / 2$; $\Delta = \omega_{21} - \omega_{\sigma}$.

При вычислении этих значений амплитуд вероятности заселенности состояний системы использовалось то обстоятельство, что матричные элементы операторов V и W можно считать медленно меняющимися функциями E в области тех значений, которые захватывают максимум резонансного знаменателя выражений $G_j(E)$, и выносить их из под знака интеграла при том значении переменной интегрирования, которое соответствует этому максимуму.

В отношении определения динамики заселенности состояний частицы в процессе излучения фотонов флуоресценции приведем общие представления теории преобразования света частицей и квантовой теории измерений относительно динамики характеристик состояний открытых систем [14] в формализме КТСС. Согласно этим представлениям непрерывное взаимодействие излучающей свет молекулы с естественным макроскопическим окружением приводит к потере когерентности состояний составной системы (“декогеренции”) и при этом осуществляется реальная – как это отмечено и в [24] – регистрация (“измерение”) состояния частицы как детектирование состояний поля излучения в режиме счета фотонов, которое приводит к “уничтожению” фотона, излученного частицей при переходе в это состояние, сопровождающимся редукцией волновой функции системы. С учетом этого, заселенность конечного для рассматриваемого перехода состояния частицы определяется (как и в [25]) суммой вероятностей заселенности состояний составной

системы, каждое слагаемое в которой соответствует появлению фотона, который может быть излучен частицей в результате ее перехода в это состояние и поглощен макроскопическим окружением (детектором). По [26] – это суммирование вероятностей “совместимых альтернатив” (“интерферирующих альтернатив”). Заселенность начального состояния частицы для рассматриваемого спонтанного перехода определяется “условной вероятностью нулевого измерения” – вероятностью регистрации отсутствия каких-либо излученных частицей фотонов при вмешательстве детектора в этот процесс излучения [12,13]. При этом, как отмечено в [12], под непрерывными измерениями следует подразумевать быструю последовательность измерений, такую, что интервал Δt между последовательными измерениями должен – в нашем случае – удовлетворять условиям $\omega_{21}\Delta t \gg 2\pi$ и $\gamma \Delta t \gg 1$, которые легко выполняются при оптических переходах.

Следуя этим представлениям, получаем выражения $P_2(t)$ и $P_3(t)$ для заселенности состояний 2 и 3 частицы:

$$P_{02}(t) = |b_{02}(t)|^2 = \exp(-\gamma t) [\cos(at) - (\gamma/2a)\sin(at)]^2 \equiv P_2(t),$$

$$P_{03}(t) = |b_{03}(t)|^2 = w^2 \exp(-\gamma t) \sin^2(at) / a^2 \equiv P_3(t),$$

и для зависимости от времени $P_1(t)$ заселенности состояния 1 частицы при детектировании фотонов σ получаем:

$$P_{(\sigma)1}(t) = \sum_{\sigma} |b_{\sigma 1}(t)|^2 = 1 - \exp(-\gamma t) [4w^2 - \gamma^2 \cos(2at) - 2\gamma a \sin(2at)] / 4a^2 \equiv P_1(t).$$

Величина $\hbar\omega_{21}\dot{P}_{(\sigma)1}(t)$ представляет собой скорость изменения полной энергии, излучаемой частицей при рассматриваемом спонтанном переходе $2 \rightarrow 1$, т.е. определяет динамику интенсивности спонтанной флуоресценции $I_{\Phi}(t)$. Используя полученные выражения $P_{(\sigma)1}(t)$ и $P_2(t)$, находим, что имеет место равенство:

$$\hbar\omega_{21}\dot{P}_1(t) \equiv I_{\Phi}(t) = 2\gamma \hbar\omega_{21}P_2(t).$$

На основании этого равенства заключаем, что динамика интенсивности спонтанной флуоресценции определяется динамикой заселенности возбужденного в начальный момент времени радиационного состояния.

Проводя аналогичные вычисления при моделировании динамики флуоресценции для случая первоначального возбуждения частицы в темное состояние, получаем для амплитуд заселенности состояний системы – отмечая их волнистой чертой над буквой b для отличия от соответствующих амплитуд для случая спонтанного излучения из первоначально возбужденного радиационного состояния частицы – следующие выражения:

$$\tilde{b}_{02}(t) = -iw \exp(-\gamma t/2) \sin(at) / a,$$

$$\tilde{b}_{03}(t) = \exp(-\gamma t/2) [\cos(at) + (\gamma/2a)\sin(at)],$$

$$\tilde{b}_{\sigma 1}(t) = wV_{\sigma 1}^{02} \left\{ \frac{1}{\Delta^2 - w^2 - i\gamma\Delta} + \frac{\exp(-\gamma t/2 - i\Delta t)}{2a} \left[\frac{\exp(-iat)}{\Delta + a - i\gamma/2} - \frac{\exp(iat)}{\Delta - a - i\gamma/2} \right] \right\}.$$

Соответственно имеем выражения для заселенности состояний частицы:

$$\tilde{P}_{02}(t) = |\tilde{b}_{02}(t)|^2 = w^2 \exp(-\gamma t) \sin^2(at) / a^2 \equiv \tilde{P}_2(t) = P_3(t),$$

$$\tilde{P}_{03}(t) = |\tilde{b}_{03}(t)|^2 = \exp(-\gamma t) [\cos(at) + (\gamma/2a)\sin(at)]^2 \equiv \tilde{P}_3(t),$$

$$\tilde{P}_{(\sigma)1}(t) = \sum_{\sigma} |\tilde{b}_{\sigma 1}(t)|^2 = 1 - \exp(-\gamma t) [4w^2 - \gamma^2 \cos(2at) + 2\gamma a \sin(2at)] / 4a^2 \equiv \tilde{P}_1(t).$$

Используя эти выражения, получаем:

$$\hbar\omega_{21}\tilde{P}_1(t) \equiv \tilde{I}_\Phi(t) = 2\gamma\hbar\omega_{21}\tilde{P}_2(t),$$

т.е. так же, как при первоначальном возбуждении частицы в радиационное состояние, при первоначальном возбуждении частицы в темное состояние динамика интенсивности спонтанной флуоресценции определяется динамикой заселенности радиационного состояния. Различие вида функций $\tilde{I}_\Phi(t)$ и $I_\Phi(t)$ можно видеть при сравнении рисунка 2 с рисунком 3.

На рис. 2 и на рис. 3 изображены функции $P_n(t)$ и $\tilde{P}_n(t)$, $n=1\div 3$ для частицы, у которой $w=5\gamma$. По оси абсцисс на этих рисунках отложены значения P_n , $\tilde{P}_n$, а по оси ординат – время в единицах $\tau=\gamma^{-1}$. Кривые $P_n(t)$ и $\tilde{P}_n(t)$ помечены буквами с соответствующими индексами. Утолщенные кривые изображают функции $P_2(t)$ и $\tilde{P}_2(t)$, тонкие штриховые – функции $P_3(t)$ и $\tilde{P}_3(t)$, утолщенные точечные – функции $P_1(t)$ и $\tilde{P}_2(t)$.

Как видно из сравнения этих рисунков, биения заселенности состояний 2 и 3 происходят в противофазе, с отставанием биений $P_3(t)$ заселенности темного состояния частицы от биений $P_2(t)$ первоначально заселенного радиационного состояния и с опережением биений $\tilde{P}_3(t)$ заселенности первоначально возбужденного темного состояния частицы по отношению к биениям $\tilde{P}_2(t)$ заселенности радиационного состояния частицы. Биения $P_2(t)$ происходят в противофазе с опережением биений $\tilde{P}_2(t)$, а биения $P_3(t)$ – с отставанием по отношению к биениям $\tilde{P}_3(t)$.

В случае облучения частицы длительным импульсом монохроматического света ограничимся рассмотрением частного случая резонансного облучения $\omega_L = \omega_{21} = \omega_\lambda$

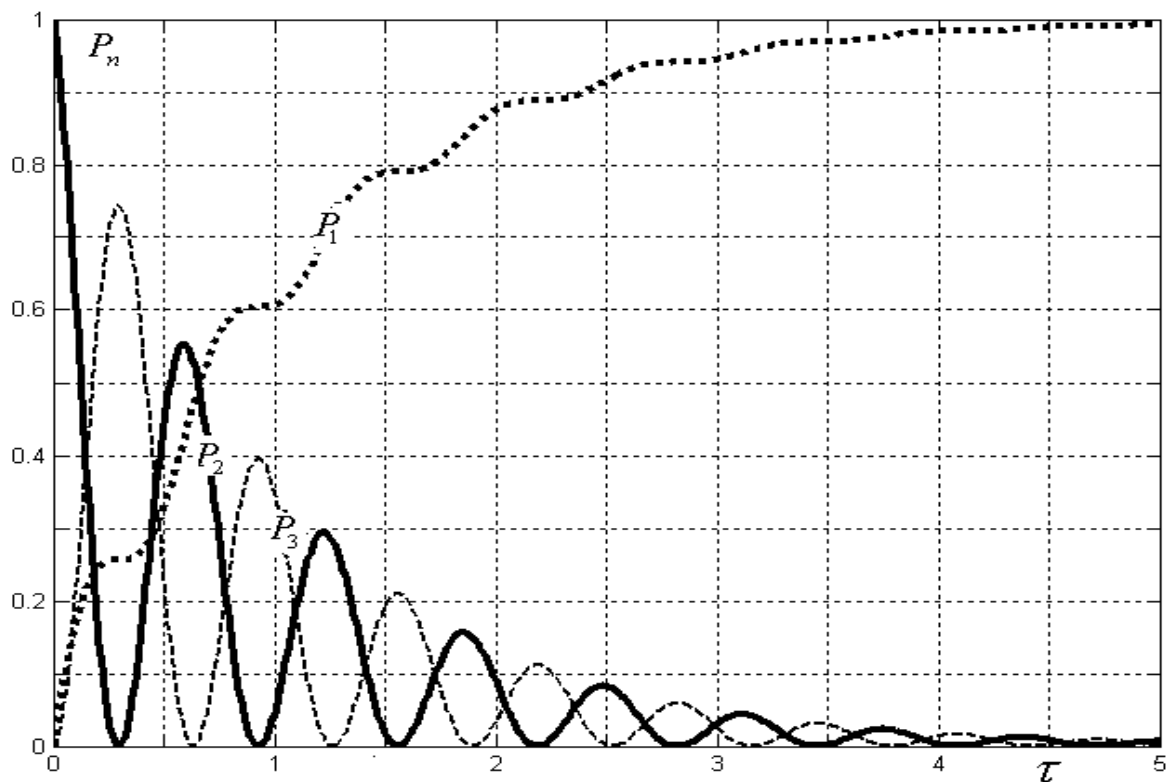


Рис. 2. Пример вида биений заселенности состояний при спонтанном излучении частицы, первоначально возбужденной в радиационное состояние

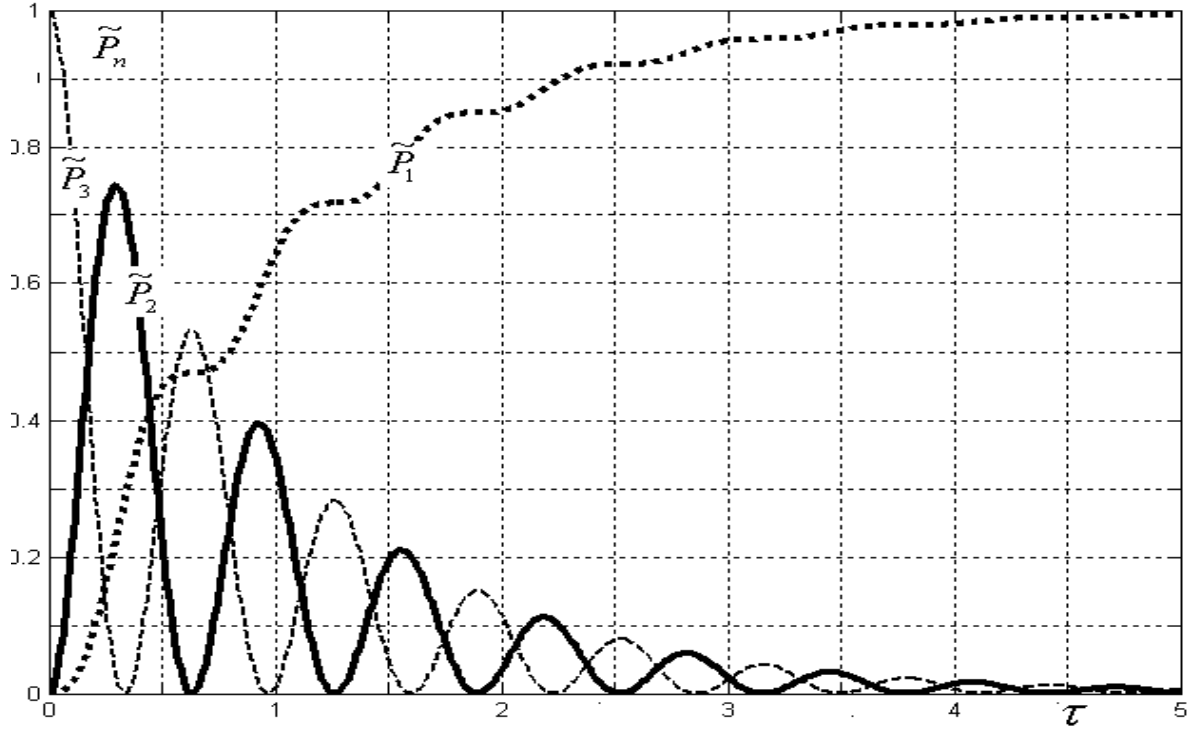


Рис. 3. Пример вида биений заселенности состояний при спонтанном излучении частицы, первоначально возбужденной в нерadiационное состояние

такой интенсивности, что $\Omega_R < 0.5\gamma$, и достаточно сильного динамического взаимодействия между состояниями 2 и 3, а именно такого, что $w > 0.5\gamma$.

Решая систему уравнений (1) для принятой модели трехуровневой частицы при $b_{\lambda 1}(0) = 1$ и поменяв функции $G_j(E)$ – и соответственно функции $b_j(t)$ – чертой над буквой G и над буквой b , для того, чтобы отметить, что они относятся к случаю рассеяния частицей монохроматического облучения длительным импульсом света, а не к случаю спонтанного излучения из первоначально возбужденной в состояние 2 частицы, получаем:

$$\begin{aligned}\bar{G}_{02}(E) &= \frac{V_{02}^{\lambda 1}}{(E - E_3)(E - E_2 + i\hbar\gamma) - \hbar^2 \bar{w}^2}, \\ \bar{G}_{03}(E) &= \hbar w \bar{G}_{02}(E) \zeta(E - E_3), \\ \bar{G}_{\sigma 1}(E) &= V_{\sigma 1}^{02} \bar{G}_{02}(E) \zeta(E - E_{\sigma 1}), \\ \bar{G}_{\lambda 1}(E) &= \frac{(E - E_2)(E - E_2 + i\hbar\gamma) - \hbar w^2}{(E - E_2)(E - E_2 + i\hbar\gamma) - \hbar^2 \bar{w}^2} \zeta(E - E_{\lambda 1}),\end{aligned}$$

где $\Omega_R^2 + w^2 \equiv \bar{w}^2$ и константа γ определяется следующим образом:

$$\gamma = \pi \hbar^{-2} \sum_{\sigma \neq \lambda} |V_{\sigma 1}^{02}|^2 \delta(E_{02} - E_{\sigma 1}),$$

т.е. как результат суммирования по сортам рассеянных фотонов, в отличие от той константы γ , которая фигурирует в приведенных выше выражениях, относящихся к флуоресценции, и содержит суммирование по всем сортам фотонов флуоресценции. Численное значение этих констант практически одинаково, поэтому используемое при моделировании динамики флуоресценции обозначение γ будет сохранено. Однако при нахождении решения системы уравнений для $\bar{G}_i(E)$ использование условия $\sigma \neq \lambda$

является принципиальным. Что касается физического смысла этого условия, то отметим, что оно отражает представление формализма КТСС о процессе рассеяния света, как о процессе, при котором не происходит “перепоглощение” фотона облучения λ , в отличие от представления, согласно которому при рассмотрении динамики заселенности состояний рассеивающей свет частицы учитывается перепоглощение (“reabsorption”) фотонов рассеянного света при “адекватном описании процесса радиационного затухания, включающего много фотонов” (...“in adequately describing the radiative damping process when many photons are involved, “ – см. страницы 1919, 1920, 1925 в [27]). Согласно [27], такое представление о преобразовании двухуровневой частицей длительного импульса облучения согласуется с представлениями о динамике рассеяния света частицей, описываемой формализмом ОУБ.

Используя фурье-представление амплитуд $b_j(t)$ и приведенные решения $\bar{G}_j(E)$, находим:

$$\begin{aligned}\bar{b}_{\lambda 1}(t) &= \{w^2 + \Omega_R^2 \exp(-\gamma t / 2) [\cos(\bar{a}t) + \gamma \sin(\bar{a}t) / 2\bar{a}]\} / \bar{w}^2, \\ \bar{b}_{02}(t) &= -iV_{02}^{\lambda 1} \exp(-\gamma t / 2) \sin(\bar{a}t) / (\hbar \bar{a}), \\ \bar{b}_{03}(t) &= w\Omega_R \{\exp(-\gamma t / 2) [\cos(\bar{a}t) + \gamma \sin(\bar{a}t) / 2\bar{a}] - 1\} / \bar{w}^2.\end{aligned}$$

Используя выражение для $\bar{b}_{\lambda 1}(t)$, для динамики заселенности начального состояния системы при детектировании неизменного состояния поля облучения (“нулевом измерении” [12,13]) имеем следующее выражение:

$$\bar{P}_{\lambda 1}(t) = |\bar{b}_{\lambda 1}(t)|^2 = \{w^2 + \Omega_R^2 \exp(-\gamma t / 2) [\cos(\bar{a}t) + \gamma \sin(\bar{a}t) / 2\bar{a}]\}^2 / \bar{w}^4.$$

Для заселенности $\bar{P}_2(t)$ и $\bar{P}_3(t)$ состояний 2 и 3 частицы и поля излучения, содержащего $N - 1$ фотонов λ , имеем следующие выражения:

$$\begin{aligned}\bar{P}_{02}(t) &= |\bar{b}_{02}(t)|^2 = \Omega_R^2 \exp(-\gamma t) \sin^2(\bar{a}t) / \bar{a}^2 \equiv \bar{P}_2(t), \\ \bar{P}_{03}(t) &= |\bar{b}_{03}(t)|^2 = w^2 \Omega_R^2 \{\exp(-\gamma t) [\cos^2(\bar{a}t) + \gamma^2 \sin^2(\bar{a}t) / 4\bar{a}^2 + \gamma \sin(2\bar{a}t) / 2\bar{a}] \\ &\quad - 2 \exp(-\gamma t / 2) [\cos(\bar{a}t) + \gamma \sin(\bar{a}t) / 2\bar{a}] + 1\} / \bar{w}^4 \equiv \bar{P}_3(t),\end{aligned}$$

где $\bar{a} = \sqrt{\bar{w}^2 - \gamma^2 / 4}$, $\bar{w}^2 > \gamma^2 / 4$.

Согласно используемому формализму КТСС, вероятность найти частицу в начальном основном состоянии при рассеянии длительного импульса облучения складывается из условной вероятности регистрации неизменившегося состояния поля облучения (“необнаружения” фотона рассеянного света) и вероятности регистрации фотонов релеевского рассеяния света, т.е. зависимость от времени $\bar{P}_1(t)$ заселенности основного состояния частицы представима такой суммой:

$$\bar{P}_1(t) = \bar{P}_{\lambda 1}(t) + \sum_{\sigma \neq \lambda} |\bar{b}_{\sigma 1}(t)|^2,$$

Используя условие нормировки

$$\bar{P}_2(t) + \bar{P}_3(t) + \bar{P}_{\lambda 1}(t) = 1$$

получаем:

$$\begin{aligned}\sum_{\sigma \neq \lambda} |\bar{b}_{\sigma 1}(t)|^2 &= 1 - \bar{P}_2(t) - \bar{P}_3(t) - \bar{P}_{\lambda 1}(t) \\ &= \Omega_R^2 \{1 - \exp(-\gamma t) [4\bar{w}^2 - \gamma^2 \cos(2\bar{a}t) + 2\bar{a}\gamma \sin(2\bar{a}t)] / 4\bar{a}^2\} / \bar{w}^2 \equiv \bar{P}_{(\sigma)1}(t)\end{aligned}$$

Величина $\hbar\omega_{21}\dot{\bar{P}}_{(\sigma)1}(t)$ представляет собой скорость изменения энергии, рассеиваемой частицей, т.е. интенсивность релеевского рассеяния $I_p(t)$.

Используя полученные выражения $\bar{P}_{(\sigma)1}(t)$ и $\bar{P}_2(t)$, находим, что имеет место равенство:

$$\hbar\omega_{21}\dot{\bar{P}}_{(\sigma)1}(t) \equiv I_p(t) = 2\gamma\hbar\omega_{21}\bar{P}_2(t),$$

позволяющее сделать заключение, что зависимость от времени интенсивности рассеиваемого частицей света определяется зависимостью от времени заселенности ее радиационного состояния, так же как это имеет место для спонтанной флуоресценции.

В установившемся режиме преобразования резонансного монохроматического излучения заселенности состояний частицы таковы:

$$\begin{aligned}\bar{P}_1(t=\infty) &= \bar{P}_{(\sigma)1}(t=\infty) + \bar{P}_{\lambda 1}(t=\infty) = (\Omega_R^2 \bar{w}^2 + w^4) / \bar{w}^4, \\ \bar{P}_2(t=\infty) &= 0, \quad \bar{P}_3(t=\infty) = w^2 \Omega_R^2 / \bar{w}^4, \quad \sum_{m=1,3} \bar{P}_m(t=\infty) = 1.\end{aligned}$$

Динамика заселенности состояний частицы, Определяемая оптическими уравнениями Блоха

При рассмотрении преобразования частицей монохроматического света с частотой $\omega_L = \omega_{21}$ система ОУБ будет рассматриваться в резонансном приближении при использовании матричного элемента оператора V по состояниям 1 и 2 частицы в виде $V_{12} = i\hbar\Omega_R \exp(i\omega_{21}t)$, где $\Omega_R = \hbar^{-1}e_0(\hat{d}_x)_{12}$, $(\hat{d}_x)_{12}$ – матричный элемент по состояниям частицы 1 и 2 проекции оператора $\hat{d}$ на направление поляризации падающего света (оси X), e_0 – амплитуда напряженности электрического поля при предположении, что численное значение этой частоты Раби Ω_R для рассматриваемого случая преобразования света частицей равно численному значению приведенной выше величины $\Omega_R = \hbar^{-1}L^{-3/2}\sqrt{2\pi N\hbar\omega_{21}} \cdot (d_x)_{12}$. При принятых допущениях и ограничениях относительно характеристик модели частицы и характера ее взаимодействия с полем излучения система ОУБ для элементов $\rho_{mn} = b_m b_n^*$ матрицы плотности рассматриваемой частицы без учета “чисто фазовой релаксации” (см., например, [13]) имеет вид:

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_{11} &= 2\gamma\rho_{22} + 2\Omega_R \operatorname{Re}\rho_{12}, \\ \dot{\rho}_{22} &= -2\gamma\rho_{22} - 2\Omega_R \operatorname{Re}\rho_{12} - 2w\operatorname{Im}\rho_{23}, \\ \dot{\rho}_{33} &= 2w\operatorname{Im}\rho_{23}, \\ \dot{\rho}_{12} &= -\gamma\rho_{12} - \Omega_R(\rho_{11} - \rho_{22}) + iw\rho_{13}, \\ \dot{\rho}_{23} &= -\gamma\rho_{23} - \Omega_R\rho_{13} + iw(\rho_{22} - \rho_{33}) = \dot{\rho}_{32}^*.\end{aligned}$$

Форма записи уравнений (2) выбрана так, чтобы значение феноменологической константы γ в этих уравнениях совпадало с соответствующим значением константы γ , использованной в предыдущем разделе.

Установлено, что строгие решения $\rho_{nn}(t)$, $n=1\div 3$ этой системы уравнений при $\Omega_R = 0$, т.е. для рассматриваемого спонтанного излучения из начального состояния 2 и из начального состояния 3, совпадают с полученными выше функциями $P_n(t)$ и, соответственно $\tilde{P}_n(t)$ при равных значениях соответствующих констант γ , w . Это установлено прямой подстановкой функций $\rho_{nn}(t) = P_n(t)$, $n=1\div 3$, $\rho_{23}(t) = b_{02}(t)b_{03}^*(t)$ и $\tilde{\rho}_{nn}(t) = \tilde{P}_n(t)$, $n=1\div 3$, $\tilde{\rho}_{23}(t) = b_{02}(t)\tilde{b}_{03}^*(t)$ в (2), а также следует из совпадения значений полученных функций $P_n(t)$ и $\tilde{P}_n(t)$ со значениями соответствующих функций $\rho_{nn}(t)$ и $\tilde{\rho}_{nn}(t)$, найденных в результате численных решений системы ОУБ.

При рассмотрении рассеяния длительного импульса монохроматического света система уравнений ОУБ решалась численно для случая облучения частицы светом такой интенсивности, что $\Omega_R = 0.25\gamma$. Для частицы, у которой $w = 5\gamma$, полученные значения функций $\bar{\rho}_{33}(t)$ и $\bar{\rho}_{22}(t)$, а также полученные выше функции $\bar{P}_2(t)$ и $\bar{P}_3(t)$,

приведены на рис. 4, а на рис. 5 приведены функции $\bar{\rho}_{33}(t)$ и $\bar{P}_3(t)$ для частицы, у которой $w = 10\gamma$. По оси ординат на этих рисунках отложены значения функций $\bar{\rho}_{nn}(t)$ и $\bar{P}_n(t)$, а по оси абсцисс – время t в единицах τ . Утолщенная сплошная кривая на рис. 4 изображает функцию $\bar{P}_3(t)$, а утолщенная штриховая кривая – функцию $\bar{\rho}_{33}(t)$. Тонкая сплошная кривая изображает функцию $\bar{P}_2(t)$. Эта кривая совпадает с кривой, изображающей функцию $\bar{\rho}_{22}(t)$, т.е. $\bar{P}_2(t) = \bar{\rho}_{22}(t)$. На рис. 5 сплошная кривая изображает функцию $\bar{P}_3(t)$, а штриховая кривая – функцию $\bar{\rho}_{33}(t)$.

Приведенные на Рис. 4 и на Рис. 5 изображения функций $\bar{\rho}_{nn}(t)$ и $\bar{P}_n(t)$ свидетельствуют о том, что для случая облучения частицы длительным импульсом монохроматического света результат моделирования динамики заселенности радиационного состояния 2 частицы с использованием формализма КТСС совпадает с результатом моделирования соответствующей динамики при использовании формализма ОУБ, а результаты моделирования динамики заселенности темного состояния 3 различаются. Изменения во времени заселенности состояния 3 согласно результату моделирования с использованием формализма ОУБ представляют собой начинающиеся от значения $\bar{\rho}_{33}(t=0) = 0$ плавно затухающие периодические колебания вокруг среднего значения $\bar{\rho}_{33}(\infty) = 2.5 \cdot 10^{-3}$ с периодом $\cong \gamma^{-1}$, а с использованием формализма КТСС – относительно острые, по сравнению с изменениями функции $\bar{\rho}_{33}(t)$, всплески значений функции $\bar{P}_3(t)$, превышающие в максимуме размах колебаний функции $\bar{\rho}_{33}(t)$ на начальном этапе ($0 < t \leq 4 \cong \gamma^{-1}$) процесса рассеяния света частицей с постепенным приближением функции $\bar{P}_3(t)$ к плавно затухающим периодическим колебаниям вокруг такого же среднего значения, как колебания функции $\bar{\rho}_{33}(t)$. При этом для частицы, у которой $w = 5\gamma$, вместо первого импульса $\bar{\rho}_{33}(t)$ появляются два более острых импульса $\bar{P}_3(t)$, а для частицы, у которой $w = 10\gamma$, вместо первого, второго, третьего и

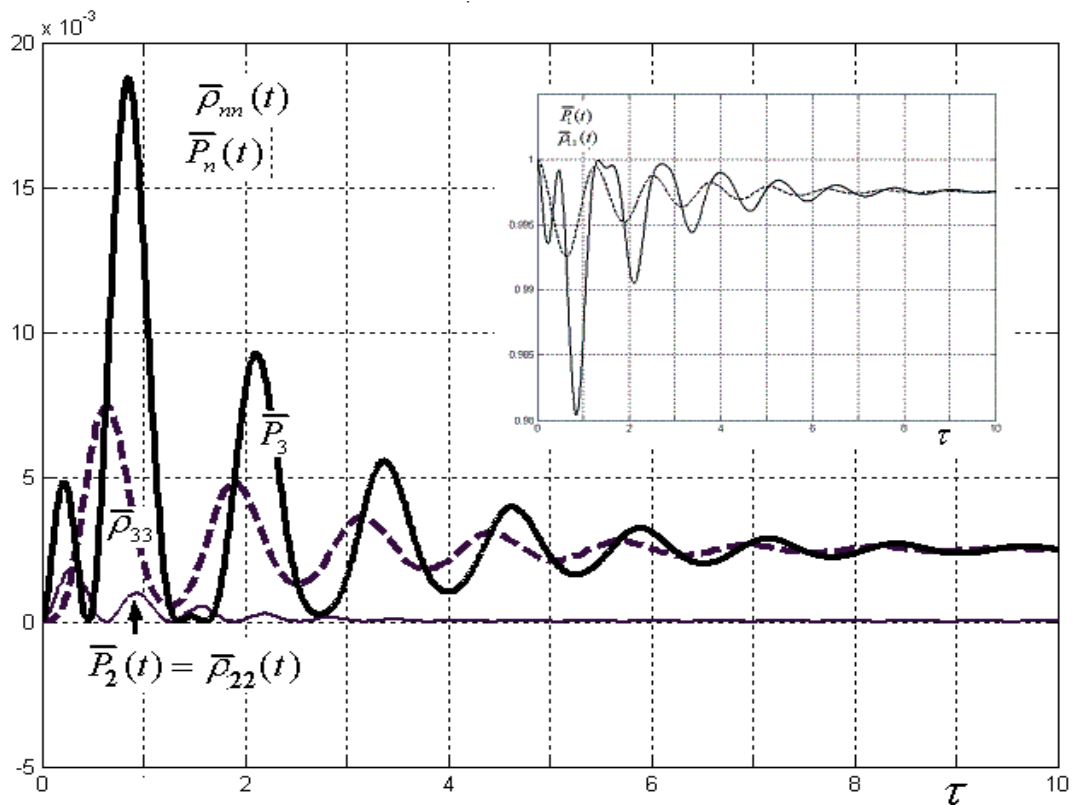


Рис. 4. Сравнение вида биений заселенности состояний частицы с $w = 5\gamma$ при рассеянии монохроматического света по результатам моделирования двумя методами.

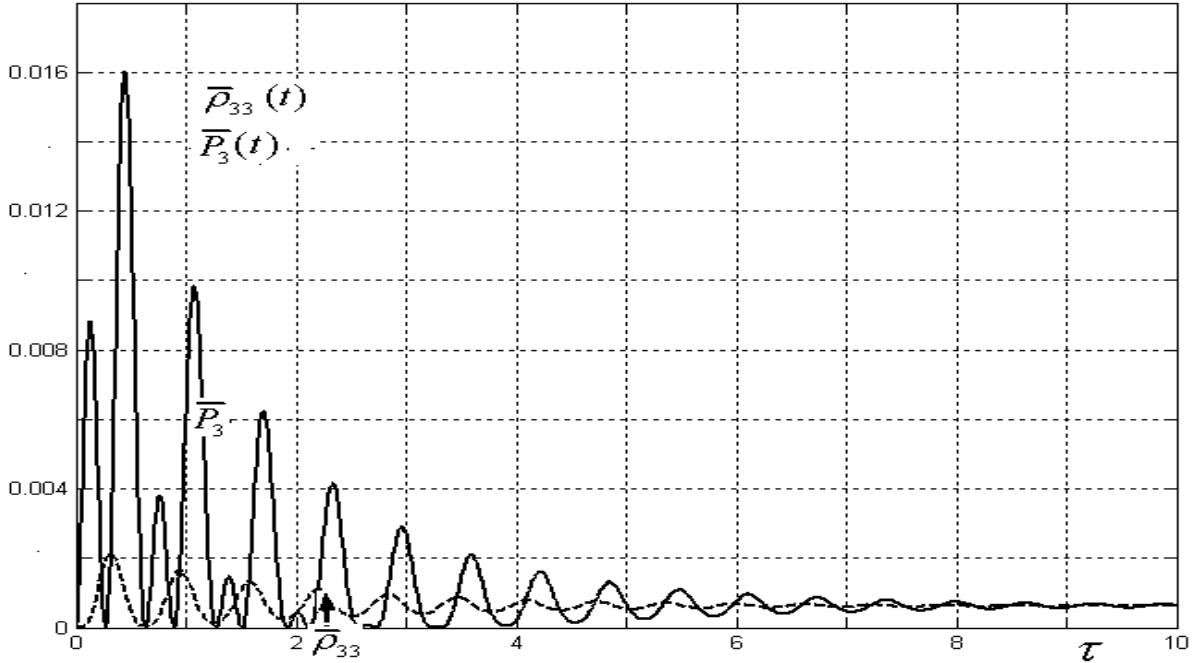


Рис. 5. Сравнение вида биений заселенности состояний частицы с $w = 5\gamma$ при рассеянии монохроматического света по результатам моделирования двумя методами

четвертого импульсов $\bar{\rho}_{33}(t)$ появляются по два более острых импульса $P_3(t)$, из которых второй намного более интенсивный, чем первый.

Аналогичное сравнение динамики заселенности начального состояния частицы, у которой $w = 5\gamma$, при облучении длительным импульсом монохроматического света при такой интенсивности, что $\Omega_R = 0.25\gamma$, приведено на вставке рисунка 4. По оси ординат на этой вставке отложены значения $\bar{\rho}_{11}(t)$ и $\bar{P}_1(t)$, а по оси ординат – время t в единицах τ . Так же, как и отмеченные выше изменения во времени заселенности состояния 3, изменения заселенности состояния 1, которые определены на основе формализма ОУБ, представляют собой плавно затухающие периодические колебания вокруг среднего значения $\bar{\rho}_{11}(t) \cong 0.9975$ с периодом $\cong \gamma^{-1}$, а с использованием формализма КТСС – нерегулярные всплески $\bar{P}_1(t)$ на начальном этапе рассеяния света частицей ($0 < t \leq 4 \cong \gamma^{-1}$) с постепенным приближением функции $\bar{P}_1(t)$ к плавно затухающим периодическим колебаниям вокруг такого же среднего значения с таким же периодом, как у функции $\bar{\rho}_{11}(t)$.

Заметим, что в работе [28] приведены выражения для стационарных значений заселенности состояний системы (2). Они имеют вид:

$$\bar{\rho}_{11}(t = \infty) = w^2 / \bar{w}^2, \quad \bar{\rho}_{22}(t = \infty) = 0, \quad \bar{\rho}_{33}(t = \infty) = \Omega_R^2 / \bar{w}^2,$$

т.е. отличаются от приведенных выше соответствующих выражений $\bar{P}_n(t = \infty)$, однако их численные значения совпадают с точностью до 10^{-4} при одинаковых значениях Ω_R и параметров частицы. Например, при $w = 5\gamma$, $\Omega_R = 0.25\gamma$ имеем:

$$\bar{P}_{(\sigma)1}(t = \infty) = \bar{\rho}_{33}(t = \infty) = \bar{P}_3(t = \infty) = 0.0025,$$

$$\bar{P}_1(t = \infty) = \bar{\rho}_{11} = 0.9975, \quad \bar{P}_{\lambda 1}(t = \infty) = 0.9950.$$

Обсуждение результатов

Результаты моделирования биений заселенности состояний при спонтанной флуоресценции рассмотренной трехуровневой частицы одинаковы, как при

применении формализма ОУБ, так и при применении формализма КТСС. Вид биений заселенности радиационного состояния определяет вид биений интенсивности спонтанной флуоресценции.

Для случая рассеяния импульса резонансного монохроматического облучения рассматриваемой трехуровневой частицей результаты моделирования биений заселенности состояний радиационного состояния частицы совпадают и при применении формализма КТСС и при применении формализма ОУБ. Вид биения заселенности этого состояния определяет вид биений интенсивности рассеянного света. Но результаты моделирования заселенности темного состояния и заселенности начального, основного состояния частицы при применении формализма КТСС и при применении формализма ОУБ существенно различаются: два импульса заселенности резкой формы с разной интенсивностью вместо каждого одного плавного импульса на начальном этапе процесса рассеяния. Исходя из вида полученных выражений для амплитуд заселенности темного состояния, можно заключить, что такая особенность импульсов заселенности темного состояния связана с проявлением интерференции вкладов в амплитуду этого состояния, один из которых является постоянным (и определяет установившееся значение заселенности рассматриваемого состояния), а другой затухает со временем по экспоненциальному закону.

Полученное согласно формализму КТСС выражение для заселенности начального, основного состояния частицы выглядит как отражение суммирования результатов регистрации заселенности начального состояния составной системы при “необнаружении” фотонов рассеянного света и результатов регистрации основного состояния частицы при детектировании фотонов релеевского рассеяния. В установившемся режиме рассеяния остаются отличными от нуля оба этих “вклада в заселенность” основного состояния частицы. В таком режиме устанавливается равновесное заселение темного и основного состояния частицы при том, что радиационное состояние не заселено. Как отмечено в [28] – оно “выключено” взаимно компенсирующимися вкладами в заселенность этого состояния со стороны импульса облучения и со стороны темного состояния. Заметим, что у трехуровневой частицы с диссипативной связью радиационного и темного состояния в установившемся режиме рассеяния длительного импульса монохроматического света полностью заселяется темное состояние [15–17].

Заключительные замечания

Получены выражения, в аналитическом виде описывающие биения интенсивности спонтанной флуоресценции трехуровневой частицей, а так же рассеяния ею длительного импульса монохроматического облучения. Использование этих выражений при анализе соответствующих экспериментальных данных с целью определения характера фотофизических превращений различных квантовых точек и механизма фотохимических реакций отдельных молекул представляется более удобным и требующим меньше времени по сравнению с использованием при таком анализе численных решений соответствующих оптических уравнений Блоха. Результаты анализа экспериментальных данных динамики рассеяния частицей длительного импульса облучения могут рассматриваться как дополнительная информация, представляющая интерес для установления причины различий в деталях представления о преобразовании света квантовой частицей, которое используется в формализме теории составной системы, и представления, которое используется в формализме оптических уравнений Блоха. Например, такого аспекта этих представлений, как отмеченное “перепоглощение” фотонов рассеянного частицей длительного импульса облучения. В связи с этим отметим, что в последние годы

уделяется много внимания изучению возможности управления ходом фотопревращений молекул импульсом (или импульсами) света, с целью перевода молекулы из начального состояния в желаемое конечное состояние с минимальной потерей энергии и времени – “оптимальное квантовое управление” (см. обзор [29] со списком литературы в 771 наименований). Последние достижения такого управления отражены в отчете Общеввропейской комиссии по координации и поддержке работ по оптимальному квантовому управлению (“QUAINT”) [30]. Этот отчет отражает мнение 144 экспертов при ссылках на 486 работ разных авторов в различных группах исследователей. Во многих из отмеченных в отчете работах в качестве существенного недостатка работ по оптимальному квантовому управлению отмечается недостаточно высокий уровень применяемой теории взаимодействия частицы со световым полем, в частности в отношении описания механизма дуального воздействия на частицу внешнего поля излучения и ее макроскопического окружения [31]. Иметь адекватное описание этого механизма необходимо при составлении программы применения оптимального квантового управления. Отметим также, что, как следует из полученных результатов, моделирование с использованием формализма теории составной системы, предоставляет возможность использования дополнительного ресурса достижения оптимального квантового управления: подбор параметров детектора поля вторичного излучения (макроскопического окружения) дополнительно к подбору параметров импульса облучения. Заметим, что при составлении программ применения оптимально-оптимального квантового контроля, которые создавались в отмеченных в отчете [30] работах, использовался формализм оптических уравнений Блоха (записываемых обычно в виде уравнений Линдблада). Имея это в виду, полученные в настоящей работе (так же, как в работах [15–17]) результаты моделирования на основе формализма теории составной системы можно рассматривать как вклад в изучение возможностей увеличения эффективности оптимального квантового управления за счет применения в его формализме такого представления о дуальном воздействии на частицу внешнего поля излучения и ее макроскопического окружения, которое является более совершенным по сравнению с применяемым при моделировании на основе оптических уравнений Блоха.

Литература

1. Александров Е.Б., Хвостенко Г.И., Чайка М.П., Интерференция атомных состояний. // М.: Физматлит., 1991, 255 стр.
2. Rhodes W., Nonradiative Relaxation and Quantum Beats in the Radiative Decay Dynamics of Large Molecules. // J. Phys. Chem., 1983, **87** (1), 30-40.
3. Lendi K., Quantum beats in polyatomic molecules. // Chemical Physics, 1980, **46** (1), 179-190.
4. Papadopoulos G. J., Melas P., Photon Induced Tunneling Oscillations in a Double Quantum Well. // Foundations of Physics, 2001, **31** (1), 165-175.
5. Багрянский В.А., Боровков В.И., Молин Ю.И., Квантовые биения в радикальных парах. // Успехи химии, 2007, **76** (6), 535-549.
6. Герловин И.Я., Игнатьев И.В., Югова И.А., Masumoto Y., Квантовые биения состояний тонкой структуры в квантовых точках InP. // Оптика и спектр., 2008, **104** (4), 640-652.
7. Далидчик Ф.И., Кубарев С.И., Пономарев О.А., Квантовые биения туннельной проводимости наноконтактов. // Хим. физика., 2009, **28** (10), 18-27.
8. Цуканов А.В., Катеев И.Ю., Квантовые вычисления на квантовых точках в полупроводниковых микрорезонаторах. Часть II. // Микроэлектроника, 2014, **43** (6), 403-414.
9. Леонов М.Ю., Турков В.К., Рухленко И.Д., Федоров Ф.В., Кинетика термализованной люминесценции одиночной квантовой точки при комнатной температуре. // Оптика и спектр., 2012, **113** (3), 288-294; 295-300.
10. Федоров А.В., Рухленко И.Д., Баранов А.В., Кручинин С.Ю., Оптические свойства полупроводниковых квантовых точек. // СПб: Наука, 2011, 188 стр.
11. Осадько И.С., Селективная спектроскопия одиночных молекул. // М.: ФИЗМАТЛИТ, 2000, 320 стр.

12. Plenio M.B., Knight P.L., The quantum-jump approach to dissipative dynamics in quantum optics. // *Reviews of Modern Physics*, 1998, **70** (1), 101-144.
13. Скалли М.О., Зубайри М.С. Квантовая оптика. // М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003, 504 стр.
14. Менский М. Б., Квантовые измерения, феномен жизни и стрела времени: связи между “тремя великими проблемами” (по терминологии Гинзбурга). // *Успехи физ. наук*, 2007, **177** (4), 415-425.
15. Морозов В.А., Чувылкин Н.Д., Смоленский Е.А., О применимости оптических уравнений Блоха к моделированию динамики фотохимических реакций. // *Докл. РАН.*, 2015, **461** (3), 300-302.
16. Морозов В.А., Чувылкин Н.Д., Смоленский Е.А., Моделирование динамики заселенности состояний трехуровневой молекулы в поле монохроматической световой волны. // *Хим. Физика*, 2015, **34** (11), 3-10.
17. Морозов В.А., Математическое моделирование динамики заселенности состояний трехуровневой наночастицы при спектроскопических переходах. // *Наноструктуры. Математическая физика и моделирование*, 2016, **14** (2), 69-83.
18. Макомбер Дж., Динамика спектроскопических переходов. // М.: МИР, 1979, 347 стр.
19. Баранов В.И., Грибов Л.А., Моделирование кинетики внутримолекулярных процессов и нестационарных спектров с учетом безызлучательных переходов. // *ЖПС.*, 2004, **71** (4), 412-428.
20. Грибов Л.А., Баранов В.И. Теория и методы расчета молекулярных процессов: спектры, химические превращения и молекулярная логика. // М.: КомКнига, 2006, 474 стр.
21. Нильсен М., Чанг И. Квантовые вычисления и квантовая информация. // Москва, “МИР”, 2006, 822 стр.
22. Медведев Э.С., Неэкспоненциальное затухание флуоресценции многоатомных молекул // *Успехи физ. наук*, 1991, **161** (1), 31-70.
23. Гайтлер В. Квантовая теория излучения. // М.: Изд-во иностр. лит., 1956, 491 стр.
24. Морозов В.А., Шорыгин П.П., Резонансное преобразование света и динамика молекулярных переходов // *Журн. физ. химии*, 1990, **64** (2), 289-307.
25. Морозов В.А., Шорыгин П.П., Форма и спектр импульсов резонансного комбинационного рассеяния света и других компонент вторичного излучения многоатомными молекулами. I. Общие выражения. // *Оптика и спектр.*, 1987, **63** (6) 1235-1242.
26. Фейнман Р., Хибс А., Квантовая механика и интегралы по траекториям. // Москва, “МИР”, 1968, 382 стр.
27. Mollow B.R., Pure-state analysis of resonant light scattering: Radiative damping, saturation, and multiphoton effects. // *Phys. Rev.*, 1975, **A12**, 1919-1943.
28. Морозов В.А., Дубина Ю.М., Математическое моделирование динамики заселенности “темных” состояний трехуровневой системы. // *Оптика и спектр.*, 2012, **112** (5), 716-722.
29. Brif C., Chakrabarti R., Rabitz H., Control of quantum phenomena: Past, present, and future. // *New J. Phys.*, 2010, **12**, 075008, 76 pp.
30. Glaser S. J., Boscain U., Calarco T., Koch C.P. et al., Training Schrödinger’s cat: quantum optimal control. // *Eur. Phys. J.*, 2015, **D69** (12), 1-24.
31. Gao F., Rey-de-Castro R., Wang Y., Rabitz H., Shuang F., Identifying a cooperative control mechanism between an applied field and the environment of open quantum systems. // *Phys. Rev.*, 2016, **A93**, 053407, 11 pp.

MATHEMATICAL MODELING OF QUANTUM BEATS OF POPULATION OF STATES OF THREE-LEVEL NANOPARTICLES AT THE SPONTANEOUS FLUORESCENCE AND THE SCATTERING OF MONOCHROMATIC LIGHT

V. A. Morozov

N. D. Zelinsky Institute of organic chemistry Russian Academy of Sciences, Moscow

morozov@mail.ioc.ac.ru

Received 08.10.2017

Through the use of solutions of the Schrödinger equation for a composite system of a three-level model of nanoparticles and associated quantized radiation field the expressions are derived which in an analytical form describe the beating of the particle states population at spontaneous emission for the case of initial excitation of the nanoparticles in its radiation state and at excitation in its non-radiative state associated dynamic interaction with a radiation state. The simulation is performed also of the dynamics of the state population of such a particle at the scattering long pulse of monochromatic radiation. It is established that the obtained expressions for the dynamics of the populations of all the states of the particles during spontaneous radiation are exact solutions of the corresponding system of optical Bloch equations. The simulation results of the particle states population dynamics at scattering are consistent with the results of the simulation based on the Bloch equations for the population of the radiative states, but differ substantially for the population of dark and ground particle states in the initial stage of scattering of the pulse irradiation. This explanation of the origin of such similarities and differences.

ДИНАМИКА ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ТРЕХСОЛИТОННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В НЕЛИНЕЙНОЙ СИГМА-МОДЕЛИ

Х.Х. Муминов, Ф.Ш. Шокиров

Физико-технический институт им. С.У. Умарова АН РТ, Душанбе

khikmat@inbox.ru, shokirov@rambler.ru

Поступила 13.09.2017

Представлены результаты численного моделирования процессов взаимодействия топологических вихрей (солитонов) с доменными границами нееловского и блоховского типов в $(2+1)$ -мерной анизотропной $O(3)$ нелинейной сигма-модели. Исследованы свойства поэтапного распада топологических вихрей при взаимодействии с блоховскими доменными границами на локализованные возмущения, обладающие половинными значениями топологического заряда и движущиеся вдоль плоскости доменных границ. Получены модели трехсолитонных взаимодействий типа кинк-вихрь-антикинк, где наблюдается поэтапный распад топологического вихря, сопровождающийся аннигиляцией доменных границ.

УДК 519.6, 530.1

1. Введение

Нелинейные сигма-модели (НСМ) впервые возникли как эффективные теории безмассовых возбуждений в задаче, связанной с теорией трех псевдоскалярных пионов (π -мезонов), которые отождествлялись с псевдоскалярными полями. Для описания динамики изотопического триплета пионов было предложено использование некоторого симметричного псевдоскалярного трёхкомпонентного поля $\mathbf{S}(s_i)$ ($i = 1, 2, 3$). Псевдо-

скалярная мезонная теория, в частности, даёт объяснения короткодействующего характера ядерных сил, обменных сил Майорана и Гейзенберга, спиновой зависимости ядерных сил, наличие тензорной составляющей ядерных сил и т.д. В двумерном случае НСМ (n -поле, АЗ-поле) оказываются очень похожими по своим свойствам на четырехмерные теории Янга-Миллса. С одной стороны нетривиальной двумерной теории Янга-Миллса не существует, с другой стороны структура расходимостей НСМ оказывается похожей на таковую для квантовой теории калибровочных полей. Особый интерес к НСМ объясняется главным образом, их прямой связью с геометрией – геометрия многообразия проявляется в ее простых свойствах как в квантовой теории поля [1-3]. НСМ также можно применять для описания таких явлений как квантовый эффект Холла, сверхтекучего ^3He , антиферромагнитных спиновых цепочек, непрерывного классического двумерного ферромагнетика Гейзенберга.

Исследуемая в настоящей работе $O(3)$ инвариантная НСМ описывает киральное поле на двумерной (блоховской) сфере $S^2 = SU(2)/U(1) = SO(3)/SO(2)$ и обладает интересными топологическими свойствами. В этом случае теория взаимодействующих полей получается наложением простейшей квадратичной связи $n^2 = 1$ (n -поле). Для анизотропного случая $O(3)$ НСМ действие имеет следующий вид:

$$S = \int L d^4x = \int g \left[\partial_\mu s_a \partial^\mu s_a + s_3^2 - 1 \right] d^4x, \quad (1)$$

$$\mu = 0, 1, 2, 3; \quad a = 1, 2, 3; \quad g = 1/2; \quad s_a s_a - 1 = 0,$$

где $s_i (i = 1, 2, 3)$ – координаты единичного изовектора $\mathbf{S}(s_1, s_2, s_3)$, эволюционирующего в изотопическом пространстве блоховской сферы $S^2 \in \mathbb{R}^3$ (см., например, рис. 1 для случая 180-градусной доменной границы).

В настоящей работе в рамках (2+1)-мерной анизотропной $O(3)$ НСМ (1) исследуются процессы взаимодействия топологических вихрей (солитонов) белава-полюковского типа [4]

$$\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} = \left(\frac{R}{r} \right)^{Q_t}, \quad (2)$$

$$Q_t = \chi^{-1}(\varphi + \omega \tau),$$

с известными решениями в виде доменных границ

$$\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} = e^{B_1 \left(\frac{w}{k_1} x - \frac{w}{k_1} x_0 \right) + B_2 \left(\frac{w}{k_2} y - \frac{w}{k_2} y_0 \right)}, \quad (3)$$

$$\varphi(x, y, t) = \epsilon,$$

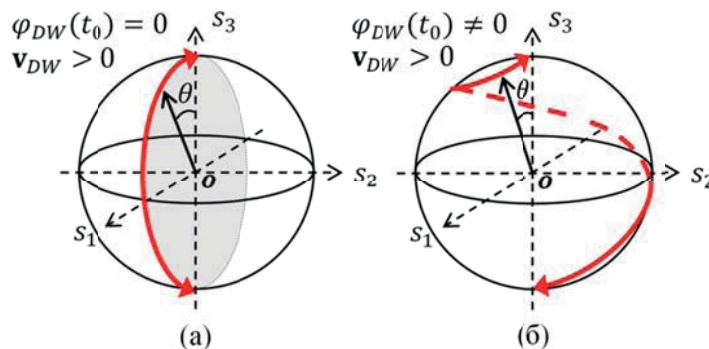


Рис. 1. Динамика $\mathbf{S}(s_1, s_2, s_3)$ 180-градусной движущейся доменной границы в изопространстве блоховской сферы S^2 при: а) $\varphi = 0$; б) $\varphi \neq 0$.

где $\theta(x, y, t)$ и $\varphi(x, y, t)$ – углы Эйлера. При соответствующем подборе параметров решение (3) можно представить также в следующих формах:

$$\begin{aligned}\theta(x, y, t) &= 2\operatorname{tg}^{-1}\left(e^{f(x, y, t)}\right), \quad \varphi(x, y, t) = \epsilon, \\ \theta(x, y, t) &= \cos^{-1}\left(\tanh(x, y, t)\right), \quad \varphi(x, y, t) = \epsilon, \\ \theta(x, y, t) &= \sin^{-1}\left(\pm \operatorname{sech}(x, y, t)\right), \quad \varphi(x, y, t) = \epsilon,\end{aligned}$$

которые являются эквивалентными выражению (3).

Заметим, что решение (3), в частности, при $\epsilon = 0, \pi$ и $\epsilon = \pi/2, 3\pi/2$ описывает динамику так называемых нееловских (N) и блоховских (B) доменных границ соответственно

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_{N(0, \pi)} &= \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \\ s_3 \end{pmatrix} = (1 + e^{2x})^{-1} \begin{pmatrix} \pm 2e^x \\ 0 \\ 1 - e^{2x} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{S}_{B(\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2})} &= \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \\ s_3 \end{pmatrix} = (1 + e^{2x})^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ \pm 2e^x \\ 1 - e^{2x} \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

В данном случае изоспиновые параметры s_i ($i = 1, 2, 3$) определены в следующем виде:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix},$$

где угол $\theta(x, y, t)$ представляет тип намагниченности доменной границы.

Эволюционные модели стационарных и движущихся топологических вихрей (2), а также модели их взаимодействия были исследованы нами ранее (см., например, [5-7]). В частности, были получены модели дальнедействующих взаимодействий, упругих столкновений и отражений, а также модели с поэтапной аннигиляцией взаимодействующих солитонов вихрей. В работе [8] авторами было проведено численное исследование процессов взаимодействия нееловских доменных границ (3) в рамках двумерной $O(3)$ НСМ (1), где были получены модели упругих столкновений, а также дальнедействующие и осциллирующие модели. В работе [9] было проведено численное исследование моделей двухсолитонных взаимодействий топологических решений вида (2) и (3) (при $\epsilon = 0$).

Результаты каждой серии вышеуказанных экспериментов можно охарактеризовать единым образом – поэтапным распадом топологических вихрей (2) на локализованные возмущения с половинными ($Q_t = 1/2$) значениями топологического заряда (индекса Хопфа). В каждом этапе распада наблюдается излучение энергии топологического вихря эквивалентное единичному топологическому заряду ($Q_t = 1$) в виде двух локализованных возмущений, движущихся вдоль плоскости доменной границы со скоростью $c = 1$ (см. рис. 2).

В примере, приведенном на рис. 2 топологический вихрь (2) с топологическим зарядом $Q_t = 3$ при лобовом ($\alpha = \pi/2$) столкновении с доменной границей поэтапно ($t = \{17.1, 21.0, 25.5\}$) распадется на 6 ($2Q_t$) локализованных возмущений с $Q_t = 1/2$, распространяющихся со скоростью света ($c = 1$) вдоль плоскости доменной границы нееловского типа ($\epsilon = 0$). При этом значение намагниченности в центре (поляризация)

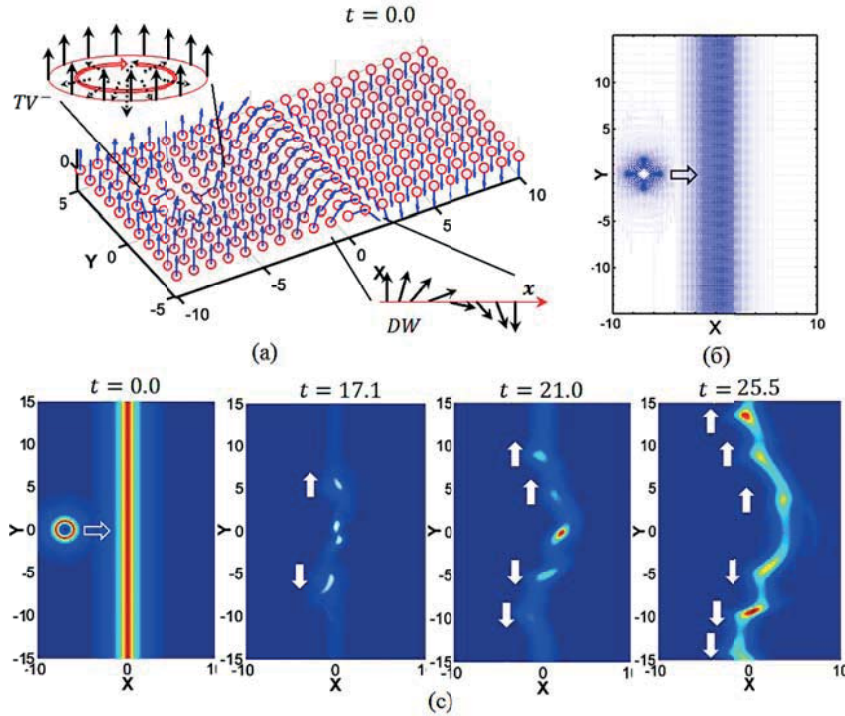


Рис. 2. Взаимодействие движущегося ($\mathbf{v}_{TV}(t_0) \approx 0.447$) топологического вихря (2) ($Q_t = 3$) с неподвижной ($\mathbf{v}_{DW}(t_0) = 0$) доменной границей (3) нееловского типа ($\epsilon = 0$): а) изоспиновая структура – $t = 0$; б) проекция $\mathbf{S}(s_1, s_2, s_3)$ на плоскость $z(x, y)$ (4) – $t = 0$; в) распад топологического вихря (2) на $2Q_t$ локализованных возмущений ($Q_{t(1, \dots, 6)} = 1/2$) – $t \in [0.0, 25.5]$.

вихря (2) равно $p = Q_t(r=0) = -1$ [10], а частота ω внутреннего вращения изотопического вектора $\mathbf{S}(s_1, s_2, s_3)$ доменной границы (3) равна нулю: $\phi(x, y, t) = \epsilon - \omega t$ (см. рис. 1, а).

Аналогичные результаты были получены в серии численных двухсолитонных экспериментов с различными параметрами системы взаимодействующих солитонов (2) и (3):

- $Q_t(TV) = 1, 2, \dots, 6$; – $0 < \alpha < \pi/2$;
- $\mathbf{v}_{TV}(t_0) \in [0.0, 0.893]$; – $\mathbf{v}_{DW}(t_0) \in [0.0, 0.707]$;
- $0 \leq \omega \leq 1$; – $p = \pm 1$.

В каждой серии вышеуказанных экспериментов наблюдается поэтапный распад топологического вихря (2) при взаимодействии с доменной границей (3) на $2Q_t$ локализованных возмущений, движущихся вдоль плоскости доменной границы со скоростью $c = 1$.

Во втором пункте настоящей работы приведены результаты численного моделирования взаимодействия топологических вихрей (2) и доменных границ (3) блоховского типа ($\epsilon = \pi/2, 3\pi/2$), которые оказались аналогичными случаю с нееловскими доменными границами [8].

Основная часть работы посвящена исследованию эволюции системы трехсолитонных взаимодействий, которая изложена в третьем и четвертом пунктах работы. В пятом и шестом пунктах соответственно обсуждены полученные результаты и подведены итоги настоящей работы.

Численные модели построены на основе методов теории конечных разностных схем, использованием свойств стереографической проекции, с учетом теоретико-

групповых особенностей конструкций класса $O(N)$ НСМ теории поля. По периметру двумерной области моделирования установлены специально разработанные граничные условия, которые поглощают линейные волны возмущений, излучаемые взаимодействующими солитонными полями. Таким образом, осуществлено моделирование процессов взаимодействия локализованных решений в бесконечном двумерном фазовом пространстве. Разработан программный модуль, позволяющий провести комплексный анализ эволюции многосолитонных взаимодействующих решений НСМ теории поля, с учетом ее групповых особенностей в двумерном псевдоевклидовом пространстве [5-9]. Использована трехслойная разностная схема второго порядка точности $O(r^2 + h^2)$ на пятиточечном шаблоне с весами явного типа [11]. Аппроксимация проведена на прямоугольной сетке $L(x, y)$, в кубе (h_{xy}, t_τ) : $\tau_{\max}(2E^{+4})$. Устойчивость разностной схемы удовлетворяет требованиям для гиперболических систем уравнений: $\tau \leq \min(h / |\Delta|_{\max})$.

Для численной схемы, применен алгоритм, разработанный на основе предложенных в работах [12,13] методов исследования, где использованы свойства стереографической проекции: точки верхней полусферы ($s_3 > 0$) проецируются на касательную комплексную плоскость $z(x, y)$, проходящую через «северный полюс»; точки нижней полусферы ($s_3 < 0$) проецируются на касательную плоскость, проходящую через «южный полюс» блоховской сферы S^2 . В точках «экватора» ($s_3 = 0$) специальным образом производится «прошивка» решения, и, таким образом, осуществляется взаимно однозначная проекция (компактификация $(S^2 - R_{comp}^2)$) всех точек комплексной плоскости $z(x, y)$

$$z = x + iy = \frac{s_1 + is_2}{1 \pm s_3} = tg \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \quad (4)$$

включая $(x, y) = \infty$ и сферы S^2 : $s_i s_i = 1$, ($i = 1, 2, 3$). С более подробным описанием разработанного алгоритма и численной схемы можно ознакомиться в [14].

2. Взаимодействие топологических вихрей с блоховской доменной границей

В этой части работы приведены результаты компьютерного моделирования лобовых столкновений топологических вихрей (2) с доменными границами (3) блоховского типа. В таблице 1 в общем виде отображены параметры проведенных численных экспериментов системы взаимодействующих топологических солитонов (2) и (3). Эксперименты проведены в двумерной пространственной сетке $L(x, y) = \{0 \leq x \leq 2001; 0 \leq y \leq 3001\}$, среднее время моделирования $t \in [0, 60]$ (10^4 итерационных циклов).

На рис. 3, в качестве примера отображен процесс эволюции одной из полученных моделей данной серии – лобового столкновения движущегося со скоростью $v(t_0) \approx 0.196$ топологического вихря, обладающего топологическим зарядом $Q_t = -3$ с неподвижной доменной границей блоховского $3\pi/2$ -типа с нулевой частотой вращения вектора АЗ-поля ($\omega(t_0) = 0$).

Таблица 1

Расчетные параметры системы взаимодействующих топологических решений (2) и (3)

№	Топологический вихрь (→)		(←) Доменная стенка		
	$v(t_0)$	$-Q_t$	$-v(t_0)$	$\omega(t_0)$	ϵ
1.	$0 \leq v(t_0) < 1$	$1, \dots, 6$	$0 \leq v(t_0) < 1$	$ \omega(t_0) \leq 1$	$\pi / 2$
2.	$0 \leq v(t_0) < 1$	$1, \dots, 6$	$0 \leq v(t_0) < 1$	$ \omega(t_0) \leq 1$	$3\pi / 2$

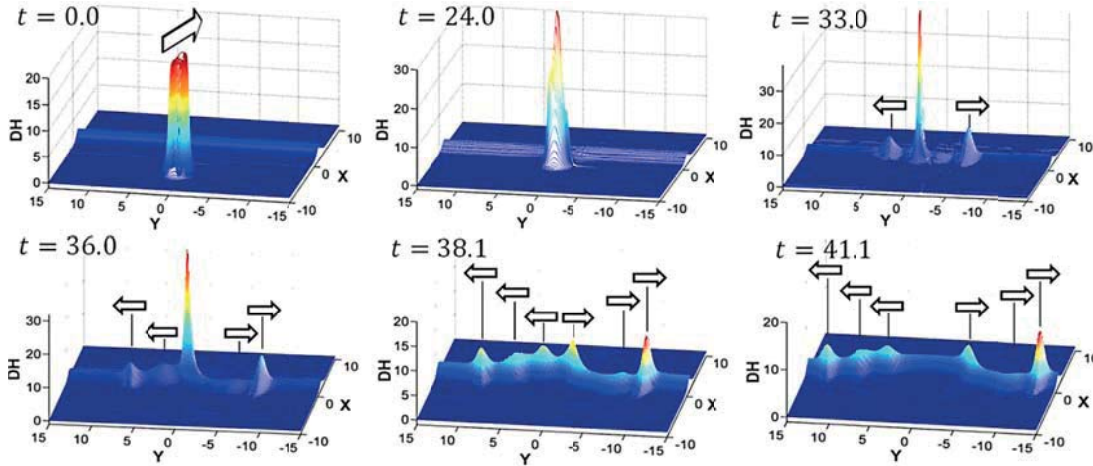


Рис. 3. Эволюция плотности энергии (DH) лобового столкновения движущегося ($\mathbf{v}(t_0) \approx 0.196$) топологического вихря (2) ($Q_t = -3$) с неподвижной ($\mathbf{v}(t_0) = 0$) блоховской ($\epsilon = 3\pi/2$) доменной границей (3). Общее время моделирования: $t \in [0, 60]$.

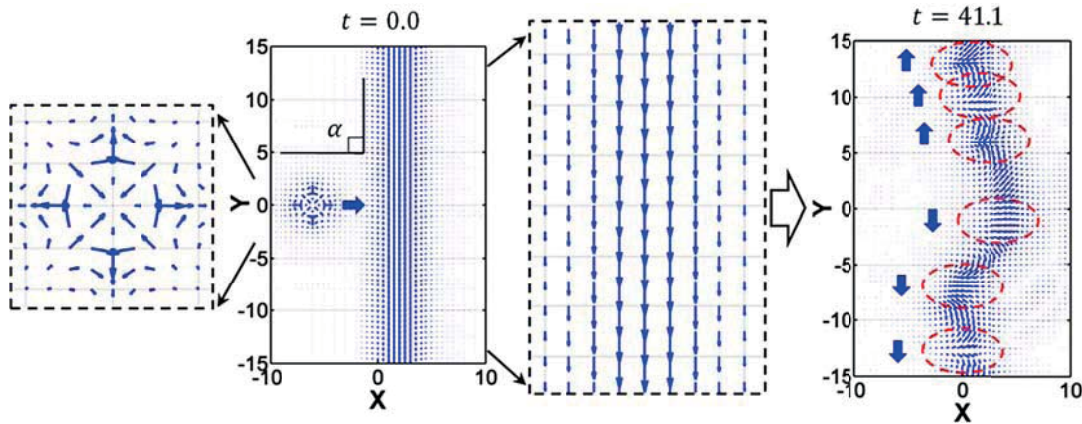


Рис. 4. Динамика проекции изотопического вектора $\mathbf{S}(s_1, s_2, s_3)$ на двумерную сетку $L(x, y)$ ($z(x, y)$ (4)) процесса лобового столкновения движущегося ($\mathbf{v}(t_0) \approx 0.196$) топологического вихря (2) ($Q_t = -3$) с неподвижной ($\mathbf{v}(t_0) = 0$) блоховской ($\epsilon = 3\pi/2$) доменной границей (3). Общее время моделирования: $t \in [0, 60]$.

При столкновении топологического вихря с доменной границей ($t = 24$) плотности энергии (DH) взаимодействующих солитонных полей испытывают некоторые возмущения. Далее происходит поэтапный ($t = 33, 36, 38$) распад топологического вихря на 3 пары локализованных возмущений, которые распространяются вдоль плоскости доменной границы со скоростью $c = 1$ в противоположных $\pm y$ -направлениях (см. рис. 3). Проекция изоспиновой динамики данной модели на двумерную сетку $L(x, y)$ ($z(x, y)$ (4)) при $t = 0$ и $t = 41.1$ приведена на рис. 4. Комплекс численных экспериментов (см. таблицу 1) показал, что аналогично результатам предыдущих работ [8, 9, 14] с доменными границами нееловского типа характер взаимодействия топологического вихря (2) с блоховскими доменными границами (3) не зависит от значения скорости движущихся солитонов ($\mathbf{v}(t_0)$) и частоты вращения вектора АЗ-поля ($\omega(t_0)$).

Таким образом, исходя из результатов работы [9] и результатов, полученных при компьютерном моделировании взаимодействия топологических вихрей с блоховскими доменными границами в настоящей работе, можно сформулировать ряд установленных свойств полученных моделей, которые приведены ниже.

А) Взаимодействие топологических вихрей вида (2), обладающих топологическим инвариантом Q_t с 180-градусными доменными границами (π -кинк) вида (3) нееловского ($\epsilon = 0, \pi$) или блоховского ($\epsilon = \pi/2, 3\pi/2$) типов приведет к поэтапному распаду топологического вихря на $2Q_t$ локализованных возмущений. При этом доменная стенка сохраняет структурную устойчивость, испытывая лишь некоторые возмущения плотности энергии (ДН).

Б) Каждое из локализованных возмущений обладает топологическим инвариантом $Q_t = 1/2$ и распространяется вдоль плоскости доменной границы со скоростью $c = 1$ (попарно в противоположные направления, см. рис. 3–4).

В) Результаты столкновений в данной конфигурации, в общем, не зависят от скорости движения ($\mathbf{v}(t_0)$) взаимодействующих солитонов, частоты ($\omega(t_0)$) вращения вектора АЗ-поля и углового параметра ($0 < \alpha < \pi$) столкновения.

В следующих пунктах рассмотрены некоторые виды трехсолитонных взаимодействий, состоящих из композиций топологических решений (2) и (3). Получены модели распада топологических вихрей (2) на локализованные возмущения с единичными значениями топологического заряда, сопровождающееся парной аннигиляцией доменных границ (3).

3. Трехсолитонные взаимодействия: кинк (0) – вихрь – антикинк (π)

В предыдущих (двухсолитонных) экспериментах (см., например, рис. 3–4) локализованным возмущениям (с $Q_t = 1/2$), распространяющимся вдоль плоскости доменной границы соответствует движущаяся со скоростью $c = 1$ область перехода между локальными вакуумными состояниями ($0, \pm\pi$, для нееловских доменных границ)

$$S(\uparrow) \leftrightarrow S(\downarrow).$$

В этом случае определенный интерес представляет рассмотрение процессов взаимодействия топологических вихрей (2) с 360-градусными доменными границами (2π -кинк). Отметим, что 180-градусные доменные границы вида (3) (π -кинк) являются точными решениями исследуемой О(3) НСМ (1) и соответствующей ей в частном случае ($\phi(x, y, t) = 0$) уравнения синус-Гордона вида [8,9,14]

$$2\Box\theta = -\sin(2\theta).$$

В этой части работы рассмотрим модель трехсолитонных взаимодействий следующей конфигурации:

$$\pi\text{-кинк} \rightarrow \text{топологический вихрь} \leftarrow \pi\text{-антикинк}$$

Для случая топологических вихрей (2) с $Q_t = 3$ и нееловских 180-градусных доменных границ вида (3) (π -кинк – 0 типа, π -антикинк – π типа) пробная функция примет следующий вид:

$$S_{K(0)+V+Ak(\pi)} = S_{Kink}(0) \rightarrow S_{Vortex} \leftarrow S_{Antikink}(\pi), \quad (5)$$

где

$$S_{Kink}(0) = (1 + e^{2x})^{-1} \begin{pmatrix} 2e^x \\ 0 \\ 1 - e^{2x} \end{pmatrix},$$

$$S_{Vortex} = 2(1 + r^6)^{-1} \begin{pmatrix} (x^3 - 3xy^2)\cos\tau - (y^3 - 3x^2y)\sin\tau \\ (3x^2y - y^3)\cos\tau + (3xy^2 - x^3)\sin\tau \\ 2^{-1}(1 - r^6) \end{pmatrix},$$

$$S_{Antikink}(\pi) = -(1 + e^{2x})^{-1} \begin{pmatrix} 2e^x \\ 0 \\ 1 - e^{2x} \end{pmatrix}.$$

Таким образом, начальное условие для конфигурации (5) изоспиновых полей принимает следующий вид:

$$S_{K(0)+V+Ak(\pi)} = \Lambda_3 \begin{pmatrix} \xi_1 \cos \tau + \xi_2 \sin \tau \\ \xi_2 \cos \tau - \xi_1 \sin \tau \\ -2^{-1}(1 - r^6) \end{pmatrix}, \quad (5.1)$$

$$\Lambda_3 = 2(1 + r^6)^{-1},$$

$$\xi_1(x, y) = x^3 - 3xy^2, \quad \xi_2(x, y) = 3x^2y - y^3.$$

На рис. 5 приведена иллюстрация компьютерной модели трехсолитонного поля (5.1) при $t = 0$.

На основе конфигурации (5) разработаны аналогичные (5.1) начальные условия с вариацией параметров системы трехсолитонных взаимодействий (см. таблицу 2).

На основе аналитических расчетов проведены численные моделирования и получены эволюционные модели, качественно отличающиеся от результатов предыдущих экспериментов по двухсолитонным взаимодействиям (см., например, рис. 6). В частности, общим результатом всех полученных трехсолитонных моделей является аннигиляция доменных границ и распад топологических вихрей на локализованные возмущения с единичными значениями топологического заряда.

На рис. 6 приведены результаты проведенных экспериментов конфигурации (5) для движущихся со скоростью $v(t_0) \approx \pm 0.0995$ в противоположных $\pm x$ -направлениях 180-градусных нееловских доменных границ ($\epsilon = 0, \pi$) и неподвижных топологических вихрей с $Q_i = 1, \dots, 4$.

Таблица 2

Расчетные параметры моделей трехсолитонных взаимодействий (5)

Доменная стенка: ($\rightarrow$) кинк ($\epsilon = 0, \pi, \pi/2, 3\pi/2$)		Топологический вихрь		($\leftarrow$) Доменная стенка: антикинк ($\epsilon = 0, \pi, \pi/2, 3\pi/2$)	
$v(t_0)$	$\omega(t_0)$	$v(t_0)$	$ Q_i $	$v(t_0)$	$\omega(t_0)$
$0 \leq v(t_0) < 1$	$ \omega(t_0) \leq 1$	0	1, ..., 6	$0 \leq v(t_0) < 1$	$ \omega(t_0) \leq 1$

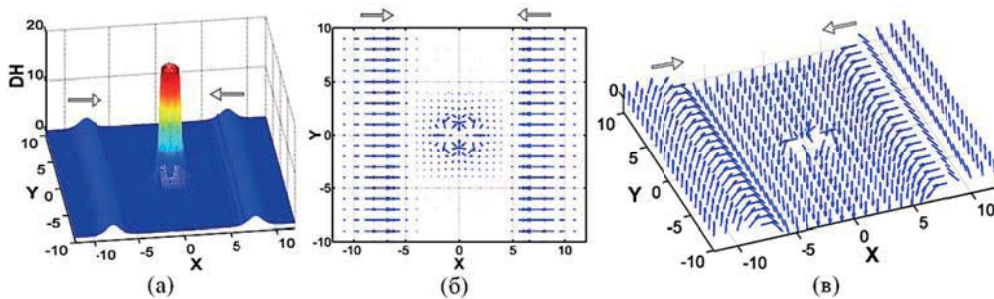


Рис. 5. Трехсолитонное поле модели (5.1) конфигурации (5) при $t = 0$: а) плотность энергии (DH); б) проекция $S(s_1, s_2, s_3)$ на пространственную сетку $L(x, y)$ ($z(x, y)$ (4)); в) изоспиновая структура модели (5.1).

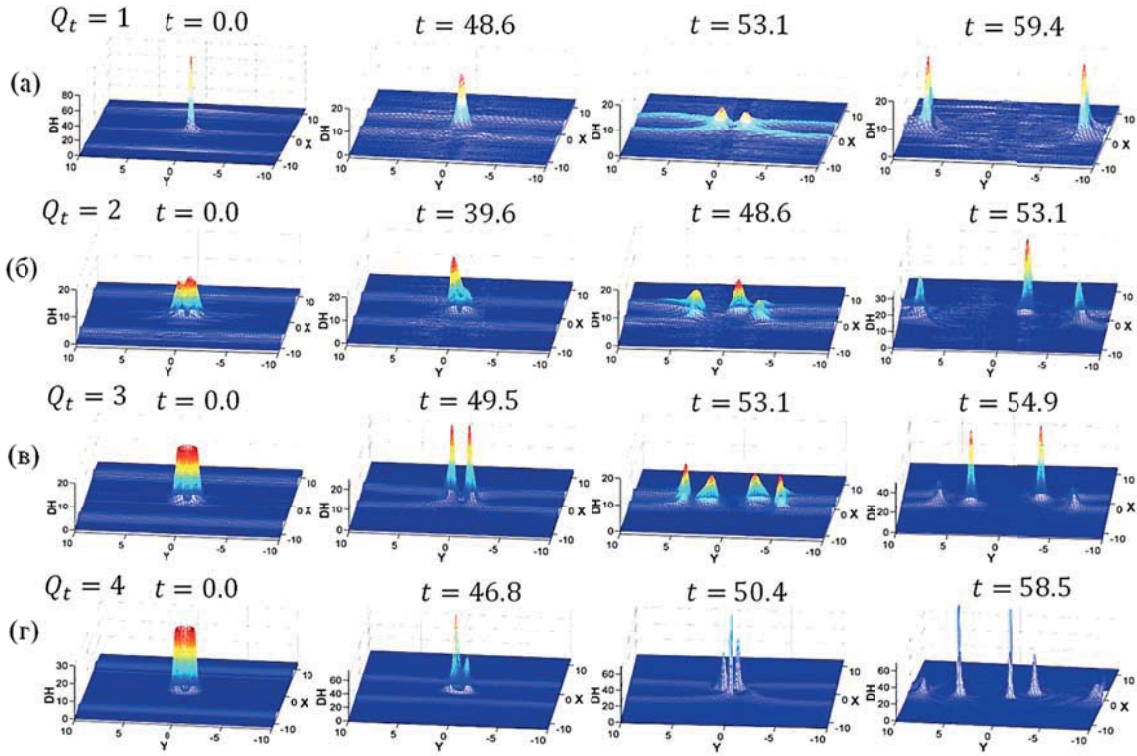


Рис. 6. Эволюция плотности энергии (DH) трехсолитонных взаимодействий (5) неподвижного топологического вихря (2) ($Q_t = 1, \dots, 4$) с движущимися ($\mathbf{v}(t_0) \approx \pm 0.0995$) нееловскими доменными границами (3) ($\epsilon = 0, \pi$): а) $Q_t = 1$; б) $Q_t = 2$; в) $Q_t = 3$; г) $Q_t = 4$. Общее время моделирования: $t \in [0, 60]$.

На рис. 6, а приведена эволюция модели конфигурации (5) при $Q_t = 1$, где

$$\mathbf{S}_{K(0)+V+Ak(\pi)} = \Lambda_1 \begin{pmatrix} \xi_1 \cos \tau + \xi_2 \sin \tau \\ \xi_2 \cos \tau - \xi_1 \sin \tau \\ -2^{-2}(1 - 4r^2) \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

$$\Lambda_1 = 4(1 + 4r^2)^{-1}, \quad \xi_1(x, y) = x, \quad \xi_2(x, y) = y.$$

В процессе взаимодействия (см. рис. 6, а, $t = 53.1$) топологический вихрь распадается на 2 локализованных возмущения, каждое из которых обладает половинным значением топологического заряда: $Q_t = 1/2$. На месте распада топологического вихря (x_0, y_0) происходит разрыв каждой из доменных границ с последующим кинк+антикинк объединением (замыкание). При этом образовавшиеся локализованные возмущения действуют в качестве переходного поля ($\theta = 0, \pm\pi$). Далее наблюдается процесс распространения локализованных возмущений в $\pm y$ -направлениях со скоростью $c = 1$ (см. рис. 6, а, при $t = 59.4$), сопровождающийся аннигиляцией доменных границ.

Аналогичные процессы наблюдаются также при $Q_t = 2, 3, 4$ (см. рис. 6, б–г). В остальных случаях $Q_t = 2$ и $Q_t = 4$ изоспиновые поля трехсолитонного взаимодействия описываются следующими начальными условиями:

$$\mathbf{S}_{K(0)+V+Ak(\pi)} = \Lambda_2 \begin{pmatrix} \xi_1 \cos \tau + \xi_2 \sin \tau \\ \xi_2 \cos \tau - \xi_1 \sin \tau \\ -2^{-1}(1 - r^4) \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

$$\Lambda_2 = 2(1+r^4)^{-1}, \quad \xi_1(x, y) = x^2 - y^2, \quad \xi_2(x, y) = 2xy.$$

$$S_{K(0)+V+Ak(\pi)} = \Lambda_4 \begin{pmatrix} \xi_1 \cos \tau + \xi_2 \sin \tau \\ \xi_2 \cos \tau - \xi_1 \sin \tau \\ -2^{-1}(1-r^8) \end{pmatrix}, \quad (5.4)$$

$$\Lambda_4 = 2(1+r^4)^{-1}, \quad \xi_1(x, y) = x^4 - 6x^2y^2 + y^4, \quad \xi_2(x, y) = 4xy(x^2 - y^2).$$

В отличие от случая рис. 6, а при $Q_t > 1$ (см. рис. 6, б–г) при взаимодействии топологический вихрь распадается на $Q_t - 1$ локализованных возмущений с единичными значениями топологического заряда. Недостающая единица топологического заряда распространяется вдоль $\pm y$ -направлений (со скоростью $c = 1$) в виде локализованных возмущений с $Q_t = 1/2$. Как и в предыдущем эксперименте, описанном на рис. 6, а во всех экспериментах конфигурации (5) распространение локализованных возмущений вдоль $\pm y$ -направлений (параллельных плоскости доменных границ) сопровождается аннигиляцией доменных границ (см. рис. 6, б–г).

На рис. 7 приведены интегралы энергии (En) системы трехсолитонных взаимодействий (5), описанных на рис. 6. Энергия (En_K, En_{Ak}) доменной границы (3) в данной конфигурации эквивалентна примерно 80.34462 единицам (см. рис. 7, а). Энергия (En_V) топологических вихрей (2) возрастает пропорционально значениям топологического заряда от $En_V \approx 33.59$ для $Q_t = 1$ (рис. 7, а) до $En_V \approx 107.45$ для $Q_t = 4$ (рис. 7, г).

В наших компьютерных моделях общая энергия (En) трехсолитонной системы состоит из энергии взаимодействующих топологических солитонов (2) и (3) а также до-

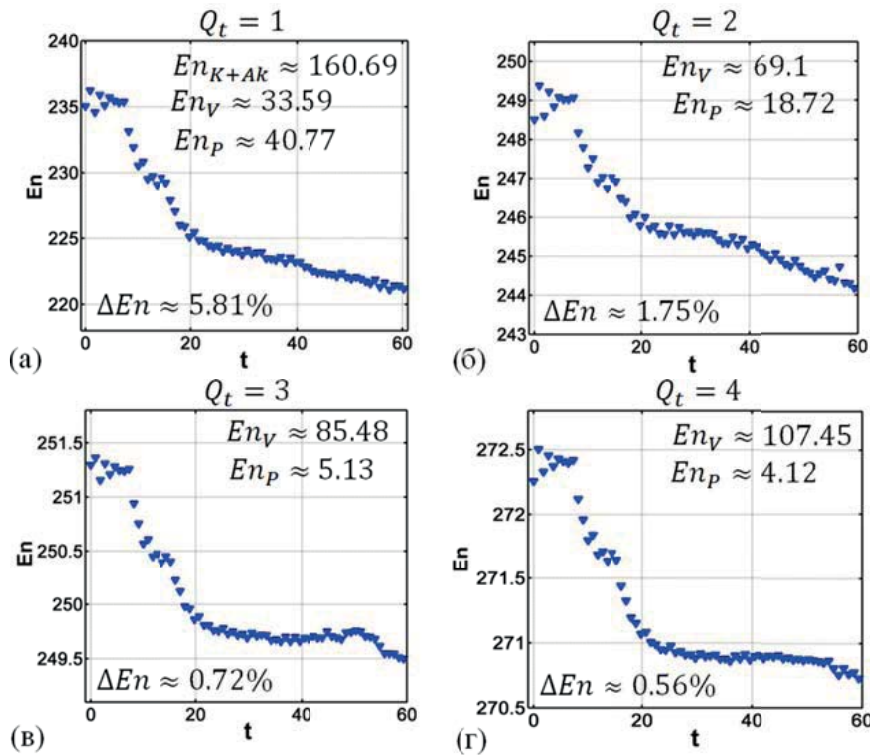


Рис. 7. Интеграл энергии (En) трехсолитонных взаимодействий (5) неподвижного топологического вихря (2) ($Q_t = 1, \dots, 4$) с движущимися ($v(t_0) \approx \pm 0.0995$) неееловскими доменными границами (3) ($\epsilon = 0, \pi$): а) $Q_t = 1$; б) $Q_t = 2$; в) $Q_t = 3$; г) $Q_t = 4$. Общее время моделирования: $t \in [0, 60]$.

полнительной энергии возмущений (En_p) изоспиновых полей, которые уменьшаются увеличением значений Q_t – с $En_p \approx 40$ при $Q_t = 1$ до $En_p \approx 4$ при $Q_t = 4$ (см. рис. 7, а, з). Дополнительная энергия En_p является следствием недостаточной локализации топологических вихрей (2) при $Q_t = 1, 2$, которая приводит к возникновению лишних волн возмущений, оказывающих отрицательное влияние эволюции моделируемых процессов. В этом случае, следует заметить, что на границах области моделирования $L(x, y)$ наших моделей установлены специальные затухающие условия, поглощающие волны возмущений [5-9,14].

В следующем пункте приведены результаты аналогичных экспериментов для доменных границ (3) при $\epsilon = 0$ и значений $Q_t = 2, 3, 4$ топологических вихрей (2), где изменена топологическая конфигурация одной из взаимодействующих доменных границ: антикинк (π) $\rightarrow$ антикинк (0). Получены модели взаимодействий аналогичные моделям настоящего пункта, но отличающиеся значениями топологического заряда излучаемых топологическими вихрями локализованных возмущений.

4. Трехсолитонные взаимодействия: кинк (0) – вихрь – антикинк (0)

Приведем результаты серии компьютерных экспериментов по трехсолитонному взаимодействию топологических вихрей (2) с $Q_t = 2 - 4$ с нееловскими 180-градусными доменными границами вида (3) (π -кинк и π -антикинк – 0 типа) следующей конфигурации:

$$S_{K(0)+V+Ak(0)} = S_{Kink}(0) \rightarrow S_{Vortex} \leftarrow S_{Antikink}(0), \quad (6)$$

В этом случае начальное условие соответствующее (6) состоит из следующих полей:

$$\begin{aligned} \theta_v(x, y, t) &= 2\text{tg}^{-1}\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^{Q_t}, & \varphi_v(x, y, t) &= 2\chi - \tau \\ \theta_k(x, y, t) &= 2\text{tg}^{-1}(e^x), & \varphi_k(x, y, t) &= 0, \\ \theta_{ak}(x, y, t) &= 2\text{tg}^{-1}(e^{-x}), & \varphi_{ak}(x, y, t) &= 0, \end{aligned} \quad (6.1)$$

где $Q_t = 2, 3, 4$, r_1 – радиус локализации топологического поля ($r_2 = 1$).

На рис. 8 приведена иллюстрация компьютерной модели трехсолитонного поля (6.1) для $Q_t = 4$ при $t = 0$.

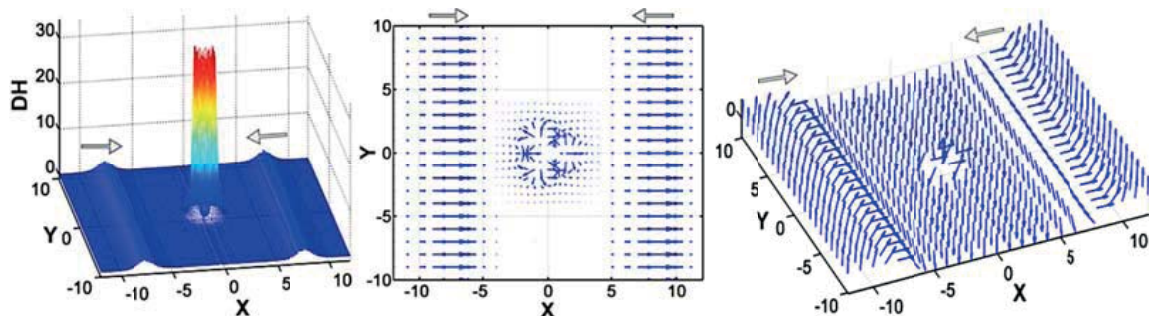


Рис. 8. Трехсолитонное поле модели (6.1) конфигурации (6) для $Q_t = 4$ при $t = 0$: а) плотность энергии (DH); б) проекция $\mathbf{S}(s_1, s_2, s_3)$ на пространственную сетку $L(x, y)$ ($z(x, y)$ (4)); в) изоспиновая структура модели (6.1).

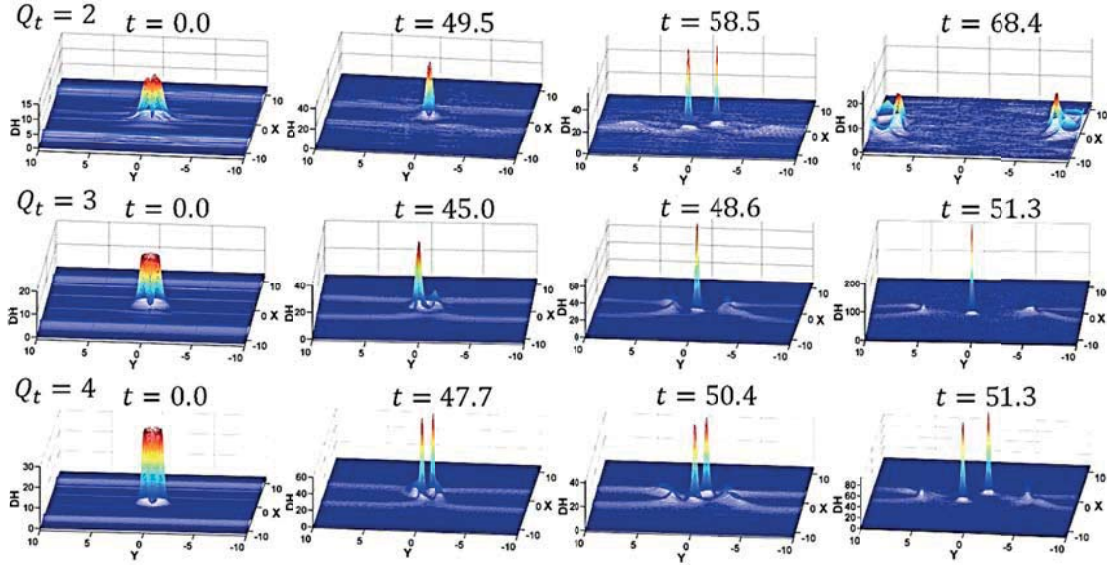


Рис. 9. Эволюция плотности энергии (DH) трехсолитонных взаимодействий (6) неподвижного топологического вихря (2) ($Q_t = 2, 3, 4$) с движущимися ($v(t_0) \approx \pm 0.0995$) нееловскими доменными границами (3) ($\epsilon = 0$): а) $Q_t = 2$; б) $Q_t = 3$; в) $Q_t = 4$. Общее время моделирования: $t \in [0, 70]$.

Проведением серии численных расчетов конфигурации (6), получены эволюционные модели трехсолитонных взаимодействий, которые по основным параметрам аналогичны моделям, полученным в экспериментах предыдущего пункта. Единственное отличие новых моделей заключается в процессе распада топологических вихрей, где объединение и аннигиляция доменных границ происходит с участием локализованных возмущений, обладающих единичными ($Q_t = 1$) значениями топологического заряда.

На рис. 9 приведены результаты проведенных экспериментов по конфигурации (6) для движущихся со скоростью $v(t_0) \approx \pm 0.0995$ в противоположных $\pm x$ -направлениях 180-градусных нееловских доменных границ ($\epsilon = 0$) и неподвижных топологических вихрей с $Q_t = 2, 3, 4$.

На рис. 10 приведены интегралы энергии (En) систем трехсолитонных взаимодействий (5) и (6). Энергии (En_K , En_{Ak}) доменной границы (3), а также топологических вихрей (2) (En_V) в конфигурации (6) аналогичны экспериментам предыдущего пункта.

Как видно из рис. 10, система трехсолитонных взаимодействий $S_{K(0)+V+Ak(0)}$ обладает относительно меньшим значением энергии дополнительных возмущений (En_p) (см. рис. 7).

5. Обсуждение полученных результатов

Результаты экспериментов по трехсолитонным взаимодействиям, приведенные в третьем пункте, очевидно, можно получить также при следующей (симметричной) конфигурации:

$$S_{K(\pi)+V+Ak(0)} = S_{Kink}(\pi) \rightarrow S_{Vortex} \leftarrow S_{Antikink}(0). \quad (7)$$

Аналогично, результаты экспериментов, приведенные в четвертом пункте настоящей статьи можно получить при симметричной замене параметров доменных границ (3) с $\epsilon = 0$ на $\epsilon = \pi$:

$$S_{K(\pi)+V+Ak(\pi)} = S_{Kink}(\pi) \rightarrow S_{Vortex} \leftarrow S_{Antikink}(\pi). \quad (8)$$

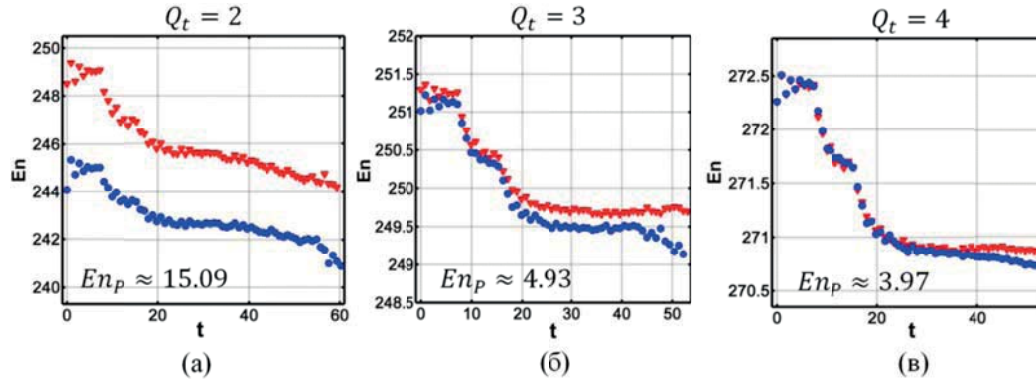


Рис. 10. Интегралы энергий (En) трехсолитонных взаимодействий (5) ($\epsilon = 0, \pi$: $\blacktriangledown$) и (6) ($\epsilon = 0$: $\bullet$) неподвижного топологического вихря (2) ($Q_t = 2, 3, 4$) с движущимися ($v(t_0) \approx \pm 0.0995$) неееловскими доменными границами (3): а) $Q_t = 2$; б) $Q_t = 3$; в) $Q_t = 4$. Общее время моделирования: $t \in [0, 70]$.

Численные эксперименты, проведенные по схемам (7) и (8) показали, что полученные результаты абсолютно идентичны результатам, приведенным соответственно в третьем и четвертом пунктах настоящей статьи. Исследуя вопрос разных значений En_p (см. рис. 10) в моделях, описанных на рис. 6 и 9, мы провели эксперименты по двухсолитонным взаимодействиям следующих конфигураций:

$$S_{K(0)Ak(0)} = S_{Kink}(0) \rightarrow \leftarrow S_{Antikink}(0), \quad (9a)$$

$$S_{K(\pi)Ak(\pi)} = S_{Kink}(\pi) \rightarrow \leftarrow S_{Antikink}(\pi), \quad (9б)$$

$$S_{K(0)Ak(\pi)} = S_{Kink}(0) \rightarrow \leftarrow S_{Antikink}(\pi), \quad (9в)$$

$$S_{K(\pi)Ak(0)} = S_{Kink}(\pi) \rightarrow \leftarrow S_{Antikink}(0). \quad (9г)$$

Полученные эволюционные модели показали, что при взаимодействии однородных (9а, 9б) доменных границ вида (3) происходит свободное их прохождение друг сквозь друга (см. рис. 11, а). Но, в отличие от взаимодействий однородных топологических солитонов при взаимодействии доменных границ вида (3) отличающихся параметром $\epsilon = 0, \pi$ (9в, 9г) мы наблюдаем проявление дальнедействующих сил (см. рис. 11, б).

Таким образом, численные исследования показали, что в полевых конфигурациях (5) и (7) трехсолитонных взаимодействий следует учитывать также наличие дальнедействующих сил между движущимися доменными границами.

Отдельно рассмотрим основные результаты настоящей работы – аннигиляция доменных границ (3) и распад топологического вихря (2) на локализованные возмущения, обладающие единичным топологическим зарядом ($Q_t = 1$). Во всех предыдущих наших экспериментах по двухсолитонным взаимодействиям «вихрь-кинк» (см., например, [9, 14]) доменные границы сохраняли устойчивость независимо от скорости налетающего вихря, значения топологического заряда ($Q_t = 1, \dots, 6$) и частоты $\omega(t_0)$ вращения вектора АЗ-поля. При этом топологические вихри при столкновении с доменными границами поэтапно распадались на $2Q_t$ локализованных возмущений, обладающих половинными значениями топологических зарядов ($Q_t = 1/2$). В каждом этапе топологический вихрь излучает пару локализованных возмущений движущихся со скоростью $c = 1$ в противоположные стороны вдоль доменной границы. Таким образом, результаты всех экспериментов в данном направлении как с неееловскими, так и с блоховскими доменными границами (см. таблицу 1) обладают общим свойством – сохранения

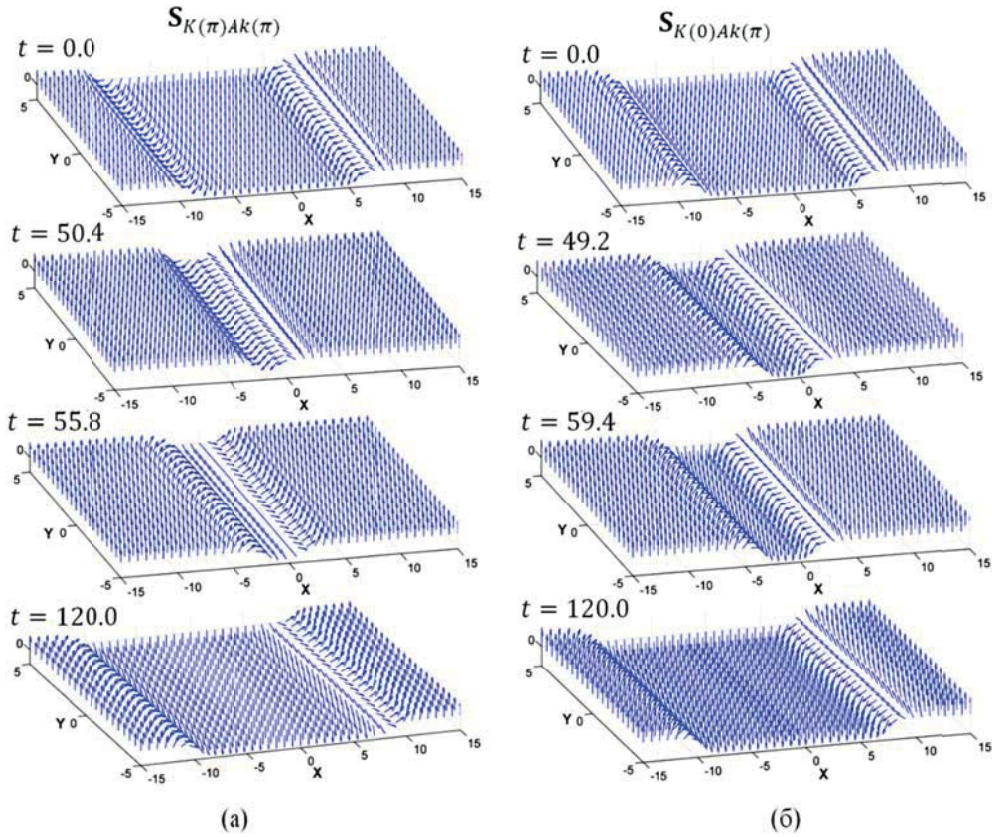


Рис. 11. Изоспиновая структура систем (9б) и (9в) взаимодействующих доменных границ вида (3), движущихся со скоростью $\mathbf{v}(t_0) \approx \pm 0.0995$: а) $S_{K(\pi)Ak(\pi)}$; б) $S_{K(0)Ak(\pi)}$. Общее время моделирования: $t \in [0, 120]$.

устойчивости доменных границ и распад топологических вихрей на локализованные возмущения с $Q_t = 1/2$.

Также, следует отметить результаты исследований двухсолитонных взаимодействий вида «кинк-антикинк», аналогичных, приведенным на рис. 11 экспериментам (см., например, [8]). Во всех экспериментах данной серии 180-градусные доменные границы сохраняли структурную устойчивость независимо от значений скорости их движения $\mathbf{v}(t_0)$ (до столкновения) и частоты $\omega(t_0)$ вращения изотопического спина.

Таким образом, в наших экспериментах по трехсолитонным взаимодействиям модели аннигиляции доменных границ получены впервые. Как было отмечено выше, процесс аннигиляции доменных границ происходит одновременно с распадом топологических вихрей на локализованные возмущения (см. рис. 6 и 9). В экспериментах настоящей работы указанный процесс распада происходит двумя способами:

Распад на $Q_t - 1$ локализованных возмущений с единичным топологическим зарядом и на 2 локализованных возмущения с половинными значениями топологического заряда. При этом последние распространяются вдоль доменной границы (одновременно с ее аннигиляцией), а оставшиеся $Q_t - 1$ локализованных возмущений свободно эволюционируют, сохраняя устойчивость вплоть до конца времен моделирования.

Распад на Q_t локализованных возмущений с единичным топологическим зарядом. При этом 2 локализованных возмущения распространяются вдоль доменной границы (одновременно с ее аннигиляцией), а оставшиеся $Q_t - 2$ локализованных возмущений свободно эволюционируют, сохраняя устойчивость вплоть до конца времен моделирования.

Первому способу соответствуют конфигурации (5) и (7), второму способу соответствуют конфигурации (6) и (8).

Заметим, что во всех экспериментах настоящей работы локализованные возмущения, формирующиеся после распада топологических вихрей (2) обладают либо половинным ($Q_t = 1/2$), либо единичным ($Q_t = 1$) значением топологического заряда. Однако в предыдущих наших экспериментах по взаимодействию топологических вихрей (см., например, [14,15]) при их распаде образовавшиеся локализованные возмущения обладали произвольным значением Q_t , хотя общая сумма топологических зарядов системы взаимодействующих солитонов всегда сохранялась.

Отметим также, что топологические вихри вида (2) являются моделями квазичастиц, состоящих из объединенных в кольцеобразную форму локальных вихреобразных структур, количество которых равно значению топологического заряда вихря Q_t [14]. Общая изоспиновая структура двух 180-градусных (π -кинк/ π -антикинк) доменных границ вида (3) при непосредственном взаимодействии в некоторый момент времени образуют 360-градусную топологическую структуру (2π -кинк). Численные эксперименты показывают, что взаимодействие данной 360-градусной структуры с топологическим вихрем приводит к распаду последней на составляющие – локальные вихреобразные структуры с $Q_t = 1$.

6. Заключение

Таким образом, наши исследования показали, что в (2+1)-мерной $O(3)$ нелинейной сигма-модели (1) трехсолитонные взаимодействия доменных границ (π -кинков) вида (3) с топологическим вихрем (белавин-поляковским солитоном) вида (2) приводят к аннигиляции доменных границ и полному распаду топологического вихря на локализованные возмущения. При этом два образовавшихся локализованных возмущения движутся вдоль плоскости аннигилирующих доменных границ со скоростью $c = 1$. Остальные локализованные возмущения с единичными значениями топологического заряда сохраняют устойчивость и эволюционируют до конца времен моделирования.

Разработаны алгоритм, численные схемы и комплексы компьютерных программ для исследования динамики взаимодействия системы трехсолитонных взаимодействий, состоящей из топологического вихря и двух 180-градусных нееловских ($0, \pi$) и блоховских ($\pi/2, 3\pi/2$) доменных границ в (2+1)-мерной анизотропной $O(3)$ нелинейной сигма-модели. Предложенный метод и комплекс программ позволяют, в частности: определять энергию и плотность энергии системы взаимодействующих солитонов; ускорять их движение до скоростей сравнимых со скоростью света; внести изменения в изоспиновую динамику топологических полей.

Достоверность полученных моделей обеспечивается положительными результатами апробации используемых методов для известных задач (солитонных решений уравнения синус-Гордона), высокой точностью сохранения интеграла энергии системы взаимодействующих солитонов и сопоставления построенных моделей с известными результатами других авторов, а также с практическими экспериментами (см., например, [14,16]).

Литература

1. Поляков А.М. Калибровочные поля и струны // Ижевск: Издательский дом «Удмуртский университет», 1999, 312 с.
2. К. Ициксон, Ж.-Б. Зюбер. Квантовая теория поля: Пер. с англ. // М.: Мир, 1984, т.2. 400 с.
3. Цвелик А.М. Квантовая теория поля в физике конденсированного состояния. Пер. с англ. // М.: Физматлит, 2004, 320 с.
4. Белавин А.А., Поляков А.М. Метастабильные состояния двумерного изотропного ферромагнетика // ЖЭТФ, 1975, **22** (10), 503-506.

5. Муминов Х.Х., Шокиров Ф.Ш. Взаимодействие и распад двумерных топологических солитонов $O(3)$ векторной нелинейной сигма-модели // ДАН РТ, 2011, **54** (2), 110 – 114.
6. Муминов Х.Х., Шокиров Ф.Ш. Динамика взаимодействий двумерных топологических солитонов в $O(3)$ нелинейной векторной сигма-модели // ДАН РТ, 2010, **53** (9), 679-684.
7. Муминов Х.Х., Шокиров Ф.Ш. Динамические и топологические солитоны в нелинейных сигма-моделях // Душанбе: Издательство «Дониш», 2014, 387с.
8. Муминов Х.Х., Шокиров Ф.Ш. Динамика взаимодействия доменных границ в $(2+1)$ -мерной $O(3)$ нелинейной сигма-модели // Известия АН РТ, **4** (161), 2015, 57-64.
9. Муминов Х.Х., Шокиров Ф.Ш. Динамика взаимодействия топологических вихрей с доменной стенкой в $(2+1)$ -мерной нелинейной сигма-модели // ДАН РТ, 2015, **58** (4), 302-308.
10. Ковалев А.С. Вихревая структура магнитных солитонов // ФНТ, 2017, **43** (2), 334-346.
11. Самарский А.А. Теория разностных схем // М.: Наука, 1977, 657 с.
12. Муминов Х.Х. О существовании и устойчивости двумерных топологических солитонов в модели изотропного классического антиферромагнетика Гейзенберга // ДАН РТ, 2002, **45** (10), 21-27.
13. Муминов Х.Х. Многомерные динамические топологические солитоны в нелинейной анизотропной сигма-модели // ДАН РТ, 2002, **45** (10), 28-36.
14. Муминов Х.Х., Шокиров Ф.Ш. Математическое моделирование нелинейных динамических систем квантовой теории поля // Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2017. – 375 с.
15. Муминов Х.Х., Шокиров Ф.Ш. Взаимодействие и распад двумерных топологических солитонов $O(3)$ векторной нелинейной сигма-модели // ДАН РТ, 2011, **54** (2), 110-114.
16. Kudryavtsev A., Piette B.M.A.G., Zakrzewsky W.J. Skyrmions and domain walls in $(2+1)$ dimensions // Nonlinearity, 1998, **11** (4), 783-796.

DYNAMICS OF TOPOLOGICAL THREE-SOLITON INTERACTIONS IN NONLINEAR SIGMA MODEL

Kh.Kh. Muminov, F.Sh. Shokirov

S.U. Umarov Physical-Technical Institute of Academy of Sciences of the Republic of Tajikistan, Dushanbe

khikmat@inbox.ru, shokirov@rambler.ru

Received 13.09.2017

The results of numerical simulation of the interaction of topological vortices (solitons) with domain walls of the Neel and Bloch types in the $(2+1)$ -dimensional anisotropic $O(3)$ nonlinear sigma model are presented. The properties of the phased decay of topological vortices at interacting with Bloch-type domain walls onto localized perturbations possessing half values of topological charges and moving along the plane of the domain walls are investigated. Models of three-soliton interactions of the kink-vortex-antikink type are obtained, where a phased decay of a topological vortex accompanied by annihilation of domain walls is observed.

РЕЗОНАНСНАЯ ПЛАНАРНАЯ ЛОВУШКА ПЕННИНГА С ПРЯМОУГОЛЬНЫМИ ЭЛЕКТРОДАМИ

Е.М. Новикова*

*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
Московский институт электроники и математики*

e.m.novikova@hse.ru

Поступила 29.11.2016

Проанализирован масштаб физических параметров, задающих планарную ловушку Пеннинга с прямоугольным кольцеобразным электродом и выявлено единое соотношение между этими параметрами, которое приводит к дважды резонансному осциллятору в главной части гамильтониана для электрона в ловушке. В режиме базового гиперболического резонанса получена явная формула для усредненной ангармонической части гамильтониана через образующие нелиевской алгебры симметрий, которая порождается гармонической частью гамильтониана.

УДК 517.955.8

Введение

Ловушки Пеннинга – это приборы, удерживающие заряженные частицы [1-6]. Главными компонентами таких ловушек являются магнитное поле (вращающее заряды в перпендикулярной плоскости) и электрическое поле (обеспечивающее устойчивость вдоль магнитной оси). Существуют ловушки гиперболического типа, для которых гамильтонианы, записанные в нормальной форме, представляют собой линейную комби-

* Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 15-01-08751).

нацию одномерных осцилляторов (операторов «действие») с коэффициентами разных знаков. Вблизи точки покоя потенциал таких ловушек имеет гиперболический (седловый), а не эллиптический тип.

В резонансном режиме гамильтониан такой ловушки порождает некоммутативную, нелинейную (нелиевскую) алгебру гиперболического типа с бесконечномерными неприводимыми представлениями. Симплектические листы соответствующей пуассоновой алгебры некомпактны. Динамика на этих листах задается ангармонической частью потенциала ловушки.

Существование этой ангармонической части неизбежно по технологическим причинам. Обычно, наличие ангармонизма рассматривается как помеха и нежелательная характеристика прибора. Но, в то же время, эта часть может быть использована для создания и управления состояниями и квазичастицами в неприводимых представлениях алгебры интегралов движения захваченного заряда [7]. Это квантовое явление сопровождается очень интересной классической динамикой, симплектической геометрией и топологией.

Подчеркнем, что принципиальную роль здесь играет резонанс между нормальными частотами гармонической части («идеальной» ловушки Пеннинга). В отсутствие резонанса ангармоническая часть не дает такого эффекта.

В качестве модельного базового примера в работе рассматривается гиперболическая ловушка Пеннинга с резонансом 3:(-1) между модифицированной циклотронной и магнетронной частотами [8]. Ловушка имеет геометрическую асимметрию, а именно, рассматриваются электроды прямоугольной формы. Отклонение этой формы от квадрата порождает инстантоны и создает двухуровневую квантовую подсистему при подходящем выборе электрических напряжений, приложенных к электродам ловушки [9].

Большинство исследователей избегают изучения моделей ловушек Пеннинга с частотным резонансом, т.к. при наличии резонанса многие стандартные математические методы «не работают». Но именно наличие резонанса порождает квантовые эффекты, которые могут быть использованы в приложениях, например, для создания кубитов для квантовых компьютеров. Разработка алгебраических, геометрических и операторных методов для резонансных моделей открывает перспективы создания новых современных приборов.

1. Электромагнитное поле ловушки. Гамильтониан системы

Рассмотрим планарную прямоугольную ловушку Пеннинга [3-6, 10, 11] для захвата и удержания частицы с отрицательным электрическим зарядом (знак заряда выбран для определенности). Для удержания частицы в ловушке используется однородное магнитное поле B . Выберем декартовы координаты (q_1, q_2, q_3) так, чтобы ось q_3 была направлена вдоль магнитного поля. Тогда вектор напряженности $B = (\nabla_q \times \mathcal{A}_q)$ и соответствующий векторный потенциал $\mathcal{A}_q$ задаются формулами:

$$B = (0, 0, |B|), \quad \mathcal{A}_q = \frac{|B|}{2}(-q_2, q_1, 0). \quad (1.1)$$

Такое магнитное поле ограничивает движения частицы вдоль плоскости (q_1, q_2) .

Для ограничения движений частицы вдоль оси q_3 в рассматриваемой ловушке используется неоднородное электрическое поле, которое создается системой из трех электродов, расположенных в одной плоскости. Внутренний электрод имеет прямоугольную форму со сторонами $2a_1 \times 2a_2$. Он концентрически окружен кольцевым электродом, внешняя граница которого является прямоугольником со сторонами $2ka_1 \times 2ka_2$. Остальную (бесконечную) часть плоскости вокруг кольцевого электрода

занимает внешний электрод. Будем предполагать, что коэффициент подобия κ и длины сторон внутреннего электрода удовлетворяют неравенству

$$\kappa > \frac{a_1}{a_2} \geq 1. \quad (1.2)$$

К внутреннему, кольцевому и внешнему электродам приложены постоянные потенциалы V_1 , V_2 , 0 (соответственно). При этом выполнены следующие условия:

$$\frac{1}{\kappa} \leq \frac{V_2 - V_1}{V_2} \leq \kappa^2, \quad V_2 < 0. \quad (1.3)$$

Описанная система электродов создает электрическое поле с потенциалом V , удовлетворяющим следующей задаче Дирихле для уравнения Лапласа:

$$\begin{cases} \Delta_3 V(q) = 0, & q_3 > 0, \\ V|_{q_3=0} = \begin{cases} V_1, & \text{если } |q_1| < a_1 \text{ и } |q_2| < a_2, \\ V_2, & \text{если } a_1 < |q_1| < \kappa a_1 \text{ и } a_2 < |q_2| < \kappa a_2, \\ 0, & \text{если } \kappa a_1 < |q_1| \text{ или } \kappa a_2 < |q_2|, \end{cases} \\ V|_{|q| \rightarrow \infty} \rightarrow 0. \end{cases}$$

Решение V этой задачи можно записать в виде

$$V(q) = (V_1 - V_2)\Phi(q; a_1, a_2) + V_2\Phi(q; \kappa a_1, \kappa a_2) \quad (1.4)$$

через решение Φ уравнения Лапласа с более простым условием Дирихле:

$$\begin{cases} \Delta_3 \Phi(q; b_1, b_2) = 0, & q_3 > 0, \\ \Phi(q; b_1, b_2)|_{q_3=0} = \begin{cases} 1, & \text{если } |q_1| < b_1 \text{ и } |q_2| < b_2, \\ 0, & \text{если } b_1 < |q_1| \text{ или } b_2 < |q_2|, \end{cases} \\ \Phi(q; b_1, b_2)|_{|q| \rightarrow \infty} \rightarrow 0. \end{cases}$$

Явный вид функции Φ – следующий:

$$\begin{aligned} \Phi(q; b_1, b_2) = & \frac{1}{2\pi} \left[\operatorname{arctg} \frac{(b_1 + q_1)(b_2 + q_2)}{q_3 \sqrt{(b_1 + q_1)^2 + (b_2 + q_2)^2 + q_3^2}} + \operatorname{arctg} \frac{(b_1 + q_1)(b_2 - q_2)}{q_3 \sqrt{(b_1 + q_1)^2 + (b_2 - q_2)^2 + q_3^2}} \right. \\ & \left. + \operatorname{arctg} \frac{(b_1 - q_1)(b_2 + q_2)}{q_3 \sqrt{(b_1 - q_1)^2 + (b_2 + q_2)^2 + q_3^2}} + \operatorname{arctg} \frac{(b_1 - q_1)(b_2 - q_2)}{q_3 \sqrt{(b_1 - q_1)^2 + (b_2 - q_2)^2 + q_3^2}} \right]. \end{aligned}$$

Электрическое поле ловушки заставляет заряженную частицу осциллировать вдоль вертикальной оси q_3 . А в горизонтальной плоскости (q_1, q_2) за счет электромагнитного поля частица совершает двойное колебательное движение по эпитрохоиде.

Гамильтониан заряженной частицы массой m с электрическим зарядом $-e$ в электромагнитном поле с потенциалами $\mathcal{A}_n$ (1.1) и $V(q)$ (1.4) имеет вид:

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial q} + \frac{e}{c} \mathcal{A}_q \right)^2 + eV(q).$$

Введем безразмерные переменные (x, y, z) :

$$(q_1, q_2, q_3) = \sqrt{a_1^2 + a_2^2} (x, y, z),$$

соответствующий им оператор $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$ и безразмерный векторный потенциал

$\mathcal{A} = \frac{1}{2}(-y, x, 0)$. Далее, определим магнитную длину $\rho_0^2 = \frac{\hbar c}{e|B|}$, а также специальную

калибровку напряжения $V_0 = \frac{(a_1^2 + a_2^2)e|B|^2}{mc^2}$ и эффективную постоянную Планка

$$\hbar = \frac{\rho_0^2}{a_1^2 + a_2^2}.$$

Тогда в единицах энергии eV_0 гамильтониан системы запишется в виде $\hat{\mathcal{H}} = eV_0 \hat{H}$ через безразмерный оператор

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(-i\hbar\nabla + \mathcal{A})^2 + U(x, y, z) \quad (1.5)$$

с потенциалом

$$\begin{aligned} U(x, y, z) &= \frac{V(\sqrt{a_1^2 + a_2^2}(x, y, z))}{V_0} \\ &= \frac{V_1 - V_2}{V_0} u(x, y, z; \cos \varphi, \sin \varphi) + \frac{V_2}{V_0} u(x, y, z; \kappa \cos \varphi, \kappa \sin \varphi). \end{aligned} \quad (1.6)$$

Здесь гармоническая функция

$$\begin{aligned} u(x, y, z; c, s) &= \frac{1}{2\pi} \left[\operatorname{arctg} \frac{(c+x)(s+y)}{z\sqrt{(c+x)^2 + (s+y)^2 + z^2}} + \operatorname{arctg} \frac{(c+x)(s-y)}{z\sqrt{(c+x)^2 + (s-y)^2 + z^2}} \right. \\ &\quad \left. + \operatorname{arctg} \frac{(c-x)(s+y)}{z\sqrt{(c-x)^2 + (s+y)^2 + z^2}} + \operatorname{arctg} \frac{(c-x)(s-y)}{z\sqrt{(c-x)^2 + (s-y)^2 + z^2}} \right], \end{aligned}$$

зависит от (безразмерных) геометрических параметров электродов

$$\cos \varphi = \frac{a_1}{\sqrt{a_1^2 + a_2^2}}, \quad \sin \varphi = \frac{a_2}{\sqrt{a_1^2 + a_2^2}}. \quad (1.7)$$

2. Электрический потенциал ловушки в окрестности стационарной точки

Поскольку потенциал (1.6) является функцией, четной по x и по y , то его производные по x и по y на оси z равны нулю:

$$\frac{\partial U}{\partial x}(0, 0, z) = \frac{\partial U}{\partial y}(0, 0, z) = 0.$$

Приравнявая нулю его производную по z

$$\frac{\partial U}{\partial z}(0, 0, z) = -\frac{\sin 2\varphi}{\pi V_0} \left[\frac{(V_1 - V_2)(1 + 2z^2)}{\sqrt{1 + z^2}(z^2 + \cos^2 \varphi)(z^2 + \sin^2 \varphi)} + \frac{\kappa^2 V_2(\kappa^2 + 2z^2)}{\sqrt{\kappa^2 + z^2}(z^2 + \kappa^2 \cos^2 \varphi)(z^2 + \kappa^2 \sin^2 \varphi)} \right],$$

получим уравнение стационарной точки на оси z :

$$\frac{\sqrt{1+z^2}(\kappa^2+2z^2)(z^2+\cos^2\varphi)(z^2+\sin^2\varphi)}{\sqrt{\kappa^2+z^2}(1+2z^2)(z^2+\kappa^2\cos^2\varphi)(z^2+\kappa^2\sin^2\varphi)} = \frac{V_2-V_1}{\kappa^2 V_2}. \quad (2.1)$$

Вычислив производную по z левой части этого уравнения, можно убедиться в том, что при условии

$$\kappa^2 > \frac{1}{\operatorname{tg}^2 \varphi} \geq 1,$$

(вытекающем из неравенства (1.2)) левая часть этого уравнения, как функция от z , монотонно возрастает от ее значения $\frac{1}{\kappa^3}$ в точке $z=0$ до ее предельного значения 1 при $z \rightarrow \infty$. Поэтому в верхнем полупространстве $z > 0$ у потенциала U на оси z имеется ровно одна стационарная точка $(0,0,z_0)$. Ее координата z_0 является единственным положительным корнем уравнения (2.1).

Далее, исследуем вопрос об устойчивости стационарной точки потенциала. Для этого заметим, что в гармоническом приближении движение частицы вдоль оси z описывается оператором

$$\frac{1}{2} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right)^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} (0,0,z_0) (z-z_0)^2.$$

Следовательно, условие ограниченности вертикальных движений электрона в ловушке – это условие положительности второй производной

$$\frac{\partial^2 U}{\partial z^2} (0,0,z_0) > 0.$$

Нетрудно убедиться, что при условиях (1.2) эта производная противоположна по знаку потенциалу V_2 :

$$\operatorname{sgn} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial z^2} (0,0,z_0) \right) = -\operatorname{sgn}(V_2).$$

Таким образом, условия (1.3) необходимы и достаточны для существования на полуоси $z > 0$ устойчивой стационарной точки электрического потенциала U .

Потенциал (1.6) разложим в степенной ряд в окрестности стационарной точки $(0,0,z_0)$:

$$\begin{aligned} U(x,y,z) = & \alpha_0 + \frac{1}{2} \left[(\alpha_{21} + \alpha_{22})(z-z_0)^2 - \alpha_{21}x^2 - \alpha_{22}y^2 \right] \\ & + (z-z_0) \left[\frac{1}{3}(\beta_1 + \beta_2)(z-z_0)^2 - \beta_1x^2 - \beta_2y^2 \right] + [(\gamma_{12} + \gamma_{13})x^4 + (\gamma_{12} + \gamma_{23})y^4 \\ & + (\gamma_{13} + \gamma_{23})(z-z_0)^4 - 6\gamma_{12}x^2y^2 - 6\gamma_{13}x^2(z-z_0)^2 - 6\gamma_{23}y^2(z-z_0)^2] + \dots \end{aligned} \quad (2.2)$$

Коэффициенты этого разложения задаются следующими формулами:

$$\alpha_0 = U(0,0,z_0) = \frac{2}{\pi V_0} \left[(V_1 - V_2) \operatorname{arctg} \frac{\sin 2\varphi}{2z_0 \sqrt{1+z_0^2}} + V_2 \operatorname{arctg} \frac{\kappa^2 \sin 2\varphi}{2z_0 \sqrt{\kappa^2 + z_0^2}} \right], \quad (2.3)$$

$$\alpha_{21} = -U_{xx}(0, 0, z_0) =$$

$$= \frac{\sin 2\varphi z_0}{\pi V_0} \left[(V_1 - V_2) \frac{3z_0^2 + 2 + \cos^2 \varphi}{(z_0^2 + \cos^2 \varphi)^2 (1 + z_0^2)^{3/2}} + V_2 \frac{\kappa^2 (3z_0^2 + 2\kappa^2 + \kappa^2 \cos^2 \varphi)}{(z_0^2 + \kappa^2 \cos^2 \varphi)^2 (\kappa^2 + z_0^2)^{3/2}} \right],$$

$$\alpha_{22} = -U_{yy}(0, 0, z_0) =$$

$$= \frac{\sin 2\varphi z_0}{\pi V_0} \left[(V_1 - V_2) \frac{3z_0^2 + 2 + \sin^2 \varphi}{(z_0^2 + \sin^2 \varphi)^2 (1 + z_0^2)^{3/2}} + V_2 \frac{\kappa^2 (3z_0^2 + 2\kappa^2 + \kappa^2 \sin^2 \varphi)}{(z_0^2 + \kappa^2 \sin^2 \varphi)^2 (\kappa^2 + z_0^2)^{3/2}} \right],$$

$$\beta_1 = -\frac{1}{2} U_{xxz}(0, 0, z_0) =$$

$$- \frac{\sin 2\varphi z_0}{2\pi V_0} \left\{ \frac{V_1 - V_2}{(z_0^2 + \cos^2 \varphi)^3 (1 + z_0^2)^{5/2}} [12z_0^6 + 3(5 + 2\cos^2 \varphi) z_0^4 + 2(3 - \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi) z_0^2 - \cos^2 \varphi (2 + \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + \cos^4 \varphi)] \right.$$

$$+ \frac{\kappa^2 V_2}{(z_0^2 + \kappa^2 \cos^2 \varphi)^3 (\kappa^2 + z_0^2)^{5/2}} [12z_0^6 + 3\kappa^2 (5 + 2\cos^2 \varphi) z_0^4 + 2\kappa^4 (3 - \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi) z_0^2 - \kappa^6 \cos^2 \varphi (2 + \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + \cos^4 \varphi)] \left. \right\},$$

$$\beta_2 = -\frac{1}{2} U_{yyz}(0, 0, z_0) =$$

$$- \frac{\sin 2\varphi z_0}{2\pi V_0} \left\{ \frac{V_1 - V_2}{(z_0^2 + \sin^2 \varphi)^3 (1 + z_0^2)^{5/2}} [12z_0^6 + 3(5 + 2\sin^2 \varphi) z_0^4 + 2(3 - \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi) z_0^2 - \sin^2 \varphi (2 + \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + \sin^4 \varphi)] \right.$$

$$+ \frac{\kappa^2 V_2}{(z_0^2 + \kappa^2 \sin^2 \varphi)^3 (\kappa^2 + z_0^2)^{5/2}} [12z_0^6 + 3\kappa^2 (5 + 2\sin^2 \varphi) z_0^4 + 2\kappa^4 (3 - \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi) z_0^2 - \kappa^6 \sin^2 \varphi (2 + \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + \sin^4 \varphi)] \left. \right\},$$

$$\gamma_{12} = -\frac{1}{24} U_{xyy}(0, 0, z_0) = -\frac{5 \sin 2\varphi z_0}{8\pi V_0} \left[\frac{V_1 - V_2}{(1 + z_0^2)^{7/2}} + \frac{\kappa^2 V_2}{(\kappa^2 + z_0^2)^{7/2}} \right],$$

$$\begin{aligned}
\gamma_{13} = & -\frac{1}{24} U_{xxzz}(0, 0, z_0) = \\
& -\frac{\sin 2\varphi z_0}{8\pi V_0} \left\{ \frac{V_1 - V_2}{(z_0^2 + \cos^2 \varphi)^4 (1 + z_0^2)^{7/2}} [20z_0^8 + 5(7 + 2\cos^2 \varphi)z_0^6 \right. \\
& + (15 + 5\cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + 13\sin^4 \varphi)z_0^4 - (25\cos^6 \varphi + 35\cos^4 \varphi \sin^2 \varphi - 8\sin^6 \varphi)z_0^2 \\
& \left. - \cos^2 \varphi (8 + 7\cos^6 \varphi + 11\cos^4 \varphi \sin^2 \varphi + 4\cos^2 \varphi \sin^4 \varphi) \right] \\
& + \frac{\kappa^2 V_2}{(z_0^2 + \kappa^2 \cos^2 \varphi)^4 (\kappa^2 + z_0^2)^{7/2}} [20z_0^8 + 5\kappa^2 (7 + 2\cos^2 \varphi)z_0^6 \\
& + \kappa^4 (15 + 5\cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + 13\sin^4 \varphi)z_0^4 - \kappa^6 (25\cos^6 \varphi + 35\cos^4 \varphi \sin^2 \varphi - 8\sin^6 \varphi)z_0^2 \\
& \left. - \kappa^8 \cos^2 \varphi (8 + 7\cos^6 \varphi + 11\cos^4 \varphi \sin^2 \varphi + 4\cos^2 \varphi \sin^4 \varphi) \right] \Big\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\gamma_{23} = & -\frac{1}{24} U_{yyzz}(0, 0, z_0) = \\
& -\frac{\sin 2\varphi z_0}{8\pi V_0} \left\{ \frac{V_1 - V_2}{(z_0^2 + \sin^2 \varphi)^4 (1 + z_0^2)^{7/2}} [20z_0^8 + 5(7 + 2\sin^2 \varphi)z_0^6 \right. \\
& + (15 + 5\cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + 13\cos^4 \varphi)z_0^4 - (25\sin^6 \varphi + 35\cos^2 \varphi \sin^4 \varphi - 8\cos^6 \varphi)z_0^2 \\
& \left. - \sin^2 \varphi (8 + 7\sin^6 \varphi + 11\cos^2 \varphi \sin^4 \varphi + 4\cos^4 \varphi \sin^2 \varphi) \right] \\
& + \frac{\kappa^2 V_2}{(z_0^2 + \kappa^2 \sin^2 \varphi)^4 (\kappa^2 + z_0^2)^{7/2}} [20z_0^8 + 5\kappa^2 (7 + 2\sin^2 \varphi)z_0^6 \\
& + \kappa^4 (15 + 5\cos^2 \varphi \sin^2 \varphi + 13\cos^4 \varphi)z_0^4 - \kappa^6 (25\sin^6 \varphi + 35\cos^2 \varphi \sin^4 \varphi - 8\cos^6 \varphi)z_0^2 \\
& \left. - \kappa^8 \sin^2 \varphi (8 + 7\sin^6 \varphi + 11\cos^2 \varphi \sin^4 \varphi + 4\cos^4 \varphi \sin^2 \varphi) \right] \Big\}.
\end{aligned}$$

3. Гамильтониан ловушки при больших значениях коэффициента подобия

Отметим, что исходные предположения (1.2), (1.3) будут выполнены, если выбрать достаточно большой коэффициент подобия

$$\kappa \gg 1, \quad (3.1)$$

связывающий линейные размеры внутреннего и кольцевого электродов, и выбрать следующие масштабы величин потенциалов, приложенных к этим электродам:

$$V_1 = V_0(-\kappa + d)v, \quad V_2 = -V_0 \kappa v, \quad (3.2)$$

где

$$v \sim 1, \quad d \sim 1 \text{ (при } \kappa \rightarrow \infty) \text{ и } v > 0, \quad d \geq 1. \quad (3.3)$$

Ниже всюду будем предполагать, что условия (3.1), (3.2), (3.3) выполнены.

При больших значениях κ уравнение для координаты z_0 стационарной точки электрического потенциала и формулы для коэффициентов его разложения в окрестности стационарной точки несколько упрощаются.

А именно, при $\kappa \rightarrow \infty$ решение уравнения (2.1) имеет асимптотику

$$z_0 = \xi_0 + \frac{\xi_1}{\kappa^2} + O\left(\frac{1}{\kappa^4}\right),$$

где ξ_0 – единственное положительное решение уравнения

$$\frac{(1+(1+T)\xi_0^2)(T+(1+T)\xi_0^2)\sqrt{1+\xi_0^2}}{T(1+2\xi_0^2)} = d, \quad (3.4)$$

а ξ_1 задается формулой

$$\xi_1 = \frac{(2+T+T^2)\xi_0(1+\xi_0^2)(1+2\xi_0^2)(1+(1+T)\xi_0^2)(T+(1+T)\xi_0^2)}{2T(2+T+2T^2+(7+12T+7T^2)\xi_0^2+11(1+T)^2\xi_0^4+6(1+T)^2\xi_0^6)}.$$

Здесь используется обозначение

$$T = \operatorname{tg}^2 \varphi. \quad (3.5)$$

Из приведенных формул видно, что ξ_0 и ξ_1 являются функциями от геометрического параметра T и от управляющего параметра d , определенного в (3.2), (3.3).

Асимптотика коэффициентов гармонической части потенциала U при $\kappa \rightarrow \infty$ имеет вид

$$\alpha_{21} = \omega_1^2 + \frac{\alpha_1}{\kappa^2} + O\left(\frac{1}{\kappa^4}\right), \quad \alpha_{22} = \omega_2^2 + \frac{\alpha_2}{\kappa^2} + O\left(\frac{1}{\kappa^4}\right),$$

где

$$\omega_1^2 = \frac{2d\nu\sqrt{T}\xi_0(3+2T+3(1+T)\xi_0^2)}{\pi(1+\xi_0^2)^{3/2}(1+(1+T)\xi_0^2)^2}, \quad \omega_2^2 = \frac{2d\nu\sqrt{T}\xi_0(2+3T+3(1+T)\xi_0^2)}{\pi(1+\xi_0^2)^{3/2}(T+(1+T)\xi_0^2)^2}, \quad (3.6)$$

$$\alpha_1 = -\frac{2d\nu\sqrt{T}}{\pi(1+\xi_0^2)^{5/2}(1+(1+T)\xi_0^2)} \left(\frac{T(3+2T)\xi_0(1+\xi_0^2)^2(1+2\xi_0^2)}{T+(1+T)\xi_0^2} + \frac{\xi_1[-3-2T+2(3+5T+3T^2)\xi_0^2+3(7+12T+5T^2)\xi_0^4+12(1+T)^2\xi_0^6]}{(1+(1+T)\xi_0^2)^2} \right),$$

$$\alpha_2 = -\frac{2d\nu\sqrt{T}}{\pi(1+\xi_0^2)^{5/2}(T+(1+T)\xi_0^2)} \left(\frac{(2+3T)\xi_0(1+\xi_0^2)^2(1+2\xi_0^2)}{T(1+(1+T)\xi_0^2)} + \frac{\xi_1[-T(2+3T)+2(3+5T+3T^2)\xi_0^2+3(5+12T+7T^2)\xi_0^4+12(1+T)^2\xi_0^6]}{(T+(1+T)\xi_0^2)^2} \right).$$

А для коэффициентов ангармонической части потенциала справедливы следующие формулы:

$$\beta_1 = -\frac{d\nu\sqrt{T}[-3-2T+2(3+5T+3T^2)\xi_0^2+3(7+12T+5T^2)\xi_0^4+12(1+T)^2\xi_0^6]}{\pi(1+\xi_0^2)^{5/2}(1+(1+T)\xi_0^2)^3} + O\left(\frac{1}{\kappa^2}\right),$$

$$\beta_2 = -\frac{d\nu\sqrt{T}\left[-T(2+3T)+2(3+5T+3T^2)\xi_0^2+3(5+12T+7T^2)\xi_0^4+12(1+T)^2\xi_0^6\right]}{\pi(1+\xi_0^2)^{5/2}(T+(1+T)\xi_0^2)^3}+O\left(\frac{1}{\kappa^2}\right),$$

$$\gamma_{12} = -\frac{5d\nu\sqrt{T}\xi_0}{4\pi(1+T)(1+\xi_0^2)^{7/2}}+O\left(\frac{1}{\kappa^2}\right),$$

$$\gamma_{13} = -\frac{d\nu\sqrt{T}\xi_0}{4\pi(1+\xi_0^2)^{7/2}(1+(1+T)\xi_0^2)^4}\left[-15-20T-8T^2-(25+35T-8T^3)\xi_0^2\right. \\ \left.+(15+50T+63T^2+28T^3)\xi_0^4+5(1+T)^2(9+7T)\xi_0^6+20(1+T)^3\xi_0^8\right]+O\left(\frac{1}{\kappa^2}\right),$$

$$\gamma_{23} = -\frac{d\nu\sqrt{T}\xi_0}{4\pi(1+\xi_0^2)^{7/2}(T+(1+T)\xi_0^2)^4}\left[-T(8+20T+15T^2)+(8-35T^2-25T^3)\xi_0^2\right. \\ \left.+(28+63T+50T^2+15T^3)\xi_0^4+5(1+T)^2(7+9)\xi_0^6+20(1+T)^3\xi_0^8\right]+O\left(\frac{1}{\kappa^2}\right).$$

Отметим, что при условиях (1.2) выполнены неравенства $T \leq 1$, $\omega_1 \leq \omega_2$.

Далее, рассмотрим подробнее окрестность стационарной точки, вводя в ней вместо координат x, y, z новые переменные

$$\begin{cases} x_1 = \kappa x, \\ x_2 = \kappa y, \\ x_3 = k(z - z_0) \end{cases}$$

и соответствующие импульсы

$$\hat{p}_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j},$$

где

$$\hbar = \kappa^2 \hbar.$$

Теперь гамильтониан (1.5) тоже можно разложить по степеням малого параметра $1/\kappa$ (при $\kappa \rightarrow \infty$). Для этого в формулу (1.5) подставим разложение (2.2) потенциала (1.6) в окрестности стационарной точки. При этом опустим константу α_0 (2.3), не влияющую на уравнения движения. А остальные коэффициенты разложения (2.2) заменим вычисленными выше асимптотиками по большим значениям параметра κ . Тогда мы получим следующий оператор, описывающий прямоугольную ловушку Пеннинга:

$$\hat{H} - \alpha_0 = \frac{1}{\kappa^2} \left(\hat{H}_0 + \frac{1}{\kappa} \hat{H}_1 + \frac{1}{\kappa^2} \hat{H}_2 + O\left(\frac{1}{\kappa^3}\right) \right). \quad (3.7)$$

Здесь старшая – гармоническая – часть гамильтониана задается формулой

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \left(\left(\hat{p}_1 - \frac{x_2}{2} \right)^2 + \left(\hat{p}_2 + \frac{x_1}{2} \right)^2 + \hat{p}_3^2 + (\omega_1^2 + \omega_2^2) x_3^2 - \omega_1^2 x_1^2 - \omega_2^2 x_2^2 \right), \quad (3.8)$$

а ангармонические поправки представляют собой полиномы третьей, четвертой, и более высоких степеней по координатам:

$$\hat{H}_1 = x_3 \left(\frac{1}{3} (\beta_1 + \beta_2) x_3^2 - \beta_1 x_1^2 - \beta_2 x_2^2 \right), \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_2 = & \frac{1}{2} \left((\alpha_1 + \alpha_2) x_3^2 - \alpha_1 x_1^2 - \alpha_2 x_2^2 \right) + (\gamma_{12} + \gamma_{13}) x_1^4 + (\gamma_{12} + \gamma_{23}) x_2^4 \\ & + (\gamma_{13} + \gamma_{23}) x_3^4 - 6\gamma_{12} x_1^2 x_2^2 - 6\gamma_{13} x_1^2 x_3^2 - 6\gamma_{23} x_2^2 x_3^2. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Ограничимся членами до порядка $O(1/\kappa^3)$.

4. Гиперболический осциллятор $\hat{H}_0$. Резонансное соотношение

С помощью канонического преобразования

$$\begin{cases} x_1 = v_+ x_+ + v_- x_-, \\ x_2 = -\frac{\omega_1^2 + \omega_+^2}{\omega_+} v_+ \hat{p}_+ - \frac{\omega_1^2 + \omega_-^2}{\omega_-} v_- \hat{p}_-, \\ x_3 = \frac{x_0}{\sqrt[4]{\omega_1^2 + \omega_2^2}}, \\ \hat{p}_1 = \frac{\omega_+^2 - \omega_1^2}{2\omega_+} v_+ \hat{p}_+ + \frac{\omega_-^2 - \omega_1^2}{2\omega_-} v_- \hat{p}_-, \\ \hat{p}_2 = \left(\omega_1^2 + \omega_+^2 - \frac{1}{2} \right) v_+ x_+ + \left(\omega_1^2 + \omega_-^2 - \frac{1}{2} \right) v_- x_-, \\ \hat{p}_3 = \sqrt[4]{\omega_1^2 + \omega_2^2} \hat{p}_0, \end{cases}$$

где

$$\omega_{\pm} = \pm \sqrt{\frac{1}{2} (1 - \omega_1^2 - \omega_2^2) \pm \sqrt{(1 - \omega_1^2 - \omega_2^2)^2 - 4\omega_1^2 \omega_2^2}}, \quad (4.1)$$

$$v_{\pm} = \sqrt{\frac{\omega_{\pm}}{(\omega_1^2 + \omega_{\pm}^2)^2 - \omega_1^2}},$$

квадратичный гамильтониан (3.8) приводится к нормальной форме, в которой он имеет вид гиперболического осциллятора

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \left(\omega_+ (\hat{p}_+^2 + x_+^2) + \omega_- (\hat{p}_-^2 + x_-^2) + \omega_0 (\hat{p}_0^2 + x_0^2) \right) \quad (4.2)$$

с нормальными частотами

$$\omega_+ > 0, \quad \omega_- < 0, \quad \omega_0 = \sqrt{1 - (\omega_+^2 + \omega_-^2)} = \sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2} > 0. \quad (4.3)$$

Покажем теперь, как за счет выбора значения исходных параметров ловушки можно обеспечить резонансу между нормальными частотами ω_+ , ω_- .

Зафиксируем натуральные числа k_+ , k_- и вычислим положительное число m , при котором нормальные частоты (4.3) находятся в следующей резонансной пропорции:

$$\omega_+ : \omega_- : \omega_0 = k_+ : (-k_-) : m. \quad (4.4)$$

Отметим, что данные числа k_+ , k_- должны подчиняться неравенству $k_+ \geq k_-$, поскольку из формул (4.1) вытекает аналогичное неравенство для нормальных частот: $\omega_+ \geq -\omega_-$.

Из требуемой резонансной пропорции (4.4) и из формулы (4.3) для ω_0 получим следующие выражения нормальных частот через параметры резонанса k_+ , k_- :

$$\omega_+ = \frac{k_+}{\sqrt{k_+^2 + k_-^2 + m^2}}, \quad \omega_- = -\frac{k_-}{\sqrt{k_+^2 + k_-^2 + m^2}}.$$

Подставляя эти выражения в соотношения (4.1), связывающие коэффициенты ω_1, ω_2 с нормальными частотами, получим равенства

$$\frac{m^2 - \sqrt{m^4 - 4k_+^2 k_-^2}}{m^2 + \sqrt{m^4 - 4k_+^2 k_-^2}} = \frac{\omega_1^2}{\omega_2^2}, \quad \omega_1^2 + \omega_2^2 = \frac{m^2}{k_+^2 + k_-^2 + m^2}. \quad (4.5)$$

Чтобы найти зависимость чисел k_+, k_-, m от исходных параметров ловушки, подставим в (4.5) формулы (3.6). Вспомним, что коэффициенты ω_1^2, ω_2^2 зависят от трех параметров ловушки: T, d и v , причем оба коэффициента ω_1^2, ω_2^2 прямо пропорциональны параметру v . Поэтому правая часть ω_1^2 / ω_2^2 первого равенства (4.5) не зависит от v . И, следовательно, из него можно получить выражение для числа m через T и d :

$$m = \sqrt{\frac{k_+ k_- (1+T) \left(2+T+2T^2 + (7+12T+7T^2) \xi_0^2 + 11(1+T)^2 \xi_0^4 + 6(1+T)^2 \xi_0^6 \right)}{(1+(1+T)\xi_0^2)(T+(1+T)\xi_0^2) \sqrt{(3+2T+3(1+T)\xi_0^2)(2+3T+3(1+T)\xi_0^2)}}}. \quad (4.6)$$

(Напомним, что, в силу (3.4), ξ_0 — это некоторая функция от тех же параметров T и d .)

А левая часть $\omega_1^2 + \omega_2^2$ второго равенства (4.5) пропорциональна v . Поэтому из этого равенства можно получить выражение для v через T и d :

$$v = \frac{\pi k_+ k_-}{2d\sqrt{T} \xi_0} \left(1 + \xi_0^2 \right)^{3/2} \left(1 + (1+T)\xi_0^2 \right)^2 \left(T + (1+T)\xi_0^2 \right)^2 /$$

$$\left[\left(k^2 + l^2 \right) \left(1 + (1+T)\xi_0^2 \right) \left(T + (1+T)\xi_0^2 \right) \sqrt{(3+2T+3(1+T)\xi_0^2)(2+3T+3(1+T)\xi_0^2)} \right.$$

$$\left. + kl(1+T) \left(2+T+2T^2 + (7+12T+7T^2) \xi_0^2 + 11(1+T)^2 \xi_0^4 + 6(1+T)^2 \xi_0^6 \right) \right]. \quad (4.7)$$

Таким образом, мы доказали следующее утверждение.

Теорема 4.1. *Предположим, что управляющие параметры v, d (3.2), (3.3) и геометрический параметр T (3.5) ловушки связаны между собой по формуле (4.7), где k_+, k_- — целые положительные числа, удовлетворяющие неравенству $k_+ \geq k_-$, а ξ_0 — это положительное решение уравнения (3.4).*

Тогда старшая часть $\hat{H}_0$ (4.2) гамильтониана заряженной частицы в ловушке представляет собой резонансный гиперболический осциллятор, нормальные частоты которого находятся в резонансной пропорции (4.4). Здесь m задается формулой (4.6).

В качестве примера подробно остановимся на случае $k_+ = 3, k_- = 1$ [8]. (См. для сравнения работу [12], в которой для планарной ловушки рассмотрена другая резонансная пропорция 2(-1):2.) В случае $k_+ = 3, k_- = 1$ формулы (4.6), (4.7) принимают вид:

$$m = \sqrt{\frac{3(1+T) \left(2+T+2T^2 + (7+12T+7T^2) \xi_0^2 + 11(1+T)^2 \xi_0^4 + 6(1+T)^2 \xi_0^6 \right)}{(1+(1+T)\xi_0^2)(T+(1+T)\xi_0^2) \sqrt{(3+2T+3(1+T)\xi_0^2)(2+3T+3(1+T)\xi_0^2)}}}, \quad (4.8)$$

$$\begin{aligned}
\nu = & \frac{3\pi}{2d\sqrt{T}\xi_0} (1+\xi_0^2)^{3/2} (1+(1+T)\xi_0^2)^2 (T+(1+T)\xi_0^2)^2 / \\
& [10(1+(1+T)\xi_0^2)(T+(1+T)\xi_0^2)\sqrt{(3+2T+3(1+T)\xi_0^2)(2+3T+3(1+T)\xi_0^2)} \\
& + 3(1+T)(2+T+2T^2+(7+12T+7T^2)\xi_0^2+11(1+T)^2\xi_0^4+6(1+T)^2\xi_0^6)].
\end{aligned} \quad (4.9)$$

При таком выборе значения параметра ν оператор (4.2) является гиперболическим резонансным осциллятором с резонансной пропорцией

$$\omega_+ : \omega_- : \omega_0 = 3 : (-1) : m$$

где m задается формулой (4.8), в которой ξ_0 – это решение уравнения (3.4). Нормальные частоты равны

$$\omega_+ = \frac{3}{\sqrt{10+m^2}}, \quad \omega_- = -\frac{1}{\sqrt{10+m^2}}, \quad \omega_0 = \frac{m}{\sqrt{10+m^2}}.$$

В этом случае линейная замена

$$\left\{ \begin{aligned}
x_1 &= \frac{(10+m^2)^{1/4}}{4\sqrt{3}} \left(\sqrt{18+m^2+R} x_+ + \sqrt{3(m^2+2+R)} x_- \right), \\
x_2 &= \frac{(10+m^2)^{1/4}}{4\sqrt{3}} \left(-\sqrt{18+m^2-R} \hat{p}_+ + \sqrt{3(m^2+2-R)} \hat{p}_- \right), \\
x_3 &= \frac{(10+m^2)^{1/4}}{\sqrt{m}} x_0, \\
\hat{p}_1 &= \frac{1}{8\sqrt{3}(10+m^2)^{1/4}} \left(\sqrt{(8+R)(18-m^2+R)} \hat{p}_+ + \sqrt{3(8-R)(m^2-2-R)} \hat{p}_- \right), \\
\hat{p}_2 &= -\frac{1}{8\sqrt{3}(10+m^2)^{3/4}} \left((R-8)\sqrt{18+m^2+R} x_+ + (R+8)\sqrt{3(m^2+2+R)} x_- \right), \\
\hat{p}_3 &= \frac{\sqrt{m}}{(10+m^2)^{1/4}} \hat{p}_0.
\end{aligned} \right.$$

где введено обозначение

$$R = \sqrt{m^4 - 36},$$

приводит $\hat{H}_0$ к следующей нормальной форме:

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2\sqrt{10+m^2}} \left(3(\hat{p}_+^2 + x_+^2) - (\hat{p}_-^2 + x_-^2) + m(\hat{p}_0^2 + x_0^2) \right). \quad (4.10)$$

При исследовании полного гамильтониана ловушки такую же замену необходимо применить и к ангармоническим поправкам – операторам (3.9), (3.10).

5. Квантовое усреднение. Усредненный гамильтониан как элемент алгебры симметрий гиперболического резонансного осциллятора

Сначала объясним схему квантового усреднения (см. [8, 9, 13]) возмущенного гамильтониана $\hat{H}_0 + \varepsilon \hat{H}_1 + \varepsilon^2 \hat{H}_2$, а затем применим усреднение к гамильтониану (3.8).

Введем операторы комплексной структуры

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

и определим операторы «действие» – гамильтонианы одномерных осцилляторов:

$$\hat{S}_j = \hat{z}_j^* \hat{z}_j, \quad j \in \{+, -, 0\}.$$

Каждому оператору $\hat{V}$ поставим в соответствие семейство операторов [14]

$$\hat{V}(t, \tau) = \exp\left\{-\frac{it}{\hbar} ad_{3\hat{S}_+ - \hat{S}_-}\right\} \exp\left\{-\frac{i\tau}{\hbar} ad_{\hat{S}_0}\right\}, \quad (5.1)$$

параметризованное двумя циклическими переменными $0 \leq t < 2\pi$, $0 \leq \tau < 2\pi$, а также определим следующие две операции над $\hat{V}$:

$$\underline{\hat{V}} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} dt \int_0^{2\pi} d\tau \hat{V}(t, \tau), \quad \hat{V}^\# = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} dt \int_0^{2\pi} d\tau \phi(t, \tau) \hat{V}(t, \tau). \quad (5.2)$$

Здесь 2π – периодическая по обоим переменным t, τ функция ϕ задается рядом

$$\phi(t, \tau) = -i\sqrt{10 + m^2} \sum_{\substack{(r,s) \in \mathbb{Z}^2, \\ (r,s) \neq (0,0)}} \frac{e^{i(rt+s\tau)}}{r + ms}.$$

Предложение 5.1. *Выполнено гомологическое уравнение:*

$$\begin{cases} \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{V}^\#] = \hat{V} - \underline{\hat{V}}, \\ [\hat{H}_0, \underline{\hat{V}}] = 0. \end{cases}$$

Предложение 5.2. *Пусть операторы $\hat{H}_{10}$, $\hat{H}_{20}$, $\hat{G}$ задаются формулами*

$$\begin{aligned} \hat{H}_{10} &= \underline{\hat{H}_1}, \quad \hat{H}_{20} = \hat{H}_2 + \frac{i}{2\hbar} [\hat{H}_1^\#, \hat{H}_1 + \underline{\hat{H}_1}], \\ \hat{G} &= \hat{H}_1^\# + \varepsilon \left(\hat{H}_2^\# + \frac{i}{2\hbar} [\hat{H}_1^\#, \hat{H}_1 + \underline{\hat{H}_1}]^\# \right). \end{aligned}$$

Тогда следующее усредняющее преобразование приводит возмущенный гамильтониан $\hat{H}_0 + \varepsilon \hat{H}_1 + \varepsilon^2 \hat{H}_2$ к сумме коммутирующих операторов $\hat{H}_0$ и $\hat{H}_{10} + \varepsilon \hat{H}_{20}$:

$$\left(\hat{H}_0 + \varepsilon \hat{H}_1 + \varepsilon^2 \hat{H}_2 \right) \exp\left\{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \hat{G}\right\} = \exp\left\{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \hat{G}\right\} \left(\hat{H}_0 + \varepsilon \hat{H}_{10} + \varepsilon^2 \hat{H}_{20} + O(\varepsilon^3) \right).$$

Оператор $\hat{H}_{10} + \varepsilon \hat{H}_{20}$ назовем *усредненным возмущением*, а оператор $\hat{G}$ – *усредняющим оператором*.

Поскольку семейство операторов (5.1) зависит от параметров t, τ 2π – периодическим образом, то его можно разложить в ряд Фурье по экспонентам $e^{-i(rt+s\tau)}$. Тогда вычисление операций (5.2) сведется к подсчету элементарных интегралов

$$\frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} dt \int_0^{2\pi} d\tau e^{i(rt+s\tau)} = \delta_{r,0} \delta_{s,0}.$$

Этот технический прием [15] удобно применять в тех случаях, когда число ненулевых коэффициентов Фурье для заданного оператора конечно.

Применение этой техники приводит к следующим выражениям для усредненного возмущения и усредняющего оператора.

Предложение 5.3. Пусть

$$\hat{H}_1(t, \tau) = \sum_{(r,s) \in \mathbb{Z}^2} e^{-i(rt+s\tau)} \hat{H}_{1,(r,s)}, \quad \hat{H}_2(t, \tau) = \sum_{(r,s) \in \mathbb{Z}^2} e^{-i(rt+s\tau)} \hat{H}_{2,(r,s)}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \hat{H}_{10} &= \hat{H}_{1,(0,0)}, \quad \hat{H}_{20} = \hat{H}_{2,(0,0)} + \frac{\sqrt{10+m^2}}{\hbar} \sum_{\substack{(r,s) \in \mathbb{Z}_+^2, \\ (r,s) \neq (0,0)}} \frac{1}{r+ms} [\hat{H}_{1,(r,s)}, \hat{H}_{1,(r,s)}^*], \\ \hat{G} &= \hat{H}_1^\# + O(\varepsilon), \quad \hat{H}_1^\# = -i\sqrt{10+m^2} \sum_{\substack{(r,s) \in \mathbb{Z}^2, \\ (r,s) \neq (0,0)}} \frac{1}{r+ms} \hat{H}_{1,(r,s)}. \end{aligned}$$

Предложение 5.3 вытекает из формул

$$[\hat{H}_1^\#, \hat{H}_1] = -2i\sqrt{10+m^2} \sum_{\substack{(r,s) \in \mathbb{Z}_+^2, \\ (r,s) \neq (0,0)}} \frac{1}{r+ms} [\hat{H}_{1,(r,s)}, \hat{H}_{1,(r,s)}^*], \quad [\hat{H}_1^\#, \hat{H}_1] = 0.$$

Описанную процедуру усреднения применим к нашему гамильтониану (3.8). Прежде всего построим семейства операторов $\hat{H}_1(t, \tau)$ и $\hat{H}_2(t, \tau)$. Для этого заметим, что возмущающие гамильтонианы $\hat{H}_1, \hat{H}_2$ являются полиномами по операторам комплексной структуры $\hat{z}_+, \hat{z}_-, \hat{z}_0$ и сопряженным к ним операторам $\hat{z}_+, \hat{z}_-, \hat{z}_0, \hat{z}_+^*, \hat{z}_-^*, \hat{z}_0^*$. И учтем, что построение семейства $(\hat{V}_1 \hat{V}_2 \hat{V}_3 \dots)(t, \tau)$ (5.1) для произведения произвольных операторов $\hat{V}_1, \hat{V}_2, \hat{V}_3, \dots$ сводится к построению соответствующих им семейств (5.1) $\hat{V}_1(t, \tau), \hat{V}_2(t, \tau), \hat{V}_3(t, \tau), \dots$:

$$(\hat{V}_1 \hat{V}_2 \hat{V}_3 \dots)(t, \tau) = \hat{V}_1(t, \tau) \hat{V}_2(t, \tau) \hat{V}_3(t, \tau) \dots \quad (5.3)$$

Поэтому достаточно научиться вычислять $\hat{z}_+(t, \tau), \hat{z}_-(t, \tau), \hat{z}_0(t, \tau)$.

Лемма 5.1. Операторам комплексной структуры соответствуют следующие семейства (5.1):

$$\begin{aligned} \hat{z}_+(t, \tau) &= e^{3it} \hat{z}_+, \quad \hat{z}_-(t, \tau) = e^{-it} \hat{z}_-, \quad \hat{z}_0(t, \tau) = e^{it} \hat{z}_0, \\ \hat{z}_+^*(t, \tau) &= e^{-3it} \hat{z}_+^*, \quad \hat{z}_-^*(t, \tau) = e^{it} \hat{z}_-^*, \quad \hat{z}_0^*(t, \tau) = e^{-it} \hat{z}_0^*. \end{aligned}$$

Лемма 5.1 вытекает из перестановочных соотношений

$$\hat{z}_j \hat{S}_k = (\hat{S}_k + \hbar \delta_{jk}) \hat{z}_j, \quad \hat{z}_j^* \hat{S}_k = (\hat{S}_k - \hbar \delta_{jk}) \hat{z}_j^*.$$

Используя формулу (5.3) и лемму 5.1, легко увидеть, что для $\hat{H}_1(t, \tau)$ ненулевыми являются только следующие коэффициенты Фурье:

$$\hat{H}_{1,(0,\pm 3)}, \hat{H}_{1,(0,\pm 1)}, \hat{H}_{1,(2,\pm 1)}, \hat{H}_{1,(-2,\pm 1)}, \hat{H}_{1,(4,\pm 1)}, \hat{H}_{1,(-4,\pm 1)}, \hat{H}_{1,(6,\pm 1)}, \hat{H}_{1,(-6,\pm 1)}.$$

Аналогично рассматривается семейство операторов $\hat{H}_2(t, \tau)$. Подставляя в Лемму 5.3 явные формулы для коэффициентов Фурье $\hat{H}_{1,(r,s)}, \hat{H}_{2,(r,s)}$, можно получить усредненный гамильтониан и усредняющий оператор для нашей задачи о прямоугольной ловушке Пеннинга.

Отметим, что за счет резонанса старшая часть $\hat{H}_0$ гамильтониана заряженной частицы в ловушке Пеннинга порождает некоммутативную нелинейную алгебру симметрий (т.е. операторов, коммутирующих с $\hat{H}_0$) гиперболического типа с бесконечномерными неприводимыми представлениями. Поскольку усредненный гамильтониан $\hat{H}_{10} + \varepsilon \hat{H}_{20}$ коммутирует с $\hat{H}_0$, то он является функцией от образующих алгебры квантовых симметрий $\hat{H}_0$. Опишем эту алгебру.

Предложение 5.4. Алгебра симметрий оператора $\hat{H}_0$ порождается генераторами:

$$\hat{B} = z_+^* z_-^3, \quad \hat{C} = \hat{B}^*, \quad \hat{S}_+, \quad \hat{S}_-, \quad \hat{S}_0 \quad (5.4)$$

и задается следующими коммутационными соотношениями:

$$[\hat{C}, \hat{B}] = \hbar \left(9\hat{S}_+ \hat{S}_-^2 + \hat{S}_-^3 + \hbar \left(9\hat{S}_+ \hat{S}_- + 6\hat{S}_-^2 \right) + \hbar^2 \left(6\hat{S}_+ + 11\hat{S}_- \right) + 6\hbar^3 \right), \quad (5.5)$$

$$\hat{C}\hat{S}_+ = (\hat{S}_+ + \hbar)\hat{C}, \quad \hat{S}_+ \hat{B} = \hat{B}(\hat{S}_+ + \hbar),$$

$$\hat{C}\hat{S}_- = (\hat{S}_- + 3\hbar)\hat{C}, \quad \hat{S}_- \hat{B} = \hat{B}(\hat{S}_- + 3\hbar),$$

$$\hat{C}\hat{S}_0 = \hat{S}_0 \hat{C}, \quad \hat{S}_0 \hat{B} = \hat{B} \hat{S}_0.$$

В этой алгебре имеется три элемента Казимира:

$$\hat{K} = \hat{B}\hat{C} - \hat{S}_+ \hat{S}_- (\hat{S}_- - \hbar) (\hat{S}_- - 2\hbar),$$

$$\hat{\mathcal{K}}_1 = 3\hat{S}_+ - \hat{S}_-, \quad \hat{\mathcal{K}}_2 = \hat{S}_0.$$

В реализации (5.4) они связаны с $\hat{H}_0$ так:

$$\hat{K} = 0, \quad \hat{\mathcal{K}}_1 + m\hat{\mathcal{K}}_2 = \sqrt{10+m^2} \hat{H}_0 - \frac{(m+2)\hbar}{2}.$$

Нелиевские алгебры, соответствующие эллиптическим резонансам, изучались в работах [13, 16-19], а в работе [20] рассмотрена алгебра гиперболического резонанса.

Далее, приведем явные формулы для усредненного гамильтониана и усредняющего оператора.

Теорема 5.1. Предположим, что управляющие параметры ловушки d, v прямоугольной ловушки Пеннинга связаны с ее геометрическим параметром T резонансным соотношением (4.9), а число m задано формулой (4.8).

Тогда усредненный гамильтониан $\hat{H}_{10} + \varepsilon \hat{H}_{20}$ выражается через образующие (5.4) алгебры симметрий гиперболического резонансного осциллятора $\hat{H}_0$ (4.10) по формулам:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{10} &= 0, \\ \hat{H}_{200} &= \eta(B + B^*) + \eta_{++} S_+^2 + \eta_{--} S_-^2 + \eta_{00} S_0^2 + \eta_{+-} S_+ S_- + \eta_{+0} S_+ S_0 + \eta_{-0} S_- S_0 \\ &+ (\eta_+ + h\eta_{+h}) S_+ + (\eta_- + h\eta_{-h}) S_- + (\eta_0 + h\eta_{0h}) S_0 + h\eta_h + h^2 \eta_{hh}, \end{aligned} \quad (5.7)$$

где

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{(10+m^2)^{3/2}}{256\sqrt{6}(-4+m^2)} \{ (10+m^2) [- (2+m^2+R) \sqrt{m^2+R} \beta_1^2 \\ &+ 4(\sqrt{m^2-R} - \sqrt{m^2+R}) \beta_1 \beta_2 + (2+m^2-R) \sqrt{m^2-R} \beta_2^2] \\ &- 2(-4+m^2) [2 \left((-4-2m^2+R) \sqrt{m^2+R} + (4+2m^2+R) \sqrt{m^2-R} \right) \gamma_{12} \\ &- (2+m^2+R) \sqrt{m^2+R} \gamma_{13} + (2+m^2-R) \sqrt{m^2-R} \gamma_{23}] \}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\eta_{++} &= \frac{10+m^2}{3072m^2(-36+m^2)} \{2m^2(-36+m^2)[4R^2\gamma_{12} + (18+m^2+R)^2\gamma_{13} + (18+m^2-R)^2\gamma_{23}] \\
&\quad - (10+m^2)[(-24+m^2)(18+m^2+R)^2\beta_1^2 + 24(-72+m^2)(10+m^2)\beta_1\beta_2 \\
&\quad + (-24+m^2)(18+m^2-R)^2\beta_2^2]\}, \\
\eta_{--} &= \frac{10+m^2}{1024m^2(-4+m^2)} \{6m^2(-4+m^2)[4R^2\gamma_{12} + (2+m^2+R)^2\gamma_{13} + (2+m^2-R)^2\gamma_{23}] \\
&\quad - (10+m^2)[(-8+3m^2)(2+m^2+R)^2\beta_1^2 + 8(-8+m^2)(10+m^2)\beta_1\beta_2 \\
&\quad + (-8+3m^2)(2+m^2-R)^2\beta_2^2]\},
\end{aligned}$$

$$\eta_{00} = \frac{(10+m^2)}{12m^4} \left[18m^2(\gamma_{13} + \gamma_{23}) - 5(10+m^2)(\beta_1 + \beta_2)^2 \right],$$

$$\begin{aligned}
\eta_{+-} &= \frac{10+m^2}{384m^2(64-20m^2+m^4)} \{3m^2(64-20m^2+m^4)[4R^2\gamma_{12} + 2(10+m^2)(m^2+R)\gamma_{13} \\
&\quad + 2(10+m^2)(m^2-R)\gamma_{23}] - (10+m^2)[(10+m^2)(64-40m^2+3m^4)(m^2+R)\beta_1^2 \\
&\quad + 4(1152-400m^2-118m^4+5m^6)\beta_1\beta_2 + (10+m^2)(64-40m^2+3m^4)(m^2-R)\beta_2^2]\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\eta_{+0} &= -\frac{(10+m^2)}{48m^3(m^2-4)(m^2-16)(m^2-36)} \{6m^2(m^2-4)(m^2-16)(m^2-36) \\
&\quad \times [(18+m^2+R)\gamma_{13} + (18+m^2-R)\gamma_{23}] \\
&\quad - (10+m^2)[(-41472+14112m^2+64m^4+66m^6+5m^8 + (-2304+1792m^2+12m^4+5m^6)R)\beta_1^2 \\
&\quad + 2(-41472+21888m^2-296m^4-146m^6+m^8)\beta_1\beta_2 \\
&\quad + (-41472+14112m^2+64m^4+66m^6+5m^8 + (2304-1792m^2-12m^4-5m^6)R)\beta_2^2]\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\eta_{-0} &= -\frac{(10+m^2)}{16m^3(m^2-4)(m^2-16)} \{6m^2(m^2-4)(m^2-16)[(2+m^2+R)\gamma_{13} + (2+m^2-R)\gamma_{23}] \\
&\quad - (10+m^2)[(128-40m^2-26m^4+5m^6 + (64-32m^2+5m^4)R)\beta_1^2 \\
&\quad - 2(128-96m^2-30m^4+m^6)\beta_1\beta_2 + (128-40m^2-26m^4+5m^6 + (-64+32m^2-5m^4)R)\beta_2^2]\},
\end{aligned}$$

$$\eta_{+} = -\frac{1}{96}\sqrt{10+m^2} \left[(18+m^2+R)\alpha_1 + (18+m^2-R)\alpha_2 \right],$$

$$\begin{aligned}
\eta_{+h} = & \frac{(10+m^2)}{1536m^3(2+m)(-4+m)(m^2-36)} \{2m^2(2+m)(-4+m)(m^2-36) \\
& \times [14mR^2\gamma_{12} + (-864+144m-48m^2+78m^3+7m^5 + (-48+78m+7m^3)R)\gamma_{13} \\
& + (-864+144m-48m^2+78m^3+7m^5 - (-48+78m+7m^3)R)\gamma_{23}] \\
& - (10+m^2)[(-82944+6912m+19584m^2+5184m^3+3872m^4-1808m^5 \\
& +164m^6-178m^7-14m^8+7m^9 \\
& +(-4608+8064m+5024m^2-1952m^3+164m^4-178m^5-14m^6+7m^7)R)\beta_1^2 \\
& +4(-41472+17280m+21024m^2-384m^3+2236m^4-670m^5-34m^6+13m^7)\beta_1\beta_2 \\
& +(-82944+6912m+19584m^2+5184m^3+3872m^4-1808m^5 \\
& +164m^6-178m^7-14m^8+7m^9 \\
& -(-4608+8064m+5024m^2-1952m^3+164m^4-178m^5-14m^6+7m^7)R)\beta_2^2]\}, \\
\eta_- = & -\frac{1}{32}\sqrt{10+m^2}[(2+m^2+R)\alpha_1 + (2+m^2-R)\alpha_2], \\
\eta_{-h} = & \frac{(10+m^2)}{1536m^3(m^2-4)(4+m)} \{3m^2(m^2-4)(4+m)[20mR^2\gamma_{12} \\
& + (2(-96-48m-48m^2+26m^3+5m^5) + (-96+52m+10m^3)R)\gamma_{13} \\
& + (2(-96-48m-48m^2+26m^3+5m^5) + (96-52m-10m^3)R)\gamma_{23}]\} \\
& - (10+m^2)[(1536+1920m-1184m^3-608m^4+40m^5+70m^6+60m^7+15m^8 \\
& + (768-320m-464m^2+40m^3+70m^4+60m^5+15m^6)R)\beta_1^2 \\
& +4(768-1344m-912m^2+56m^3-166m^4+28m^5+13m^6)\beta_1\beta_2 \\
& + (1536+1920m-1184m^3-608m^4+40m^5+70m^6+60m^7+15m^8 \\
& - (768-320m-464m^2+40m^3+70m^4+60m^5+15m^6)R)\beta_2^2]\}, \\
\eta_0 = & \frac{\sqrt{10+m^2}(\alpha_1+\alpha_2)}{2m}, \\
\eta_{0h} = & -\frac{(10+m^2)}{24m^4(m^2-4)(m^2-36)} \{6m^2(m^2-4)(m^2-36) \\
& \times [(-6+m^3+m(6+R))\gamma_{13} + (-6+m^3-m(-6+R))\gamma_{23}] \\
& - (10+m^2)[(-1440+864m+400m^2-240m^3-10m^4-58m^5+5m^7+m(144-76m^2+5m^4)R)\beta_1^2 \\
& +2(-1440+864m+400m^2-456m^3-10m^4-70m^5+m^7)\beta_1\beta_2 \\
& +(-1440+864m+400m^2-240m^3-10m^4-58m^5+5m^7-m(144-76m^2+5m^4)R)\beta_2^2]\}, \\
\eta_h = & -\frac{\sqrt{10+m^2}}{48m} \left[(-12+6m+m^3+mR)\alpha_1 + (-12+6m+m^3-mR)\alpha_2 \right],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\eta_{hh} = & \frac{(10+m^2)}{576m^4(m^2-4)(6+m)} \{3m^2(m^2-4)(6+m) \\
& \times [4m^2R^2\gamma_{12} + (-12+6m+m^3+mR)^2\gamma_{13} + (12-6m-m^3+mR)^2\gamma_{23}] \\
& - (10+m^2)[(-2112+1376m+816m^2-344m^3-312m^4-168m^5+48m^6+18m^7 \\
& +18m^8+3m^9+3m(96-32m-56m^2+16m^3+6m^4+6m^5+m^6)R)\beta_1^2 \\
& +4(-1056+688m-24m^2-460m^3+24m^4-66m^5+12m^6+3m^7)\beta_1\beta_2 \\
& +(-2112+1376m+816m^2-344m^3-312m^4-168m^5+48m^6+18m^7 \\
& +18m^8+3m^9-3m(96-32m-56m^2+16m^3+6m^4+6m^5+m^6)R)\beta_2^2]\}.
\end{aligned}$$

Соответствующий усредняющий оператор имеет вид

$$\begin{aligned}
\hat{H}_1^\# = & -\frac{i(10+m^2)^{5/4}}{96\sqrt{2m(m^2-R)}} \left\{ \frac{16(m^2-R)(\beta_1+\beta_2)}{3m^2} z_0^{*3} \right. \\
& +2\left[-9(2+m^2-R)\beta_1 + (-18+9m^2+m^4-(9+m^2)R)\beta_2\right] \left(\frac{z_+^{*2}z_0^*}{m+6} + \frac{z_+^2z_0^*}{m-6}\right) \\
& +2\sqrt{6}\sqrt{10+m^2}\sqrt{m^2-R}\left[-6\beta_1 + (m^2-R)\beta_2\right] \left(\frac{z_+^*z_-^*z_0^*}{m+4} + \frac{z_+z_-^*z_0^*}{m-4}\right) \\
& -2\sqrt{6}\sqrt{10+m^2}\sqrt{m^2-R}\left[6\beta_1 + (m^2-R)\beta_2\right] \left(\frac{z_+^*z_-^*z_0^*}{m+2} + \frac{z_+z_-z_0^*}{m-2}\right) \\
& +6\left[-(18+m^2-R)\beta_1 + (-18+m^2+m^4-(1+m^2)R)\beta_2\right] \left(\frac{z_-^2z_0^*}{m+2} + \frac{z_-^{*2}z_0^*}{m-2}\right) \\
& + \frac{48(m^2-R)(\beta_1+\beta_2)}{m^2} z_0^{*2}z_0 \\
& - \frac{4(9(2+m^2-R)\beta_1 + (-18+9m^2+m^4-(9+m^2)R)\beta_2)}{m} z_+^*z_+z_0^* \\
& - \frac{12((18+m^2-R)\beta_1 + (-18+m^2+m^4-(1+m^2)R)\beta_2)}{m} z_-^*z_-z_0^* \\
& - \frac{8h}{m^2} \left[3(m(6-2m+m^2) + (2-m)R)\beta_1 + (m(-18-6m+3m^2+m^4) + (6-3m-m^3)R)\beta_2 \right] z_0^* \} \\
& + \{\text{сопряженные операторы}\}.
\end{aligned}$$

Таким образом, с помощью квантового усреднения в режиме базового гиперболического резонанса 3:(-1) получена явная формула для усредненной ангармонической части гамильтониана через образующие нелиевской алгебры симметрий (5.5), которая порождается гармонической частью гамильтониана. Для дальнейшего упрощения, усредненный гамильтониан (5.7) можно записать в неприводимом представлении алгебры (5.5) обыкновенными дифференциальными операторами второго порядка. При этом гамильтониан (5.7) будет представлен в виде обыкновенного дифференциального

оператора второго порядка. Эта техника продемонстрирована (на другом примере), например, в работе [21]. Интересно также исследовать симплектические листы пуассоновой алгебры, соответствующей алгебре (5.5), и картину линий уровня усредненного гамильтониана на них, см., например, аналогичное исследование в статье [22].

Литература

1. F. G. Major, V. Gheorghe, and G. Werth, *Charged Particle Traps* (Springer, 2002).
2. S. Stahl, F. Galve, J. Alonso, S. Djekic, W. Quint, T. Valenzuela, J. Verdu, M. Vogel, and G. Werth, A planar Penning trap // *Eur. Phys. J. D* 2005. Vol. 32. P. 139–146.
3. F. Galve, P. Fernandez, and G. Werth, Operation of a planar Penning trap // *Eur. Phys. J. D*. 2006. Vol. 40. P. 201–204.
4. F. Galve and G. Werth, Motional frequencies in a planar Penning trap // *Hyperfine Interact.* 2007. Vol. 174. P. 397–402.
5. K. Blaum and F. Herfurth (eds.), *Trapped Charged Particles and Fundamental Interactions* (Springer-Verlag, 2008).
6. J. Goldman and G. Gabrielse, Optimized planar Penning traps for quantum information studies // *Hyperfine Interact.* 2011. Vol. 199. P. 279–289.
7. M. V. Karasev, E. M. Novikova, and E. V. Vybornyi, Non-lie top tunneling and quantum bilocalization in planar Penning trap // *Math. Notes*. 2016. Vol. 100. No. 5-6. P. 807–819.
8. M. Karasev, E. Novikova, E. Vybornyi, Bi-states and 2-level systems in rectangular Penning traps // 2017. *Russ. J. Math. Phys.* Vol. 22. No. 4.
9. M. Karasev, E. Novikova, and E. Vybornyi, Instantons via Breaking Geometric Symmetry in Hyperbolic Traps // *Math. Notes*. 2017. Vol. 102. No. 6. P. 776–786.
10. D. Segal and M. Shapiro, Nanoscale Paul Trapping of a Single Electron, *Nanoletters* 6, No. 8, 1622–1626 (2006).
11. P. Bushev, S. Stahl, R. Natali, G. Marx, E. Stachowska, G. Werth, M. Hellwig, and F. Schmidt-Kaler, Electrons in a Cryogenic Planar Penning Trap and Experimental Challenges for Quantum Processing, *Eur. Phys. J., D* 50, 97–102 (2008).
12. 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.
13. M. V. Karasev, Noncommutative algebras, nano-structures, and quantum dynamics generated by resonances, I // in *Quantum Algebras and Poisson Geometry in Mathematical Physics*, Ed. By M. Karasev, in *Amer. Math. Soc. Transl. Ser. 2*. Providence, RI, 2005, Vol. 216. P. 1–18.
14. O. Blagodyreva, M. Karasev, E. Novikova, Cubic Algebra and Averaged Hamiltonian for the Resonance 3:(-1) Penning-Ioffe Trap // *Russ. J. Math. Phys.* 2012. Vol. 19. No. 4. P. 441–450.
15. M. V. Karasev, E. M. Novikova, Algebras with polynomial commutation relations for a quantum particle in electric and magnetic fields // in *Quantum Algebras and Poisson Geometry in Mathematical Physics*, AMS Translations, Ser. 2, 216, ed. M. V. Karasev, AMS, Providence, RI, 2005, 19–135.
16. M. V. Karasev, Noncommutative algebras, nano-structures, and quantum dynamics generated by resonances. II // *Adv. Stud. Contemp. Math.* 2005. Vol. 11. P. 33–56.
17. M. Karasev, Noncommutative algebras, nano-structures, and quantum dynamics generated by resonances. I, III // *Russ. J. Math. Phys.* 2006. Vol. 13. No. 2, 131–150.
18. M. Karasev and E. Novikova, Non-Lie permutation representations, coherent states, and quantum embedding // in *Amer. Math. Soc. Transl. Ser. 2*. Providence, RI. 2005. Vol. 187. P. 1–202.
19. M. Karasev and E. Novikova, Algebra and quantum geometry of multifrequency resonance // *Izv. Ross. Akad. Nauk Ser. Mat.* 2010. Vol. 74. No. 6. P. 1155–1204.
20. M. V. Karasev and E. M. Novikova, Secondary resonances in Penning traps. Non-Lie symmetry algebras and quantum states // *Russ. J. Math. Phys.* 2013. Vol. 20. No. 3. P. 283–294.
21. М.В. Карасев, Е.М. Новикова, Собственные состояния квантовой наноловушки Пеннинга-Йоффе в резонансном режиме // *ТМФ*. 2014. Т. 179. No. 3. С. 406–425.
22. М.В. Карасев, Е.М. Новикова, Устойчивые двумерные торы в ловушке Пеннинга при комбинированном частотном резонансе // *НМФМ*. 2015. Т. 13. No. 2. С. 55–92.

RESONANCE PLANAR PENNING TRAP WITH RECTANGULAR ELECTRODES

E.M. Novikova

*National Research University “Higher School of Economics”
Moscow Institute of Electronics and Mathematics*

e.m.novikova@hse.ru

Received 29.11.2016

The scale of physical parameters determining the Penning planar trap with rectangular annular electrode is analyzed and a unified relation between these parameters is obtained. This relation leads to the resonance oscillator in the leading part of the Hamiltonian for the electron in the trap. In the regime of basic hyperbolic resonance, an explicit formula is obtained for the averaged anharmonic part of the Hamiltonian in terms of generators of the non-Lie algebra of symmetries which is generated by the anharmonic part of the Hamiltonian.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ НА РУБЕЖЕ НАНОРЕВОЛЮЦИИ

М.В. Карасев*

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

mkarasev@hse.edu.ru

В статье речь идет о связях математической науки с другими областями человеческой деятельности, о том, что под влиянием квантовой физики и технических задач в наше время рождается новая область – квантовая математика.

УДК 00, 50, 51

Развитие технологической базы человечества вплотную подошло к новой переломной стадии: к созданию устройств с размерами в нанометровом диапазоне и к освоению наноструктурных материалов. Исследования здесь развиваются фантастическими темпами. Достаточно сказать, что США и Евросоюз тратят сейчас каждый по миллиарду в год на эти области. И достигнутые успехи впечатляют. Понятно, что основную роль в подготовке нового промышленного переворота играет квантовая физика. А что же математика? Какая роль отведена ей историей в грядущей нанореволюции?

* Данная статья впервые была напечатана в журнале «Вестник Российской академии наук», 2006, том 76, №1, стр. 44-47. Здесь мы воспроизводим ее текст с исходного авторского файла.

Математика – это один из наиболее глубоких элементов сознания человечества. Из-за своей сложности она иногда кажется таинственной даже самим математикам. Абстрагирование и формализация создают некую «вещь в себе», которая внешнему наблюдателю порой предстает как что-то не очень нужное для практического применения. Понимаем ли мы в достаточной мере истинные скрытые связи этой науки с другими более зримыми областями деятельности человека, в частности, с прогрессом промышленности?

Ответ на данные вопросы начнем прежде всего с анализа этапов движения математики за последние 400 лет и происходившего параллельно с этим развития физики и техники.

Помещенный в название статьи термин «математические технологии», наверное, может вызвать неприятие и критику со стороны многих математиков. Применительно к своей науке математики, обычно, предпочитают использовать понятия «метод» и «теория». Греческое слово *technē* означает искусство, мастерство, умение. Технология – это учение об искусстве, об умении, или правила мастерства. Иными словами, технология – это ансамбль методов, которые организованы в систему согласно некоторому порядку, идее, и которые решают данный круг задач. Если речь идет о математических задачах, то разрешающая их технология – это система методов, которая не обязательно должна быть привязана к какой-либо математической категории или быть включенной в систему аксиом, не обязана опираться на теоремы существования или содержать исследование всех ответвлений, следствий, обобщений и т.п., но зато она обязана давать решения, эффективно работающие в данном круге задач, в физических приложениях.

Математическая технология – это еще не теория. Она будет включена в теорию позже, и тогда получит все необходимые атрибуты, обобщения, следствия, будет углубляться, соединяться с другими технологиями, подниматься на новые уровни абстракции. Но все это – лет через десять, двадцать, иногда и через триста. А в первое время новая математическая технология существует полулегально, хотя всю эксплуатируется физиками и самими математиками. Математическая технология на этом этапе ценна не тончайшим научным обрамлением, а необычным подходом, взглядом на проблему, нетривиальным сочетанием идей, полезной комбинацией алгоритмов, привлечением методов из неожиданных, казалось, далеких областей, соединением воедино внешне разнородных структур. Именно такие математические технологии прежде всего влияют на прогресс физического мышления, а в конечном итоге, – на технический прогресс, особенно в областях, где затруднены непосредственные наблюдения, измерения, где анализ упрощенных математических моделей предсказывает возможные эффекты, создает интуицию, указывает направление действий.

Акцент на этом ключевом моменте делался еще в эпоху Возрождения, однако, и многие выдающиеся математики эпохи индустриального общества были в этом смысле настоящими технологами: Ньютон, Эйлер, Бернулли, Ампер, Гаусс, Д’аламбер, Лагранж, Гельмгольц, Пуассон, Лаплас, Кирхгоф, Коши, Гамильтон, Чебышев, Ляпунов, Пуанкаре, Крылов и др. Созданные ими технологии позже вошли в математические теории. Но основной импульс в науку их методы внесли именно на ранней «технологической» стадии. И это очень важно для понимания закономерностей развития технических эпох и промышленных революций.

Первая промышленная революция в истории человечества длилась около ста лет (см. таблицу). Она может быть условно разделена на две стадии. Начальная стадия (1765-1815) была связана с внедрением паровой машины, а завершающая стадия (1815-1865), в основном, – с созданием парового транспорта. Этому грандиозному изменению техники предшествовала стадия механизации ручного труда (1715-1765) – ткацкий станок и т.п. Можно выделить еще и постреволюционную стадию (1865-1915), которая ас-

				Первая техническая эпоха			Вторая техническая эпоха			
				I революция				II революция		
	1615 -1665	1665 -1715	1715 -1765	1765 -1815	1815 -1865	1865 -1915	1915 -1965	1965 -2015	2015 -2065	2065 -2115
Техника	Простые Машины	Механизмы и опти- ческие устройства	Простейшие станки	Паровая машина	Паровой транспорт	Двигатель внутреннего сгорания	Радиотехника и авиация	Компьютеры и микроэлектроника	Нанороботы и нанозлектроника	Био-электронно- механические устройства
Физика	Теория движения в поле сил притяжения	Теория колебаний	Теория превращения видов энергии	Газо- и Гидродинамика	Теория упругости и термодинамика	Теория электромагнитного Поля	Квантовая механика частиц	Квантовая теория твёрдого тела и конденс. состояний	Квантовая теория атомарных систем	Квантовая теория гравитации и темного излучения
Математика	Теория чисел и аналитическая геометрия	Дифференциальное исчисление	Теория матриц и алгебраическая геометрия	Теория уравнений в частных производных	Теория функций и дифференциальная геометрия	Теория групп и алгебр	Теория операторов и связей в расщеплениях	Теория некому- тативных алгебр и квантовая геометрия	Спектральн. теория и квантовая топология	Квантовые теория чисел и дискретных групп

социруется с двигателем внутреннего сгорания. Таким образом, первая эпоха техники в совокупности заняла около двухсот лет, условно с 1715 по 1915 гг.

В таблице мы отразили еще и предыдущие сто лет, начиная с 1615 года. В этой таблице, наряду со стадиями развития техники, показаны этапы эволюции физики и математики. В названиях этапов указаны лишь основные, наиболее заметные теории и направления, под знаком которых происходило движение науки на данном этапе. Конечно, все временные границы, указанные в таблице, очень условны.

Согласно этим условным датам, с 1915 г. началась новая техническая эпоха, которая завершится около 2115 года. Она сопряжена с использованием электромагнитных полей и с открытием квантовой механики. В этой новой эпохе также может быть выделена предварительная стадия (1915-1965). Затем идет начальная стадия промышленной революции (1965-2015) – «электромагнитная». И после нее – завершающая стадия революции (2015-2065) – «квантовая». Конечно, граница 2015 между начальной и завершающей стадиями проставлена гипотетически, исходя из того предположения, что лишь к 2015 году реально удастся выйти в область квантовых наномасштабов. Границы постреволюционной стадии (2065-2115) также гипотетические. Разумеется, вся столетняя часть таблицы, относящаяся к будущему, – из области научного предсказания.

Нас интересует в данной таблице сравнение этапов эволюции математики с этапами прогресса физики и техники. Можно заметить, что этап (1715-1765) «Теория матриц и алгебраическая геометрия» в математике никак не коррелирует с последующей революционной стадией в технике (1765-1815) «Паровая машина». Похожая вещь наблюда-

Осознание данной принципиальной взаимозависимости заставляет иначе взглянуть на математические технологии, разрабатываемые в наши дни. Те из них, которые коррелируют с прогрессом нанофизики, описывающей квантовые нанообъекты, окажутся приоритетно важными не только для самой физики, но и для развития технической мысли, причем в самое ближайшее время. Такие математические технологии, конечно, нужно отнести к разряду критических по степени их влияния на промышленную революцию.

Обобщая, можно сказать, что математические технологии опосредовано всегда связаны с исследованием физических объектов, являясь необходимым звеном между разделами чистой математики и математической физики с одной стороны, и алгоритмами вычислительной математики с другой. А кроме того, на определенных этапах, новые математические технологии оказывают непосредственное влияние на физические и технические концепции, подсказывая нетривиальные возможности, скрытые связи, неожиданные комбинации и эффекты. Мы попытались отобразить эти взаимосвязи в условной диаграмме. Разделы, выделенные в ней жирным шрифтом, обычно объединяются одним общим термином «прикладная математика».

Хотя роль новых математических технологий в современной фазе промышленного переворота пока еще скрыта и не столь очевидна как роль квантовых физических технологий, но она, тем не менее, очень велика, причем, не только для утилитарных вычислений, но и для развития моделирования, конструкторских идей, интуиции, предвидения, т.е. в целом для технологических разработок и планирования. Новые математические технологии, новая математика, взаимодействующая с квантовой физикой, станет не просто полезным, но и ключевым элементом, *необходимой предпосылкой* промышленной нано-революции в XXI веке.

Этот вывод особенно актуален для России, где недостаток средств и отставание приборной базы можно было бы постараться компенсировать большими потенциальными возможностями в разработке и применении новейших математических идей и методов.

С позиций развития самой математики очень интересно отметить, что по сравнению с XVIII и XIX веками сейчас мы констатируем гораздо более плотную синхронизацию математики с физикой и техникой. Можно сказать, что теперь почти исчезло время задержки. Непосредственно в данный момент мы наблюдаем как под влиянием квантовой физики и задач техники рождается новая огромная область: *квантовая математика*. Она, подобно ее классической предшественнице, будет призвана математически отобразить и смоделировать тот новый нано-мир, в который вторгается человечество.

Квантовая математика еще очень молода, но уже можно перечислить некоторые ее серьезные достижения:

- разработка эффективных методов решения интегрируемых и неинтегрируемых квантовых систем и нелинейных уравнений,
- открытие квантовой природы волновых систем в условиях резонанса,
- построение геометрических моделей квантовых объектов и процессов, создание начал квантовой геометрии,
- соединение принципов квантовой физики с внутренней динамикой и термодинамикой пространства, с групповыми и топологическими моделями.

Каждое из перечисленных направлений проявляется в виде совокупности новых математических технологий, доставляющих эффективные решения важных классов задач, в частности, в области наномасштабной физики, которые ранее не поддавались исследованию.

Помимо этого, к новым технологиям квантовой математики относятся также недавние известные достижения в области квантовой логики, построения алгоритмов квантовых вычислений и разработки архитектуры квантовых компьютеров.

Что касается будущего развития, то здесь с уверенностью можно утверждать, что осознание и применение новых принципов квантовой математики приведет к значительному прогрессу в математическом моделировании, к выявлению новых эффектов и закономерностей в процессах, связанных с физическими наноструктурами, такими как квантовые доты и нанопроволоки, квантовые сверхрешетки, нанокристаллы, фуллерены, и т.п., в задачах квантовой оптики, оптоэлектроники, туннельного и атомно-силового зондирования, и многих других, важных для нанотехники.

В передовых странах, повсюду в мире, квантовая математика сейчас прогрессирует чрезвычайно бурно. Специалисты ряда российских центров вносят выдающийся вклад в эти разработки. Математические школы России, всегда тяготевшие к гораздо большей гармонии с физикой по сравнению с другими мировыми школами, исторически оказались в выгодном положении. Данное преимущество можно эффективно использовать в целях развития новых революционных технологий. В настоящее время, квантовая математика – это одна из *ключевых инноваций*, причем, нацеленная на отдачу в самом ближайшем будущем.

MATHEMATICAL TECHNOLOGIES AT FRONTIER OF NANOREVOLUTION

M.V. Karasev

National Research University “Higher School of Economics”

mkarasev@hse.edu.ru

The paper contains a discussion about relationship of the mathematical science with other areas of mankind activities, and declares that the new field - quantum mathematics - is arising under the influence of quantum physics and technique problems.

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 издательству 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 институт электроники и математики (МИЭМ),
Европейский центр по качеству

Издатель

Европейский центр по качеству

ПОДПИСКА НА ЖУРНАЛ НМФМ

На второе 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.