

# Влияние тепловых колебаний на эффекты интерференции при переизлучении аттосекундных импульсов электромагнитного поля регулярными многоатомными системами

Д. Н. Макаров, В. И. Матвеев<sup>1)</sup>

Северный (Арктический) федеральный университет им. Ломоносова, 163002 Архангельск, Россия

Поступила в редакцию 10 марта 2015 г.

После переработки 2 апреля 2015 г.

Развита теория переизлучения аттосекундных импульсов электромагнитного поля регулярными многоатомными системами, составленными из одинаковых сложных атомов, с учетом хаотических тепловых колебаний. Показано, что учет тепловых колебаний приводит к заметным изменениям “дифракционных” максимумов, характерных для регулярных мишеней с неподвижными атомами. В качестве примера рассмотрена одномерная решетка. Проведено обобщение на двумерные и трехмерные решетки.

DOI: 10.7868/S0370274X15090040

**1. Введение.** Трудно переоценить значимость рентгеноструктурного анализа, основанного на явлении дифракции рентгеновских лучей на различного рода объектах. При этом кристаллы и наноструктурированные мишени представляют собой естественные дифракционные решетки для рентгеновского излучения. Обычно явление дифракции рентгеновских лучей на различного рода периодических структурах описывается как рассеяние плоских волн бесконечной длительности по времени [1]. Процессы же рассеяния аттосекундных импульсов электромагнитного поля на такого рода структурах до настоящего времени исследованы мало. Вместе с тем подобные процессы могут дополнить рентгеноструктурный анализ возможностями спектроскопии с высоким временным разрешением, связанной в том числе с аттосекундной спектроскопией и аттосекундной метрологией [2–6]. Тем не менее до настоящего времени лишь незначительное количество работ посвящено исследованиям процессов интерференции при рассеянии аттосекундных импульсов различного рода регулярными мишенями. В работах [7–9] развита теория переизлучения аттосекундных импульсов электромагнитного поля произвольными многоатомными системами, составленными из изолированных сложных атомов. Получены угловые распределения спектров переизлучения для произвольного числа атомов в системе. Показано, что при выборе регулярных мишеней процессы интерференции амплитуд излучения фотона приводят к появлению характерных “дифракционных” максимумов. При использова-

нии в качестве мишеней регулярных структур с большим количеством атомов в спектрах перерассеяния доминирующими становятся эффекты интерференции. При этом, подбирая пространственную структуру мишеней и их различные комбинации, можно добиться значительного разделения угловых распределений падающего и рассеянного излучений. В качестве примеров были рассмотрены одномерные, двумерные и трехмерные решетки, а также плоские и цилиндрические конструкции как модели плоских наносистем и нанотрубок. При этом атомы мишени считались жестко связанными и расположенными строго в равновесных положениях. Вместе с тем на явления дифракции аттосекундных импульсов оказывает влияние тепловое хаотическое движение не связанных жестко между собой атомов мишени. Поэтому хотя аттосекундный импульс “застает” атомы мишени в мгновенных положениях, хаотически смещенных от положений равновесия, необходимо учитывать импульсы отдачи при перерассеянии фотонов.

В настоящей работе развита теория переизлучения аттосекундных импульсов электромагнитного поля произвольными регулярными многоатомными системами, составленными из одинаковых сложных атомов, с учетом хаотических тепловых колебаний. Показано, что учет тепловых колебаний приводит к заметным изменениям “дифракционных” максимумов, характерных для регулярных мишеней с неподвижными атомами. При этом поле ультракороткого импульса рассматривается точно в рамках приближения внезапных возмущений, учитываются все возможные возбуждения электронов мишени, а про-

<sup>1)</sup>e-mail: mezon98@mail.ru

цесс излучения фотона описывается по теории возмущений. В качестве примера рассмотрена одномерная решетка. Проведено обобщение на двумерные и трехмерные решетки. Указано на возможность непосредственного применения полученных результатов в случае выбора плоских и цилиндрических конструкций в качестве моделей мишеней, состоящих из плоских наносистем и нанотрубок. Отметим, что до настоящего времени влияние хаотических тепловых колебаний на процессы интерференции при переизлучении аттосекундных импульсов электромагнитного поля регулярными многоатомными системами никем не рассматривалось.

Ниже считается, что длительность аттосекундных импульсов  $\tau$  значительно меньше характерного атомного времени  $\tau_a$ , т.е.  $\tau \ll \tau_a$ . Отметим, что в настоящей работе, как и в [7–9], речь идет об излучении одного фотона всеми атомами мишени за время действия внезапного возмущения. После действия внезапного возмущения возбужденные атомы мишени могут релаксировать с излучением фотонов, принадлежащих известным спектрам изолированных атомов. Однако если внезапное возмущение вызывает изменение скоростей атомных электронов, то и во время действия возмущения атомы способны излучать [10]. Классическим аналогом задачи в такой постановке является известный [11] пример о спектре излучения свободного электрона при внезапном изменении его скорости. После действия внезапного возмущения атомы мишени оказываются распределенными по всевозможным возбужденным состояниям. При этом они могут релаксировать с излучением фотонов (за характерное для радиационных переходов время). Очевидно, что в таком случае интерференционные эффекты будут отсутствовать. Кроме того, спектры переизлучения и спектры, испускаемые при релаксации, строго разделены по времени. Спектр переизлучения испускается лишь за время действия аттосекундного импульса, а спектр релаксации – после действия аттосекундного импульса. Таким образом, спектры переизлучения могут быть идентифицированы по схеме совпадений с аттосекундным импульсом.

**2. Влияние тепловых колебаний на спектр переизлучения.** Пусть  $N$  одинаковых атомов, каждый из которых содержит  $N_e$  электронов, расположены на одной прямой линии так, что их равновесные положения (узлы решетки) находятся на равном расстоянии друг от друга. Если первый узел находится в начале системы координат, то каждый последующий смещен относительно предыдущего на расстояние  $\mathbf{d}$  вдоль прямой линии. Положение произволь-

ного атома с номером  $a = 1, 2, \dots, N$  относительно этой системы координат будем описывать вектором  $\mathbf{R}_a = \mathbf{R}_a^0 + \mathbf{u}_a$ , где  $\mathbf{R}_a^0 = (a-1)\mathbf{d}$  – радиус-вектор равновесного положения,  $\mathbf{u}_a$  – вектор, задающий смещение атома относительно его равновесного положения и направленный по вектору  $\mathbf{d}$ . Обозначим через  $\mathbf{r}_{a,e}$  координаты электрона, принадлежащего атому с номером  $a$ , которые отсчитываются относительно ядра этого атома. Тогда  $\mathbf{R}_{a,e} = \mathbf{R}_a + \mathbf{r}_{a,e}$  – координаты электрона атома  $a$  относительно начала системы координат. Потенциал взаимодействия электронов системы атомов с аттосекундным импульсом электромагнитного поля равен [7]

$$V(t) = \sum_{a=1}^N \sum_{e=1}^{N_e} \mathbf{E}(\mathbf{R}_{a,e}, t) \mathbf{r}_{a,e}. \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  – напряженность электрического поля импульса электромагнитного поля гауссовой формы:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2(t - \mathbf{n}_0 \mathbf{r}/c)^2} \cos(\omega_0 t - \mathbf{k}_0 \mathbf{r}), \quad (2)$$

где  $\mathbf{E}_0$  – амплитуда,  $\mathbf{k}_0 = (\omega_0/c)\mathbf{n}_0$ ,  $\mathbf{n}_0$  – единичный вектор, направленный вдоль распространения импульса,  $\mathbf{r}$  – координаты точки наблюдения,  $c$  – скорость света, длительность импульса  $\tau \sim 1/\alpha$ . Здесь и ниже используются атомные единицы:  $e = m_e = \hbar = 1$ , где  $e$  – заряд электрона,  $m_e$  – масса электрона,  $\hbar$  – постоянная Планка. В атомных единицах скорость света  $c \approx 137$ . Отметим, что  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \mathbf{E}_0 \delta(t - \mathbf{n}_0 \mathbf{r}/c)$  при  $\alpha \rightarrow \infty$ . Потенциал (1) может считаться действующим внезапно при условиях внезапности действия на какой-либо атом цепочки и краткости взаимодействия  $V(t)$  со всей системой из  $N$  атомов (с характерным размером  $L$  вдоль распространения импульса, ср. с [7]) по сравнению с характерным атомным временем  $\tau_a$ :

$$\begin{aligned} \tau \sim 1/\alpha \ll \tau_a \sim 1, \\ L/c \ll \tau_a \sim 1. \end{aligned} \quad (3)$$

Падающий на систему атомов аттосекундный импульс застает цепочку в некоторой мгновенной конфигурации. Соответствующий спектр переизлучения при произвольной конфигурации атомов решетки получен в [8]. Он имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d^2 W}{d\Omega_{\mathbf{k}} d\omega} = \frac{|f_0(\omega)|^2}{(2\pi)^2 c^3 \omega} \left\{ N N_e G(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) + \right. \\ \left. + N N_e (N_e - 1) F(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) + N_e^2 Q(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) g_N(\mathbf{p}) \right\}, \quad (4) \end{aligned}$$

где  $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$  – единичный вектор направления вылета фотона,  $\mathbf{p} = \mathbf{k} - (\omega/\omega_0)\mathbf{k}_0 = (\omega/c)(\mathbf{n} - \mathbf{n}_0)$  имеет

смысл изменения импульса фотона при перерасеянии. Эта формула описывает полный (просуммированный по поляризациям фотона и по всем возможным конечным состояниям электронов атомов системы) спектр излучения фотона частоты  $\omega$  в телесный угол  $d\Omega_{\mathbf{k}}$  (описанный вокруг направления импульса фотона  $\mathbf{k}$ ) в течение времени действия внезапного возмущения  $V(t)$ . Отметим, что число атомов  $N$  в системе произвольно. В частности, при  $N = 1$  формула (4) описывает спектр переизлучения одного атома, при  $N = 2$  – системы из двух атомов и т.д. (ср. [7, 8]). Напомним, что при произвольных  $N$  необходимо следить за выполнением условий внезапности (3).

В формуле (4) первые два слагаемых в правой части представляют собой умноженный на число атомов в системе спектр излучения отдельного атома и соответствуют некогерентному (пропорциональному  $N$ ) процессу переизлучения. Важно, что в (4) лишь множитель  $g_N(\mathbf{p})$  зависит от взаимного пространственного расположения атомов системы, а функции  $G$ ,  $F$  и  $Q$  зависят лишь от характеристик изолированных атомов независимо от их месторасположения. Поэтому конкретные выражения для этих функций являются несущественными для дальнейшего рассмотрения. Однако отметим, что общий вид и выражения для функций  $G$ ,  $F$  и  $Q$ , а также фурье-образа  $f_0(\omega)$  можно найти в статье [8]. Там же приводится и необходимый нам фактор  $g_N(\mathbf{p})$ , ответственный за явление интерференции:

$$g_N(\mathbf{p}) = \sum_{a,b(a \neq b)} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b)} = \sum_{a,b} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b)} - N. \quad (5)$$

Таким образом, для того чтобы рассмотреть зависимость описываемых формулой (4) угловых распределений от геометрии мишени, достаточно исследовать изменения фактора  $g_N(\mathbf{p})$  при учете тепловых колебаний. Нас будет интересовать спектр переизлучения, усредненный по всем возможным расположениям атомов, совершающих малые тепловые колебания. В этом случае движение атомов описывается гамильтонианом

$$H = \frac{1}{2} \sum_{a=1}^N [P_a^2/M + \gamma(u_{a+1} - u_a)^2], \quad (6)$$

где  $\gamma$  – коэффициент, определяющий упругие свойства связей цепочки, а  $M$  – масса атома. Перейдем к вещественным нормальным координатам  $Q_k^\alpha$  и сопряженным с ними импульсам  $P_k^\alpha$ , таким, что смещение атома  $u_a$  имеет вид ([12], с. 28, формула (2.34))

$$u_a = \sqrt{\frac{2}{NM}} \sum_k [Q_k^c \cos(ka) + Q_k^s \sin(ka)]. \quad (7)$$

Таким образом,  $Q_k^\alpha$  при  $\alpha = c$  представляет собой множитель перед косинусом в (7), а при  $\alpha = s$  – множитель перед синусом. Другими словами,  $\alpha$  принимает два значения. В представлении нормальных координат гамильтониан (6) будет иметь вид [12]

$$H = \frac{1}{2} \sum_{k,\alpha} (P_k^{\alpha 2} + \omega_k^2 Q_k^{\alpha 2}),$$

где  $k = 2\pi n/N$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots, N/2$ ,  $\alpha = c, s$ ,  $\omega_k = 2\sqrt{\gamma/M} \sin(k/2)$  – частоты нормальных мод. Решением уравнения Шредингера с гамильтонианом (8) будут произведения волновых функций не взаимодействующих гармонических осцилляторов:

$$\phi_m = \prod_{k,\alpha} \phi_{m_k^\alpha}(Q_k^\alpha), \quad (8)$$

где  $m_k^\alpha$  – степень возбуждения осциллятора частоты  $\omega_k$  с координатой  $Q_k^\alpha$ . Как уже отмечалось, (4) лишь множитель  $g_N(\mathbf{p})$  зависит от взаимного пространственного расположения атомов системы. Таким образом, для получения среднего по тепловым колебаниям спектра переизлучения достаточно усреднить только  $g_N(\mathbf{p})$ :

$$\langle g_N(\mathbf{p}\mathbf{d}) \rangle = \sum_{a,b(a \neq b)} \sum_m e^{-i\mathbf{p}\mathbf{d}(a-b)} \times \langle \phi_m | p_m e^{-i\mathbf{p}(\mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b)} | \phi_m \rangle, \quad (9)$$

где  $p_m$  – вероятность обнаружить систему осцилляторов в состоянии  $\phi_m$ . При этом  $p_m = \prod_{k,\alpha} p_{m_k^\alpha}$ , где из распределения Гиббса  $p_{m_k^\alpha} = [1 - \exp(-\omega_k/T)] \exp(-\omega_k m_k^\alpha/T)$  (постоянную Больцмана считаем равной единице),  $T$  – температура цепочки. Как показано в приложении, среднее (9) можно представить в виде

$$\langle g_N(\mathbf{p}\mathbf{d}) \rangle = 2 \sum_{m=1}^N (N-m) \cos(\mathbf{p}\mathbf{d}m) \times \exp \left[ - \sum_k \frac{2(\mathbf{p}\mathbf{i})^2}{NM\omega_k} (2\langle n^k \rangle_T + 1) \sin^2 \left( \frac{km}{2} \right) \right], \quad (10)$$

где  $\mathbf{i} = \mathbf{d}/d$  – единичный вектор, направленный вдоль цепочки, т.е. по вектору  $\mathbf{d}$ , а  $\langle n^k \rangle_T = (e^{\omega_k/T} - 1)^{-1}$  является средней степенью возбуждения осциллятора частоты  $\omega_k$  (или средним числом фононов частоты  $\omega_k$  при температуре  $T$ ). Рассмотрим сумму в показателе экспоненты выражения (10). Пусть число атомов в цепочке велико. Тогда можно произвести замену  $\frac{2}{N} \sum_k \rightarrow \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dk$ . Таким образом, при  $N \gg 1$  выражение (10) упрощается:

$$\langle g_N(\mathbf{pd}) \rangle = 2 \sum_{m=1}^N (N-m) \cos(\mathbf{pdm}) e^{-\frac{(\mathbf{pi})^2}{M} J(m)}, \quad (11)$$

где величина  $J(m)$  представляется в виде интеграла:

$$J(m) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{1}{\omega_k} \frac{1 + \exp(-\omega_k/T)}{1 - \exp(-\omega_k/T)} \sin^2\left(\frac{km}{2}\right) dk. \quad (12)$$

Выражение (11) является итоговым для расчетов величины  $\langle g_N(\mathbf{pd}) \rangle$ . Очевидно, что ее можно рассчитать только численно.

Рассмотрим теперь некоторые простые частные случаи выражения (11). Начнем со случая бесконечно большой жесткости,  $\gamma \rightarrow \infty$ . Из (12) (с учетом формул (1.342) и (1.352) из справочника [13]) следует, что  $J(m) \rightarrow 0$ . Тогда выражение (11) примет вид

$$\begin{aligned} \langle g_N(\mathbf{pd}) \rangle &= 2 \sum_{m=1}^N (N-m) \cos(\mathbf{pdm}) = \\ &= \sin^2(\mathbf{pd}N/2) \sin^{-2}(\mathbf{pd}/2) - N. \end{aligned} \quad (13)$$

Данное выражение совпадает с полученным ранее в статьях [7, 8] фактором  $g_N(\mathbf{p})$  для регулярной линейной цепочки из жестко закрепленных в узлах решетки атомов. Из (11) видно, что в общем случае функция  $\langle g_N(\mathbf{pd}) \rangle$  совпадает с (13) лишь при  $\mathbf{pd} = 0$ , т.е. когда вектор изменения импульса фотона  $\mathbf{p}$  перпендикулярен  $\mathbf{d}$ . Также интересен случай  $\gamma \rightarrow 0$ , когда атомы не связаны друг с другом, но выстроены в линию. Такой случай может быть реализован для свободных атомов, выстроенных в момент взаимодействия с ультракоротким импульсом электромагнитного поля в линию. Тогда из (12) следует, что при  $\gamma \rightarrow 0$   $J(m) \rightarrow \infty$ . В итоге из (11) получаем  $\langle g_N(\mathbf{pd}) \rangle \rightarrow 0$ , а значит, интерференция отсутствует. Аналогично  $\langle g_N(\mathbf{pd}) \rangle \rightarrow 0$  при  $T \rightarrow \infty$ , что соответствует отсутствию интерференции и в этом предельном случае. Рассмотрим теперь случай  $T = 0$ . Нетрудно убедиться в том, что при  $T = 0$  интеграл (12) принимает конечное не равное нулю значение. Следовательно, (11) не совпадает с результатами, полученными без учета тепловых колебаний. Физически это связано с тем, что атомы решетки даже при абсолютном нуле температуры, совершают нулевые колебания, что приводит к изменению спектра переизлучения фотона по сравнению со спектром регулярной линейной цепочки из неподвижных, находящихся в узлах решетки атомов.

Вернемся к общему выражению (11) для величины  $\langle g_N(\mathbf{pd}) \rangle$ , справедливому для любых температур. Как следует из (11), входящая в показатель экспоненты проекция вектора изменения импульса фотона

на направление цепочки ( $\mathbf{pi}$ ) эффективно уменьшает максимальную величину дифракционных пиков, описываемых формулой (13). Именно поэтому величина  $\mathbf{pi}$  может быть интерпретирована как импульс отдачи модам нормальных колебаний решетки (фононам) при переизлучении фотона. В качестве примера влияния хаотических тепловых колебаний решетки приведем расчет  $\langle g_N(\mathbf{pd}) \rangle$  по формуле (11) для линейной цепочки, состоящей из атомов углерода. Параметр  $\gamma$  для такой цепочки можно приближенно оценить, используя результаты [14]. В этой работе где рассчитана скорость звука в графене и показано, что она зависит от направления распространения звука и от деформации графена. Поэтому мы выбрали несколько значений скорости. Известно, что скорость распространения акустических звуковых волн  $v = d\sqrt{\gamma/M}$ . Используя  $v$  из работы [14], можно найти  $\gamma$ . На рис. 1–3 приведены результаты расчетов  $\langle g_N(\mathbf{pd}) \rangle$  для линейной цепочки из 30 ато-

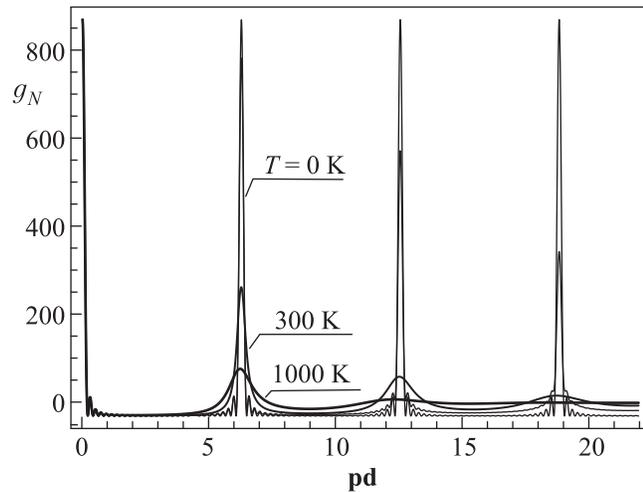


Рис. 1. Зависимости интерференционного фактора  $\langle g_N(\mathbf{pd}) \rangle$  из формулы (11) от безразмерного параметра  $\mathbf{pd}$  при  $v = 5$  км/с при трех значениях температуры. Тонкая сплошная линия – результаты расчета без учета тепловых колебаний по формуле (13). Три более толстые сплошные линии соответствуют росту температуры: чем толще линия, тем больше температура

мов углерода для трех значений  $v$  (5, 10 и 20 км/с) и трех  $T$  (0, 300 и 1000 К), для  $d = 2.13$  ат.ед. Параметр  $\mathbf{pd}$  связан с углом вылета фотона  $\theta$  соотношением  $\mathbf{pd} = (\omega d/c)(\cos \theta - \cos \theta_0)$ , где  $\theta_0$  – угол падения аттосекундного импульса, отсчитанный от направления цепочки (аналогично отсчитывается и угол вылета  $\theta$ ). Поскольку согласно (11) функция  $\langle g_N(\mathbf{pd}) \rangle$  является четной, на рис. 1–3 приведены результаты только для  $\mathbf{pd} \geq 0$ . Видно, что учет колебаний линейной цепочки приводит к большим поправ-

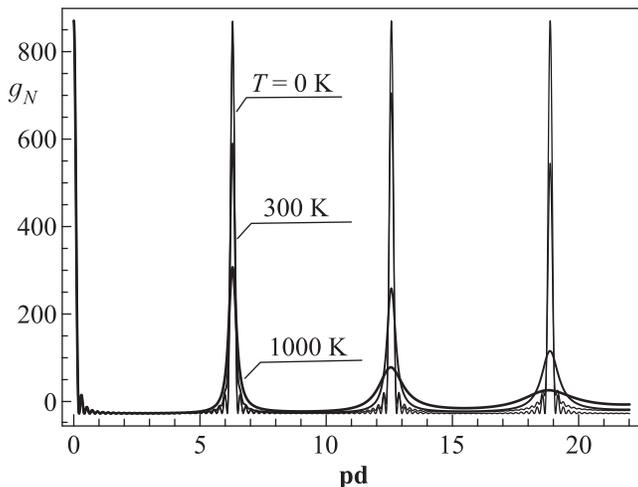


Рис. 2. То же, что на рис. 1, при  $v = 10$  км/с

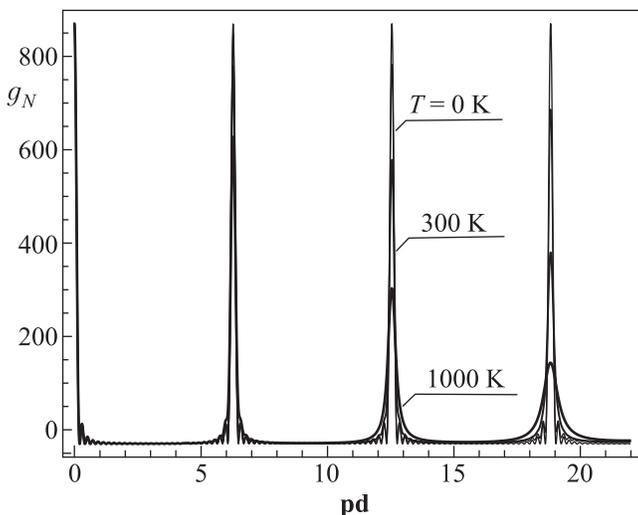


Рис. 3. То же, что на рис. 1, при  $v = 20$  км/с

кам к угловым распределениям переизлучаемых фотонов при взаимодействии аттосекундного импульса с цепочкой. Рис. 1–3 приведены в порядке возрастания скорости распространения акустических звуковых волн, непосредственно связанной с жесткостью упругих связей в цепочке. Таким образом, большим значениям  $v$  соответствуют большие значения жесткости, а следовательно, меньшая чувствительность интерференционной картины к повышению температуры. Именно это видно из сравнения данных рисунков. На всех рисунках приведены главные пики, центры которых соответствуют значениям  $\mathbf{pd}$ -кратным  $2\pi$ . В случае цепочки с бесконечной жесткостью в окрестности каждого главного пика при всех температурах присутствует тонкая структура. Как уже отмечалось, в случае  $\mathbf{pd} = 0$  при всех температурах отсутствует чувствительность максимального

значения соответствующего главного пика к тепловым колебаниям. То же самое справедливо и для малой окрестности, в которой расположена тонкая структура этого пика. Для последующих же главных пиков характерно размытие тонкой структуры по мере роста температуры, обусловленное тепловыми колебаниями. Например, при  $T = 300$  К у второго главного пика (при  $\mathbf{pd} = 2\pi$ ) тонкая структура появляется при  $v = 20$  км/с тогда как у последующих главных пиков ( $\mathbf{pd} = 4\pi, 6\pi, \dots$ ) тонкой структуры при этой температуре нет. Если же мы выберем  $v = 25$  км/с, то (как показали дополнительные расчеты) тонкая структура будет присутствовать у второго и третьего главных пиков ( $\mathbf{pd} = 2\pi, 4\pi$ ), а если  $v = 30$  км/с, то у второго, третьего и четвертого пиков ( $\mathbf{pd} = 2\pi, 4\pi, 6\pi$ ). Таким образом, расчеты по формуле (11) позволяют определить момент появления тонкой структуры. Здесь же мы иллюстрируем лишь характерные особенности.

Рассмотрим влияние тепловых колебаний на спектр переизлучения дву- и трехмерными мишенями. В формуле (4) при переходе от одномерных систем к двумерным и трехмерным меняется лишь функция  $g_N(\mathbf{p})$ , определяемая формулой (5). Следуя выводу формулы (10), нетрудно получить выражение для фактора  $\langle g_N(\mathbf{pd}) \rangle$  и для случая дву- и трехмерных систем, составленных из одинаковых атомов:

$$\begin{aligned} \langle g_N(\mathbf{pd}) \rangle = & \sum_{\mathbf{R}_a^0, \mathbf{R}_b^0 (a \neq b)} e^{-i\mathbf{p}(\mathbf{R}_a^0 - \mathbf{R}_b^0)} \times \\ & \times \exp \left\{ - \sum_s \frac{(\mathbf{p}\mathbf{e}_s)^2}{NM\omega_s} (2\langle n^s \rangle_T + 1) \times \right. \\ & \left. \times \sin^2[\mathbf{k}(\mathbf{R}_a^0 - \mathbf{R}_b^0)/2] \right\}, \end{aligned} \quad (14)$$

где  $\mathbf{R}_a^0$  – радиус-вектор равновесного положения атома с номером  $a$  в мишени,  $s$  – индекс моды нормальных колебаний,  $\mathbf{e}_s$  – единичные векторы поляризации перпендикулярные волновому вектору  $\mathbf{k}$ . В модели одномерной упругой цепочки закон дисперсии фононов сравнительно прост, и нам удалось провести точные расчеты. Как известно, закон дисперсии даже для простейших двумерных и трехмерных систем достаточно сложен. Во многих случаях его можно найти только при численных расчетах конкретной задачи. Поэтому провести расчеты спектров переизлучения можно, лишь выполнив значительно более сложные расчеты, чем в одномерном случае. Отметим, что формула (14) имеет общий характер и может быть применена к произвольным двумерным и трехмерным мишеням. При этом она может

быть стандартным образом упрощена. Действительно, частота  $\omega_s$  находится в знаменателе показателя убывающей экспоненты в (14). Поэтому при суммировании по всем  $s$  в выражении (14) наибольший вклад в сумму вносят те слагаемые, в которых значения  $\omega_s$  закон дисперсии линеен. Следовательно, можно воспользоваться моделью Дебая. Результатом будет широко известная формула [12], описывающая уменьшение высоты дифракционных пиков идеальной решетки с неподвижными атомами посредством фактора Дебая–Валлера. При таком описании конечно же, исчезает продемонстрированное на рис. 1–3 уширение пиков, полученное в результате учета дисперсии фононов вплоть до границы зоны Бриллюэна. Однако в рамках модели Дебая в случае различного рода наноструктурированных мишеней можно непосредственно воспользоваться полученными в работе [9] результатами для ряда плоских и цилиндрических конструкций как моделей плоских наносистем и нанотрубок.

Работа выполнена в рамках КГЗ Министерства образования и науки РФ # 3.1726.2014/К при частичной поддержке РФФИ (грант # 15-02-01894) и стипендии Президента РФ (СП-1800.2015.1).

**Приложение.** Используя формулу (7), можно нетрудно представить среднее (9) в виде

$$\langle g_N(\mathbf{pd}) \rangle = \sum_{a,b(a \neq b)} \sum_m e^{-i\mathbf{pd}(a-b)} \times \langle \phi_m | p_m \prod_{k,\alpha} e^{-iA_k^\alpha Q_k^\alpha} | \phi_m \rangle. \quad (\text{П1})$$

Здесь

$$A_k^c = \sqrt{\frac{2}{NM}} \mathbf{pi} [\cos(ka) - \cos(kb)],$$

$$A_k^s = \sqrt{\frac{2}{NM}} \mathbf{pi} [\sin(ka) - \sin(kb)], \quad (\text{П2})$$

где  $\mathbf{i}$  – единичный вектор направленный вдоль цепочки. Подставляя явный вид волновых функций (8) в формулу (П1) можно проинтегрировать полученное выражение по переменным  $Q_k^\alpha$ . В результате имеем

$$\langle g_N(\mathbf{pd}) \rangle = \sum_{a,b(a \neq b)} \sum_m e^{-i\mathbf{pd}(a-b)} p_m \times \prod_{k,\alpha} L_{m_k^\alpha} \left( \frac{A_k^{\alpha 2}}{2\omega_k} \right) e^{-\frac{A_k^{\alpha 2}}{4\omega_k}}, \quad (\text{П3})$$

где  $L_m(x)$  – полином Легерра. Далее проведем суммирование по  $m$   $\left( \sum_m \equiv \prod_{k,\alpha} \sum_{m_k^\alpha=0}^{\infty} \right)$ . Для этого воспользуемся известной формулой (см. [15], с. 705, формула (5)):

$$\sum_{m=0}^{\infty} q^m L_m(x) = \frac{1}{1-q} \exp \frac{xq}{q-1}. \quad (\text{П4})$$

В итоге получим

$$g_N(\mathbf{pd}) = \sum_{a,b(a \neq b)} e^{-i\mathbf{pd}(a-b)} \times \prod_{k,\alpha} \exp \left[ -\frac{A_k^{\alpha 2}}{4\omega_k} (2\langle n^k \rangle_T + 1) \right], \quad (\text{П5})$$

где  $\langle n^k \rangle_T = [\exp(\omega_k/T) - 1]^{-1}$ . Далее необходимо подставить выражения (П2) в (П5), представить суммирование как  $\sum_{a,b(a \neq b)} = \sum_{a,b(a < b)} + \sum_{a,b(a > b)}$  и обозначить  $|a - b| = m$ , в результате получим формулу (10).

1. J. M. Cowley, *Diffraction Physics*, North-Holland, Amsterdam (1975).
2. A. P. Rep, *Prog. Phys.* **67**, 813 (2004).
3. P. V. Corkit and F. Krausz, *Nature Phys.* **3**, 381 (2007).
4. F. Krausz and M. Ivanov, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 163 (2009).
5. А. М. Желтиков, УФН **181**, 33 (2011) [A. M. Zheltikov, *Phys. Usp.* **54**, 29 (2011)].
6. J. Fink, E. Schierle, E. Weschke, and J. Geck, *Rep. Prog. Phys.* **76**, 056502 (2013).
7. В. И. Матвеев, Д. У. Матрасулов, *Письма в ЖЭТФ*, **96**, 700 (2012).
8. Д. Н. Макаров, В. И. Матвеев, *ЖЭТФ* **144**, 905 (2013).
9. Д. Н. Макаров, В. И. Матвеев, *Оптика и спектроскопия* **116**, 179 (2014).
10. В. И. Матвеев, *ЖЭТФ* **124**, 1023 (2003).
11. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*, Наука, М. (1988), 512 с.
12. Ч. Киттель, *Квантовая теория твердых тел*, Наука, М. (1967), 492 с.
13. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Наука, М. (1963).
14. Ю. А. Баймова, С. В. Дмитриев, А. В. Савин, Ю. С. Кившарь, *ФТТ* **54**, 813 (2012).
15. А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды. Специальные функции*, Наука, М. (1983).