

ISSN 2500-0403

ВЕСТНИК
БАЛТИЙСКОГО
ФЕДЕРАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА
им. И. КАНТА

Серия
Физико-математические
и технические науки

№ 3

Калининград
Издательство Балтийского федерального университета
им. Иммануила Канта
2020

Редакционная коллегия

А. В. Юров, д-р физ.-мат. наук, проф., Институт физико-математических наук и информационных технологий, БФУ им. И. Канта (главный редактор);
С. В. Мацневский, канд. физ.-мат. наук, доц., Институт физико-математических наук и информационных технологий, БФУ им. И. Канта (ответственный редактор); *Н. Л. Великанов*, д-р техн. наук, проф., Институт транспорта и технического сервиса, БФУ им. И. Канта; *В. Е. Захаров*, д-р физ.-мат. наук, проф., Институт физико-математических наук и информационных технологий, БФУ им. И. Канта; *А. И. Иванов*, д-р физ.-мат. наук, проф., Институт физико-математических наук и информационных технологий, БФУ им. И. Канта; *С. А. Ишанов*, д-р физ.-мат. наук, проф., Институт физико-математических наук и информационных технологий, БФУ им. И. Канта; *С. Б. Лебле*, д-р физ.-мат. наук, проф., Институт физико-математических наук и информационных технологий, БФУ им. И. Канта; *И. В. Карпов*, д-р физ.-мат. наук, проф., Институт физико-математических наук и информационных технологий, БФУ им. И. Канта; *С. И. Корягин*, д-р техн. наук, проф., Институт транспорта и технического сервиса, БФУ им. И. Канта; *С. П. Кшевцецкий*, д-р физ.-мат. наук, проф., Институт физико-математических наук и информационных технологий, БФУ им. И. Канта; *И. Б. Петров*, д-р физ.-мат. наук, проф., чл.-кор. РАН, факультет управления и прикладной математики, Московский физико-технический институт (государственный университет); *А. А. Шананин*, д-р физ.-мат. наук, проф., чл.-кор. РАН, факультет управления и прикладной математики, Московский физико-технический институт (государственный университет); *Б. Н. Четверушкин*, д-р физ.-мат. наук, проф., академик РАН, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН; *А. А. Шпилевой*, канд. физ.-мат. наук, доц., Институт физико-математических наук и информационных технологий, БФУ им. И. Канта

Издание зарегистрировано в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.
Свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 77-65005 от 04 марта 2016 г.

Адрес редакции:
236016, Россия, Калининград, ул. А. Невского, 14

СОДЕРЖАНИЕ

Теоретическая и экспериментальная физика

<i>Филатова В. М., Носикова В. В.</i> Численное исследование задачи ультразвуковой томографии.....	5
<i>Смирнова Е. С.</i> Об асимптотическом выражении в поле скорости атмосферного газа, возбужденного 1D – акустической волной.....	11
<i>Борчевкина О. П., Курдяева Ю. А., Карпов М. И., Чубаренко Б. В., Домнин Д. А., Коренькова Н. А., Карпов И. В.</i> Эффекты штормовых явлений в Балтийском море на верхнюю атмосферу.....	20
<i>Ботман С. А., Лебле С. Б.</i> Постановка задачи рассеяния зонных электронов в атомной цепочке на примесях в приближении потенциалов нулевого радиуса.....	29
<i>Лебле С. Б., Чичкало А. Ю.</i> Петли гистерезиса для объемного ферромагнетика по модели Гейзенберга.....	35
<i>Верецагина И. С., Верецагин С. Д.</i> К задаче оценки точности диагностики волновых возмущений, проведенной с использованием техники проекционных операторов.....	43
<i>Иванов А. А., Шпилевой А. А., Кулагина А. А.</i> Влияние имплантации на яркость азотно-вакансионных центров.....	51
<i>Юров А. В., Юрова А. А., Юров В. А.</i> Когда ожидать неожиданных сингулярностей: антропный принцип и темная энергия вселенной.....	59
<i>Юрова А. А., Чириков Р. В.</i> К вопросу о расширенной двумерной нерелятивистской суперсимметрии.....	68
<i>Юров А. В., Юров В. А., Моргунов Р. Б.</i> Удивительная история длиннопериодических спиновых осцилляций в синтетических антиферромагнетиках: некоторые точные решения.....	79
<i>Киевцевский С. П.</i> Парадигма конечно-разностного наискорейшего спуска: новый численный метод спектральной задачи Фокиана.....	90
<i>Верецагин М. Д., Кузыряцкий А. В.</i> Метод оценки ширины доменной стенки по сигналу, генерируемому доменной стенкой при прохождении через измерительную катушку.....	104

CONTENTS

Theoretical and experimental physics

	<i>Filatova V.M., Nosikova V.V.</i> Numerical study of the problem of ultrasound tomography.....	5
4	<i>Smirnova E.S.</i> On asymptotic expression for velocity field of atmosphere gas perturbed by 1D acoustic wave.....	11
	<i>Borchevkina O.P., Kurdyayeva Y.A., Karpov M.I., Chubarenko B.V., Domnin D.A., Korenkova N.A., Karpov I.V.</i> Effects of storm events on the upper atmosphere in the Baltic sea.....	20
	<i>Botman S.A., Leble S.B.</i> The statement of the problem of scattering of band electrons in an atomic chain by impurities in the approximation of potentials of zero radius.....	29
	<i>Leble S.B., Chychkalo A. Yu.</i> Hysteresis loops for a bulk ferromagnetic by Heisenberg model.....	35
	<i>Vereshchagina I.S., Vereshchagin S.D.</i> On the problem of evaluating the accuracy of diagnostics of wave disturbances carried out using the technique of projection operators.....	43
	<i>Ivanov A.I., Shpilevoi A.A., Kulagina A.A.</i> The influence of implantation on the brightness of nitrogen-vacancy centers.....	51
	<i>Yurov A.V., Yurova A.A., Yurov V.A.</i> When to expect the unexpected singularities: the anthropic principle and the dark energy universe.....	59
	<i>Yurova A.A., Chirikov R.V.</i> On the question of extended two-dimensional non-relativistic supersymmetry.....	68
	<i>Yurov V.A., Yurov A.V., Morgunov R.B.</i> A surprising tale of long-periodic spin oscillations in the synthetic antiferromagnets: some exact solutions.....	79
	<i>Kshevetskii S.P.</i> Finite-difference-steepest descent paradigm: new numerical method of Fockian spectral problem.....	90
	<i>Vereshchagin M.D., Kuzryatsky A.V.</i> Method for estimating the width of a domain wall from a signal generated by a domain wall when passing through a measuring coil.....	104

УДК 517.95, 519.633.6.6

В. М. Филатова, В. В. Носикова

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАДАЧИ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ТОМОГРАФИИ

5

Работа посвящена задаче определения малых флуктуаций скорости звука в железистой ткани для специальной модели груди (2D). Используемый подход основан на визуализации акустической среды, а именно включений и неизвестной внутренней границы между жировой и железистой тканями, и определении скоростей звука во включениях с использованием кинематики волн. Результаты численного моделирования задачи (2D) представлены в работе.

The work is devoted to the problem of determining small sound speed fluctuations in glandular tissue for specific breast model (2D). Our approach is based on visualization of acoustical medium (inclusions and unknown inner boundary between fat and glandular tissues) and determination of sound speeds in inclusions using kinematic argument. The results of numerical simulation (2D) of the problem are presented in the paper.

Ключевые слова: ультразвуковая томография, миграция, численное моделирование.

Keywords: ultrasound tomography, migration, numerical modeling.

Введение

Медицинская ультразвуковая томография в контексте задачи раннего обнаружения рака груди имеет большие перспективы на фоне имеющихся методов медицинского исследования, таких как маммография, УЗИ, магнитно-резонансная и компьютерная томография. Эти перспективы обусловлены тем, что ультразвуковая медицинская томография имеет ряд преимуществ перед имеющимися методами исследования — например, отсутствие рентгеновского излучения и компрессии. Несмотря на разнообразие методов исследования, раннее выявление новообразований осложняется плотным фоном и сложной структурой тканей молочной железы.

Большую значимость для данного направления исследования представляют работы американских ученых под руководством Н. Дьюрик [4], которые описывают все аспекты — от медицинских подробностей до алгоритмов и технических особенностей разработанного данной группой прототипа. Также ведется разработка томографических установок и методов обработки данных научными группами из Германии Н. Руитер [5] и России (О.Д. Румянцева [6], А.В. Гончарский [7]). Научная группа,

в состав которой входят авторы статьи, занимается математическим моделированием задач ультразвуковой томографии, чему посвящен ряд статей [2; 3; 8].

В настоящем исследовании рассматривается модель акустической среды, имитирующая срез молочной железы (рис. 1). В модели присутствует сложная внутренняя граница, разделяющая жировую и железистую ткани. Известно, что образования, локализованные в железистой ткани, являются самым сложными для диагностики, так как имеют скорость звука, близкую к скорости звука в железистой ткани. В модель были помещены пять включений разного типа и формы, два из которых имеют сложную границу и имитируют злокачественные образования и три имеют овальную форму и имитируют кисты.

6

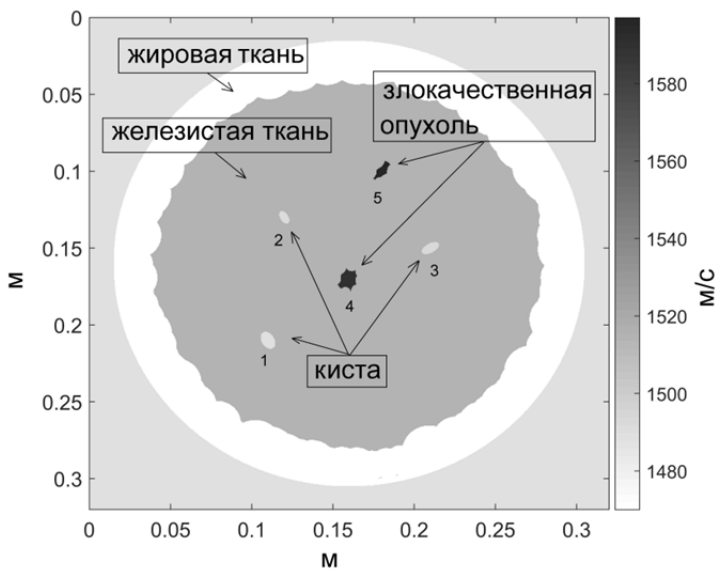


Рис. 1. Модель акустической среды

Метод решения задачи ультразвуковой медицинской томографии состоит в визуализации неизвестной акустической среды и определении скоростей звука во включениях по кинематике волн.

Постановка обратной задачи

Рассмотрим линейные акустические уравнения первого порядка с нулевыми данными Коши в $R^2 \times (0, T)$ (прямая задача):

$$\begin{cases} \frac{1}{c^2} p_t = \operatorname{div} v + \delta(x - x_s) r(t), \\ v_t = \nabla p, \\ p|_{t=0} = 0, v|_{t=0} = 0. \end{cases} \quad (1)$$



Здесь $p(x, t; x_s)$ – давление; $v(x, t; x_s)$ – векторное поле скорости частиц; $\delta(x - x_s)$ – функция Дирака, которая моделирует точечный источник, расположенный в точке $x_s \in \Gamma = \{x : |x - x_0| = R\}$; $r(t)$ – импульс Рикера, $r|_{t \leq 0} = 0$ (рис. 2); $c = c(x)$ – скорость звука. Функция c равна константе вне диска $\Omega = \{x : |x - x_0| \leq R\}$. Волны, инициированные граничным источником, отражаются / рассеиваются от внутренней границы «жировая – железистая ткани» и включений и записываются на Γ .

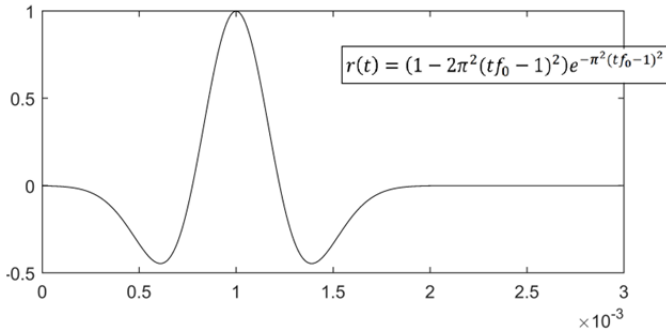


Рис. 2. Импульс Рикера (f_0 – доминирующая частота, $f_0 = 1\text{MHz}$)

Пусть T^* – акустический радиус диска Ω , то есть минимальное время, необходимое для заполнения диска Ω волнами, инициированными всеми граничными источниками (время заполнения). Далее мы будем предполагать, что время регистрации T больше, чем T^* .

Задача медицинской ультразвуковой томографии (обратная задача) – восстановить скорость звука по граничным измерениям давления для различных положений источников (данные обратной задачи):

$$p_0(x, t; x_s) = p(x, t; x_s), \quad x, x_s \in \Gamma, \quad t \in [0, T].$$

Скорости звука в жировой и железистой тканях предполагаются известными из медицинских данных.

Параметры численного эксперимента

Численный эксперимент проводился на прямоугольной сетке, вычислительная область представляет собой квадрат $0,32 \times 0,32 \text{ м}$ с шагом $\Delta x = 10^{-4} \text{ м}$. Трансдюсеры расположены равномерно на окружности радиуса $r = 0,15 \text{ м}$, $N_{tr} = 256$ (трансдюсер – объединенное название для источников и приемников). Временной шаг $\Delta t = 10^{-5} \text{ мс}$. Доминирующая частота импульса Рикера составляет 1 МГц. Численное решение прямой задачи и задачи в обратном времени выполнялось явным условно сходящимся методом конечных разностей со сдвинутой сеткой. Использовался 12-й порядок аппроксимации по пространственным переменным и 2-й порядок по времени.

Комбинированный метод

Комбинированный метод [2; 3] решения задачи медицинской ультразвуковой томографии состоит из двух этапов: 1) визуализация акустической среды; 2) определение скорости звука во включениях. Первый шаг основан на хорошо известном в геофизике методе Energy Reverse Time Migration (Energy RTM) [9]. Основная идея Energy RTM — это трехэтапная процедура: а) решение прямой задачи для известной скоростной модели; б) распространение в обратном времени измеренных данных (данных обратной задачи) через ту же модель; в) суперпозиции обоих полей с использованием условия визуализации. Подробнее процедура визуализации описана в [2]. Для процедуры RTM важную роль играет скоростная модель, задаваемая в начале процедуры, ее еще называют фоновой скоростью звука. Для более качественной визуализации среды авторами статьи было предложено сначала восстановить внутреннюю границу жировой — железистой тканей. Применялась процедура Energy RTM для небольшого времени наблюдения и фоновой скорости звука, соответствующей скорости в жировой ткани (рис. 3). Далее, восстанавливалось изображение включений с помощью той же процедуры Energy RTM, но для всего времени наблюдения T и модели фоновой скорости, построенной на основе полученной формы внутренней границы и значений скорости звука в жировой и железистой тканях (рис. 4).

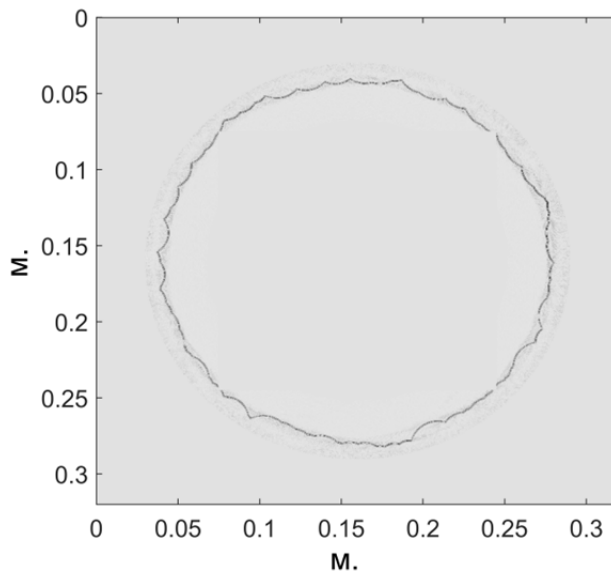


Рис. 3. Восстановленное изображение внутренней границы жировой — железистой тканей

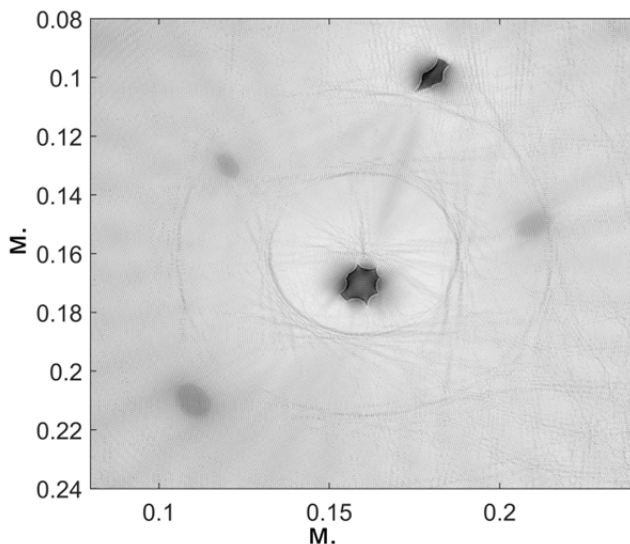


Рис. 4. Восстановленное изображение включений

Значения скорости звука во включениях определялась по кинематическим данным, как в [3]. Для фиксированного включения были построены лучи, соединяющие источники на окружности Γ , проходящие через центр этого включения и не пересекающие другие включения. Реальное время прохождения луча между трансдьюсерами вычисляется из данных обратной задачи. Скорости звука в жировой и железистой тканях, размеры включения и их расположение известны из изображений, полученных после Energy RTM. На заключительном этапе определялся функционал невязки для времени прохождения луча через включение. В результате минимизации полученного функционала невязки относительно значения скорости звука во включении был получен окончательный результат (рис. 5).

Номер включения	1	2	3	4	5
Значение скорости звука	1.488 m/ms	1.490 m/ms	1.493 m/ms	1.591 m/ms	1.597 m/ms
Восстановленное значение	1.519 m/ms (2.1%)	1.506 m/ms (1.14%)	1.542 m/ms (3.3%)	1.604 m/ms (0.87%)	1.574 m/ms (1.46%)

Рис. 5. Восстановленные значения скорости звука во включениях

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда (проект №16-11-10027 «Теоретическое и численное исследование задач волновой и лучевой томографии»).



Список литературы

1. Duric N., Littrup P., Poulo L. et al. Detection of breast cancer with ultrasound tomography: First results with the Computed Ultrasound Risk Evaluation (CURE) prototype // *Medical Physics*. 2007. Vol. 34 (2). P. 773–785.
2. Filatova V.M., Nosikova V.V., Pestov L.N. Application of Reverse Time Migration (RTM) procedure in ultrasound tomography, numerical modeling // *Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications*. 2016. Vol. 4 (4). P. 5–13.
3. Filatova V.M., Nosikova V.V. Determining sound speed in weak inclusions in the ultrasound tomography problem // *Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications*. 2018. Vol. 6 (1). P. 11–20.
4. Duric N., Littrup P., Roy O. et al. Breast imaging with ultrasound tomography: Initial results with SoftVue // *IEEE International Ultrasonics Symposium (IUS)*. 2013. P. 382–385.
5. Jirik R., Peterlik I., Ruitter N. et al. Sound-speed image reconstruction in sparse-aperture 3-D ultrasound transmission tomography // *IEEE transactions on ultrasonics, ferroelectrics, and frequency control*. 2012. Vol. 59 (2). P. 254–264.
6. Burov V.A., Zotov D.I., Rumyantseva O.D. Reconstruction of the sound velocity and absorption spatial distributions in soft biological tissue phantoms from experimental ultrasound tomography data // *Acoustical Physics*. 2015. Vol. 61 (2). P. 231–248.
7. Гончарский А.В. и др. Обратные задачи интерпретации экспериментальных данных 3D ультразвуковых томографических исследований // *Вычислительные методы и программирование*. 2019. Т. 20, №3. С. 254–269.
8. Filatova V.M., Nosikova V.V., Pestov L.N., Rudnitskii A.G. Breast ultrasound tomography problem, simulation with noisy model // *Days on Diffraction (DD)*. 2018. P. 106–111.
9. Rocha D., Tanushev N., Sava P. Acoustic wavefield imaging using the energy norm // *SEG Annual Meeting*. 2015. P. 49–68.

10

Об авторах

Виктория Михайловна Филатова — канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.
E-mail: ViFilatova@kantiana.ru

Вера Вячеславовна Носикова — ассист., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.
E-mail: VNosikova@kantiana.ru

The authors

Dr Viktoriia M. Filatova, Senior Researcher Fellow, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.
E-mail: ViFilatova@kantiana.ru

Vera V. Nosikova, PhD Student, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.
E-mail: VNosikova@kantiana.ru

*E. S. Smirnova***ON ASYMPTOTIC EXPRESSION FOR VELOCITY FIELD
OF ATMOSPHERE GAS PERTURBED BY 1D ACOUSTIC WAVE**

The problem of 1D acoustic wave initiation by a rise of water masses is formulated as a boundary problem at half space $z > 0$. The atmosphere is modeled as a multi-layer gas with an exponential structure of density in each layer. The boundary conditions at $z = 0$ determine the direction of propagation, by link between dynamic variables (pressure, density, and velocity) of the wave. It defines the dynamic projection operators on the subspaces of z -evolution for each layer. The universal formulas for the perturbation of atmospheric variables in an arbitrary layer are derived in frequency and time domains. The explicit expressions for vertical velocity are built by the stationary phase method considering z as large parameter. The resulting formulas can be used to calculate the ionospheric effect by the explicit formula for electron density evolution. This set of explicit relations form a base for a quick algorithm for early diagnostics of tsunami waves.

11

Задача одномерного возбуждения акустической волны при подъеме водных масс сформулирована как краевая задача в полупространстве. Атмосфера моделируется как многослойный газ с экспоненциальной структурой плотности в каждом слое. Граничные условия определяют направление распространения по связи между динамическими переменными (давление, плотность и скорость) волны. Он определяет операторы динамической проекции на подпространства z -эволюции для каждого слоя. Универсальные формулы для возмущения атмосферных переменных в произвольном слое выводятся в частотной и временной областях. Явные выражения для вертикальной скорости строятся методом стационарной фазы с учетом z как большого параметра. Полученные формулы могут быть использованы для расчета ионосферного эффекта по явной формуле эволюции электронной плотности. Этот набор явных соотношений формирует основу для быстрого алгоритма ранней диагностики волн цунами.

Keywords: acoustics, atmosphere, multilayer model, tsunami, boundary regime problem.

Ключевые слова: акустика, атмосфера, многослойная модель, цунами, проблема граничного режима.

Introduction

The detection and prediction of tsunami waves is an urgent task of modern geophysics [1]. Among the various approaches to the problem, a set of investigations aimed at studying the ocean-atmosphere-ionosphere connection is being distinguished. In [2], convincing arguments were presented in favor of the fact that phenomena occurring in the oceans are an important



source of waves in the thermosphere. The tsunami wave disturbs in the atmosphere acoustic and internal gravitational waves [4], that affects the total electron concentration [5–7], that proves to be important both in the diagnostics of atmospheric effects and for the detection of tsunami waves at the initial stage [8]. Moreover, observations show that «the first arrival of a transient signal of tsunami-induced waves occurs at a 100-km altitude just 5 min after the tsunami is generated» [9].

Important results were obtained for the exponential atmosphere within the linear theory [4] and for the non-linear generalization in various orders of magnitude of non-linearity [11]. For instance, the dispersion relations were derived, which provided the basis for the developed concepts and practical recommendations for geophysics.

The authors in [10] simulated the ionospheric responses to infrasonic-acoustic waves, using the compressible atmospheric dynamics model. Such, mainly numerical, investigations present different important aspects of the phenomenon in much detail [12]. The theoretical study of the propagation of long acoustic waves in the atmosphere and tsunami detection problem starts from [4; 8; 13]. Taking into account weak heterogeneity for such waves, methods similar to the semi-classical approximation of quantum mechanics [14] can be adopted.

In our work, we study the formulation and analytical solution of the 1D multi-layer problem of purely acoustic perturbations and their ionospheric effect, that excludes internal gravitational waves [15]. This is especially important for waves such as tsunamis with a large amplitude and space scale [3].

The Fourier method is employed to solve the basic equations and deliver the transformation from the time domain to the frequency domain. The solution of the resulting ordinary differential equations transforms to the time domain by inverse Fourier transform to obtain the final integral form. The corresponding integral contains a rapidly-oscillating function, which paves the way for further asymptotic analysis, which we demonstrate here [16].

Basic equations

The proper decomposition of the perturbation into acoustic and entropy modes in a one-dimensional flow, which is studied in this work, is used as the basis for each layer in our multi-layered model. The equations based on the conservation of momentum, energy, and mass determine the behavior of a fluid, as non-dissipative medium [17]. These nonlinear equations model the dynamics of all possible types of motion that can take place in a gas medium [11].

We start with linearized conservation equations in terms of pressure and density variations, $p'(z)$ and $\rho'(z)$ as deviations from hydro-dynamically-stable stationary functions $\bar{p}(z), \bar{\rho}(z)$ which are no longer constants for gas in the gravity field. Consider the problem of the propagation of acoustic waves in an exponentially-stratified atmosphere layer. The pressure and density of the unperturbed atmosphere are described by the law:



$$\bar{p}(z) = p_0 \cdot \exp\left(-\frac{z}{H}\right) = \rho_0 g H \cdot \exp\left(-\frac{z}{H}\right); \bar{\rho}(z) = \rho_0 \cdot \exp\left(-\frac{z}{H}\right). \quad (1)$$

Here, $\bar{p}(z)$ is the pressure of the unperturbed atmosphere, p_0 is the pressure at the water-air interface, $\bar{\rho}(z)$ is the density of the unperturbed atmosphere, ρ_0 is the air density at the water-air interface, H is the atmospheric scale height, and z is the current height value.

Let \vec{v} be the velocity vector of the gas flow with the vertical component V_z ; $\gamma = C_p / C_v$; C_p, C_v are molar heat capacities at constant pressure and volume correspondingly; \vec{g} is the gravity acceleration field vector, whose components, in the case of vertical gravitational field, are $g_x = 0$, $g_y = 0$, and $g_z = g$.

Further, in the context of entropy mode introduction, we enter a new variable:

$$\varphi' = p' - \gamma \rho' \frac{\bar{p}}{\bar{\rho}}. \quad (2)$$

Next, we go to the conventional set of variables:

$$P = p' \cdot \exp\left(\frac{z}{2H}\right), \Phi = \varphi' \cdot \exp\left(\frac{z}{2H}\right), U_z = V_z \cdot \exp\left(-\frac{z}{2H}\right), \quad (3)$$

where P, Φ, U_z are the new quantities defined in this way and V_z is the vertical velocity of the flow.

Our main intention to simplify the model relates to the plane waves' case. Therefore, we consider the one-dimensional boundary problem for each layer of our model. For such a case, the system of hydro-thermodynamics takes the form:

$$\frac{\partial P}{\partial z} = -\frac{1}{g(\gamma-1)} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} + \frac{\gamma-2}{2\gamma H} P + \frac{\Phi}{\gamma H}, \quad (4)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial z \partial t} = \frac{\gamma-1}{\gamma H} \frac{\partial P}{\partial t} - \frac{\gamma-2}{2\gamma H} \frac{\partial \Phi}{\partial t}, \quad (5)$$

$$U_z = -\frac{1}{\rho_0 g (\gamma-1)} \frac{\partial \Phi}{\partial t}. \quad (6)$$

Solution

The statement of the problem of the propagation of the boundary regime and its solution are described in detail in [16]. The resulting recurrence formulas in the time domain are given below:



$$U_n(z, t) = -\frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \frac{C_n(\omega)}{(i\omega - \lambda)} \cdot \exp[-ik_n(\omega)(z - h_{n-1})] d\omega, \quad (7)$$

$$P_n(z, t) = -\frac{A}{\sqrt{2\pi}} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \frac{2i\rho_0(H\gamma\omega^2 - g\gamma + g)C_n(\omega)}{\omega(i\omega - \lambda)(\sqrt{\gamma^2 - 4H\gamma\omega^2} / g + \gamma - 2)} \cdot \exp[-ik_n(\omega)(z - h_{n-1})] d\omega, \quad (8)$$

$$\Phi_n(z, t) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \frac{g\rho_0(\gamma - 1)C_n(\omega)}{i\omega(i\omega - \lambda)} \cdot \exp[-ik_n(\omega)(z - h_{n-1})] d\omega, \quad (9)$$

14 here:

$$C_n(\omega) = \prod_{m=1}^n \exp[-i(h_{m-1} - h_{m-2})k_{m-1}(\omega)] \cdot \exp\left[\frac{h_{m-1} - h_{m-2}}{2H_{m-1}}\right], \quad (10)$$

$$k_n(\omega) = \sqrt{\frac{\omega^2}{H_n g \gamma} - \frac{1}{4H_n^2}}. \quad (11)$$

Further, the indices will denote the layer number, i.e., H_n is the average atmospheric scale height in the n -layer, h_n is the height of the interface between n - and $n + 1$ -layers and $n = 0, 1, 2, \dots$

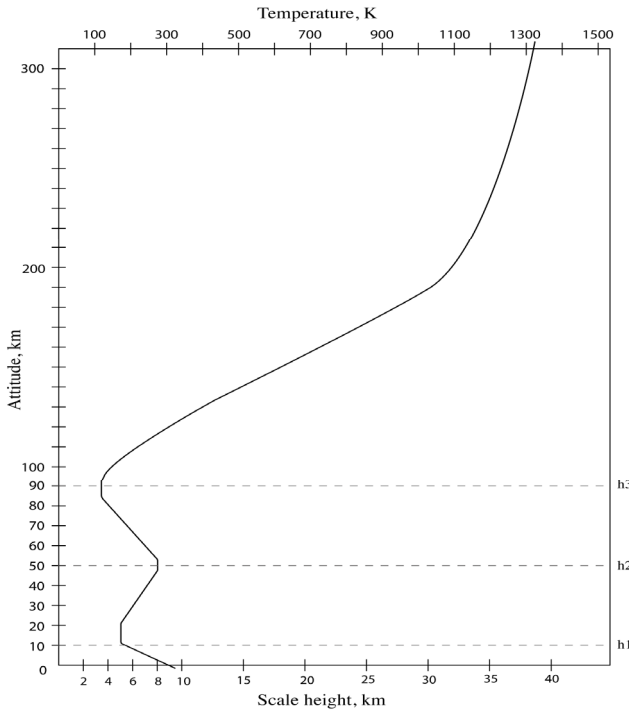


Fig. 1. Multi-layered atmosphere model



We also find critical values for ω when $k_n(\omega) = 0$ for each layer:

$$\omega_{c,n} = \sqrt{\frac{\gamma g}{4H_n}}. \quad (12)$$

Stationary Phase Approximation

The integrand of (7)–(9) contains rapidly-oscillating function $\exp[-ik_n(\omega)(z-h_{n-1})]$ at the range of $(\omega_{c,n}, \infty)$ and $z > h_{n-1}$. It allows applying asymptotic representation for the integral by conventional stationary phase approximation via the stationary point frequency ω_{dom} . Generally, having the integral:

$$f(z, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathfrak{R}} F(\omega) \cdot \exp[-i(k(\omega)z - \omega t)] d\omega \quad (13)$$

the conventional asymptotic expression yields:

$$f(z, t) = \frac{F(\omega_{dom})}{\pi} \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{z \left| \frac{d^2 k}{dz^2} \right|}} \cdot \cos\left(k(\omega_{dom})z - \omega_{dom}t \pm \frac{\pi}{4}\right). \quad (14)$$

Here, the phase term $k(\omega)z - \omega t$ is «stationary» when:

$$\frac{d}{d\omega}(k(\omega)z - \omega t) \approx 0, \quad (15)$$

$$\frac{dk}{d\omega} = \frac{t}{z}. \quad (16)$$

The root of this equation gives the dominant frequency $\omega_{dom}(z, t)$ for certain z and t . In the case of (7), for $n = 1$:

$$f(z, t) = U_1(z, t), \quad (17)$$

$$k_1(\omega) = \sqrt{\frac{\omega^2}{H_1 g \gamma} - \frac{1}{4H_1^2}}, \quad (18)$$

$$F(\omega) = \frac{C_n(\omega)}{(i\omega - \lambda)}. \quad (19)$$

The dominant frequency for (7), found from (4):

$$\omega_{dom,1} = \frac{t\gamma g}{2\sqrt{H\gamma g t^2 - z^2}}. \quad (20)$$



Thus, the velocity in the first layer is represented as:

$$U_1(z, t) = I_c + I_s, \tag{21}$$

where

$$I_c = -\frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\omega_c}^{\omega_c} e^{i\omega t} \cdot \frac{e^{-izk_1(\omega)}}{(i\omega - \lambda)} d\omega. \tag{22}$$

And the stationary phase approximation for $\omega_{dom,1}$ far from ω_c is given by

$$I_s \approx -\frac{A}{2\pi^2} \frac{1}{|i\omega_{dom,1} - \lambda|} \sqrt{\frac{2\pi}{z \left| \frac{d^2k}{dz^2} \right|}} \cos\left(k(\omega_{dom})z - \omega_{dom}t \pm \frac{\pi}{4}\right). \tag{23}$$

We go back to the values from (3):

$$V_1(z, t) = (I_c + I_s)e^{z/2H_1}. \tag{24}$$

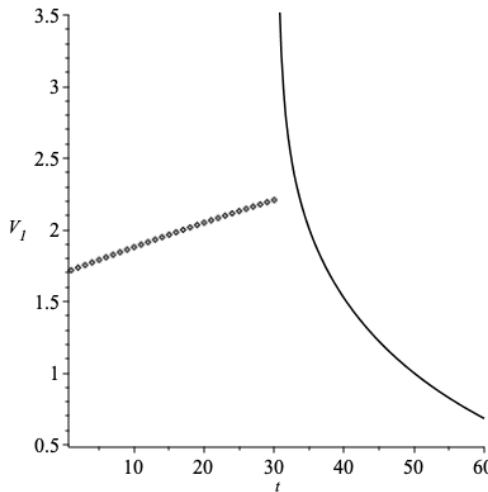


Fig. 2. Depicted V_1 according to the formula (24) for $z = 10000$ m.

The dots denote the $I_c \exp[z/2H_1]$, calculated numerically.

The solid line indicates $I_s \exp[z/2H_1]$ calculated using the stationary phase approximation

Second layer

$$V_2(z, t) = -\frac{A}{\sqrt{2\pi}} e^{h_1/2H_1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(i\omega - \lambda)} \times \tag{25}$$

$$\times \exp\left[i\left(\omega t - h_1 \sqrt{\frac{\omega^2}{H_1 g \gamma} - \frac{1}{4H_1^2}} - (z - h_{n-1}) \sqrt{\frac{\omega^2}{H_1 g \gamma} - \frac{1}{4H_1^2}}\right)\right] d\omega.$$



The expression for the phase in the second layer:

$$\varphi = \omega t - h_1 \sqrt{\frac{\omega^2}{H_1 g \gamma} - \frac{1}{4H_1^2}} - (z - h_{n-1}) \sqrt{\frac{\omega^2}{H_1 g \gamma} - \frac{1}{4H_1^2}} \quad (26)$$

we rewrite as:

$$\varphi = \omega t - h_1 \left(\sqrt{\frac{\omega^2}{H_1 g \gamma} - \frac{1}{4H_1^2}} - \frac{z - h_{n-1}}{h_1} \sqrt{\frac{\omega^2}{H_1 g \gamma} - \frac{1}{4H_1^2}} \right) \quad (27)$$

or

$$\varphi = \omega t - h_1 K(\omega) \quad (28)$$

17

that allows to apply the general expression (14) directly. The roots of the stationary phase condition $dK/d\omega = t/h_1$ are expressed in rather complicated form that forces us to apply a symbolic computation program.

Analysis of the Effects at Ionospheric Heights. Neutral gas perturbation

To analyze the neutral gas perturbation effect at the altitudes of the ionosphere, it is necessary to return to the physical quantities and then calculate their changes with increasing altitude for each layer:

$$p'_n = P_n \cdot \exp\left(-\frac{z - h_{n-1}}{2H_n}\right), \varphi'_n = \Phi_n \cdot \exp\left(-\frac{z - h_{n-1}}{2H_n}\right), \quad (29)$$

$$U_n = V_n \cdot \exp\left(\frac{z - h_{n-1}}{2H_n}\right).$$

The acoustic wave propagation entering the ionosphere acts on ions. The problem of the AGW ionosphere effect description has been studied for many years [6].

Ionospheric effect

The ionosphere effect, a variation of electron concentration as a function of the vertical coordinate and time, is determined by the vertical component of velocity. In [5], a simple formula for the electron concentration dynamics was derived, and its coordinate and time dependence were calculated as the solution of the diffusion equation, parametrized by the velocity profile as a coefficient. For more details, see [6]. The formula is an expansion of the diffusion equation solution in a series by Whittaker functions with a leading term in the conditions of the considered problem.

Discussion: Comparison

Due to the almost exponential growth of the amplitude with altitude above sea level, even small disturbances at sea level increase at the altitudes of the ionosphere, which gives a gas velocity amplitude over 200 m/s, cf. [9].



This, together with additional information about source localization guarantees the possibility to use the model in tsunami diagnostics and the eventual prognosis of the wave impact at the seashore.

A comparison with the pulse arrival times (t_a) at a prescribed height, may be estimated by the summation of the times $t_n = h_n - h_{n-1} / V_{gn}$, where V_{gn} are the group velocities in n -layer borders. This fact is supported by the measurements results, reported in [9]. More precisely, the arrival time was estimated by the condition $\omega_{dom} \approx \omega_c$ and evaluation of the time delay via the layer group velocities $t_n = 1/k'(\omega_{dom,n})$. For the height of 100 km, it gives the value $t_a = 319s$, the sum of time delays for the first layers, which approximately corresponds to the result of the simulations and experiments given, again in [9].

As for results related to ionosphere perturbations, see again [10]. The simulations show the variation of the electron density at the F-layer of about 8–10 % (Figure 10 of [10]), which is in rather good correspondence with our estimations.

Conclusions

The result of this paper is the final formula for acoustic wave perturbation at ionosphere heights. The expression of the resulting inverse Fourier transform integrals yields an explicit expression for the fluid velocity field by stationary phase method, combined with numerical and symbolic computations. The model of the acoustic wave generated by the earthquake may be built as a similar boundary regime propagation problem.

As a next important result, we do an adaptation of the explicit formula for the infrasonic wave impact to the electron concentration at ionosphere layers.

Finally, combining the analytical formulas creates the basis for the algorithm that can evaluate the ionospheric effect very quickly. Such a model, combined with the event localization model, for tsunami or earthquake diagnostics may be beneficial.

Acknowledgment. Author would like to express gratitude to S. Leble for the problem statement and consultations on the content of article and formulation of the results.

This research was funded by FBFR Grant № 18-05-00184 A.

References

1. Hickey M., Schubert G., Walterscheid R.L. Propagation of tsunami-driven gravity waves into the thermosphere and ionosphere // J. Geophys. Res. 2009. Vol. 114. doi: 10.1029/2009JA014105.
2. Godin O.A. Air-sea interaction and feasibility of tsunami detection in the open ocean // J. Geophys. Res. 2004. Vol. 109. C05002. doi: 10.1029/2003JC002030.
3. Zaboltn N., Godin O., Bullett T. Oceans are a major source of waves in the thermosphere // J. Geophys. Res. Space Phys. 2016. Vol. 121. P. 3452–3463. doi: 10.1002/2016JA022357.



4. Hines C.O. Gravity waves in the atmosphere // Nature. 1972. Vol. 239. P. 73–78.
5. Karpov I. V., Leble S.B. The analytical theory of ionospheric IW effect in F2 layer // Geomagn. Aeron. 1986. Vol. 26. P. 234–237.
6. Leble S.B. Theory of Thermospheric Waves and their Ionospheric Effects // PAGEOPH. 1988. Vol. 127. P. 491–527.
7. Kherani E. A., Lognonne P., Hebert H. et al. Modelling of the total electronic content and magnetic field anomalies generated by the 2011 tohokuoki tsunami and associated acoustic-gravity waves // Geophys. J. Int. 2012. Vol. 191. P. 1049–1066. doi: 10.1111/j.1365-246X.2012.05617.x.
8. Peltier W.R., Hines C. O. On the possible detection of tsunamis by a monitoring of the ionosphere // J. Geophys. Res. 1976. Vol. 81. P. 1995–2000.
9. Wei C., Buhler O., Tabak E.G. Evolution of tsunami-induced internal acoustic-gravity waves // J. Atmos. Sci. 2015. Vol. 72. P. 2303–2317. doi: 10.1175/JAS-D-14-0179.1.
10. Zettergren M.D., Snively J.B. Ionospheric response to infrasonic- acoustic waves generated by natural hazard events // J. Geophys. Res. Space Phys. 2015. Vol. 120. P. 8002–8024. doi: 10.1002/2015JA021116.
11. Perelomova A. Nonlinear dynamics of vertically propagating acoustic waves in a stratified atmosphere // Acta Acust. United Acust. 1998. Vol. 84. P. 1002–1006.
12. Occhipinti G., Kherani E., Lognonne A., Geomagnetic P. Three-dimensional waveform modeling of ionospheric signature induced by the 2004 Sumatra tsunami // Geophys. Res. Lett. 2006. Vol. 33. doi: 10.1029/2006GL026865.
13. Hines C.O. Propagation velocities and speeds in ionospheric waves: A review // J. Atmos. Sol. Terr. Phys. 1974. Vol. 36. P. 1179–1204. doi: 10.1016/0021-9169(74)90107-X.
14. Babich V.M., Buldyrev V.S., Kuester E.F. Short-Wavelength Diffraction Theory: Asymptotic Methods. Berlin, 1991.
15. Leble S., Smirnova E. Tsunami-Launched Acoustic Wave in the Layered Atmosphere: Explicit Formulas Including Electron Density Disturbances // Atmosphere. 2019. Vol. 10. 629. doi: doi.org/10.3390/atmos10100629.
16. Dobrokhotov S.Y., Minenkov D.S., Nazaikinskii V.E., Tirozzi B. Functions of noncommuting operators in an asymptotic problem for a 2D wave equation with variable velocity and localized right-hand side // Oper. Theory Adv. Appl. 2013. Vol. 228. P. 95–126.
17. Leble S., Perelomova A. Problem of proper decomposition and initialization of acoustic and entropy modes in a gas affected by the mass force // Appl. Math. Model. 2013. Vol. 13. P. 629–635.

The author

Ekaterina S. Smirnova, Master's Student, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: smirnova.ekaterina.serg@gmail.com

Об авторе

Екатерина Сергеевна Смирнова – магистрант, Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: smirnova.ekaterina.serg@gmail.com

**О. П. Борчевкина, Ю. А. Курдяева, М. И. Карпов
Б. В. Чубаренко, Д. А. Домнин, Н. А. Коренькова, И. В. Карпов**

ЭФФЕКТЫ ШТОРМОВЫХ ЯВЛЕНИЙ В БАЛТИЙСКОМ МОРЕ НА ВЕРХНЮЮ АТМОСФЕРУ

Представлены результаты наблюдений параметров ионосферы, выполненных в Калининграде (54° N, 20° E) в период метеорологического шторма в Балтийском море в октябре 2018 г. Анализ вариаций ионосферы показал, что в период шторма увеличение полного электронного содержания достигало 20 % относительно осредненных величин, а увеличение критической частоты F2-слоя – 19 %. Также выявлено повышение амплитуд вариаций ионосферы с периодами 6–20 мин над областью метеорологического шторма. Результаты численного эксперимента по возмущению верхней атмосферы вследствие наблюдаемых вариаций приземного давления также показали усиление волновой активности с периодами ~15 мин и формирование крупномасштабного возмущения на высотах термосферы.

The paper presents the results of observations the ionospheric parameters in Kaliningrad (54° N, 20° E) during a meteorological storm in the Baltic sea on October 2018. The analysis of ionospheric variations showed the increase in the total electron content reached 20 % relative to the averaged values, and the increase in the critical frequency of the F2 layer was 19 % during the storm. The increase in the amplitudes of ionospheric variations with periods of 6–20 min over the area of a meteorological storm was also revealed. The results of the numerical experiment on the disturbance of the upper atmosphere due to the observed variations in surface pressure also showed an increase in wave activity with periods of ~15 min and the formation of a large-scale disturbance at the heights of the thermosphere.

Ключевые слова: метеорологическое возмущение, ионосфера, полное электронное содержание, системы глобального позиционирования, математическое моделирование, дистанционное зондирование.

Keywords: meteorological storm, ionosphere, total electron content, global positioning system, mathematical modeling, remote sensing.

Введение

В исследованиях влияния динамических процессов в нижней атмосфере на состояние и изменчивость верхней атмосферы и ионосферы большое внимание уделяется изучению характеристик волн, возникающих в условиях сильных метеорологических возмущений. Экспериментальные исследования состояния и динамики ионосферы над областями развития особо экстремальных метеорологических событий, таких как ураганы и тайфуны, демонстрируют формирование различного рода эффектов, в том числе перемещающихся ионосферных возму-



щений (ПИВ), возмущений электрического поля, полного электронного содержания (ионосферный параметр ТЕС), возникновение оптических эмиссий, явлений F-рассеивания и пр. [1–5].

Во время масштабных метеорологических событий на средних широтах в спокойных гелиогеофизических условиях, когда воздействие на ионосферу сверху минимально, отмечается изменение параметров нейтральной атмосферы и ионосферы на 20 % и более [6; 7]. Ионосферные возмущения возникают достаточно быстро, спустя несколько часов после начала метеорологического возмущения, что указывает на волновую природу процессов, реализующих связи явлений в различных слоях атмосферы. Наибольший интерес в исследованиях механизмов формирования ионосферных возмущений в таких явлениях представляют акустико-гравитационные волны (АГВ) [8; 9]. Такие волны способны переносить энергию из области возмущений в нижней атмосфере до высот ионосферы, влиять на локальную электронную плотность посредством ион-нейтральных столкновений, приводя к возникновению ионосферных возмущений и ПИВ [10]. В свою очередь, возникновение ионосферных неоднородностей оказывает влияние на устойчивость функционирования систем связи в различных частотных диапазонах, глобальных навигационных спутниковых систем (GNSS).

В настоящей работе представлены результаты наблюдений и анализ вариаций ионосферы во время метеорологического события в Балтийском море в октябре 2018 г.

Методы и результаты наблюдений

Для описания метеорологической обстановки использовались трехчасовые измерения максимальных значений порывов ветра, а также атмосферного давления, приведенного к среднему уровню моря (<http://www.rp5.ru>). В качестве данных для анализа отклика ионосферы использовались часовые измерения критической частоты F2-слоя ионосферы (foF2, МГц), характеризующей максимум в вертикальном профиле электронной концентрации по данным ионозонда «Парус-А» Калининградского филиала ИЗМИРАН (54° N, 20° E), а также осредненные за 10-минутный интервал измерения полного электронного содержания (ионосферный параметр ТЕС) по данным приемника сигналов GPS. В качестве дополнительного источника данных использовались измерения метеорологической станции в Ольштыне (53° N, 20° E), Польша (часовые измерения), а также станции International GNSS Service LAMA (53.7° N, 20.6° E). Для анализа возмущений foF2 и ТЕС были определены отклонения данных величин относительно скользящей медианы, отцентрированной на день рассматриваемого дня, с окном 13 суток до и после рассматриваемого момента времени.

На рисунке 1 представлены измерения атмосферного давления, максимальных порывов ветра, индексов геомагнитной активности Kp и Dst, а также данные ТЕС и foF2 в Калининграде и Ольштыне с 21 по



26 октября 2018 г. К середине 23 октября в Калининграде и Ольштыне приземное атмосферное давление опустилось ниже 750 мм. рт. ст., скорость ветра превысила 17 м/с и на следующий день достигла 20 м/с, что соответствует 8 баллам по шкале Бофорта. В ночь на 24 октября наблюдался рост электронной концентрации, и к 09:00 UT увеличение ТЕС достигло 20 % относительно осредненных величин, что соответствовало 2,4 стандартного отклонения σ . Увеличение критической частоты F2-слоя составило 19 %, или 1,6 σ .

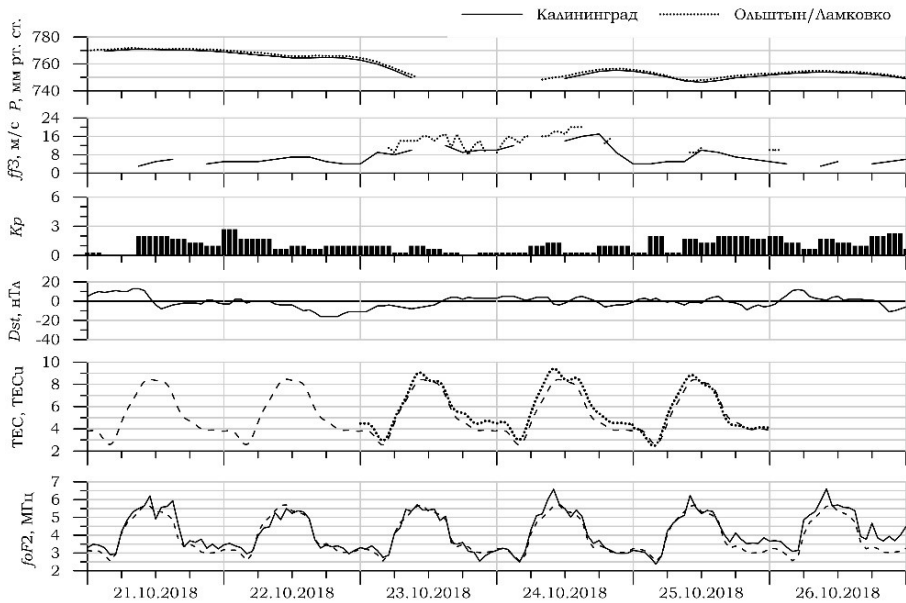


Рис. 1. Измерения атмосферного давления P , максимальных порывов ветра $ff3$, индексов геомагнитной активности K_p и Dst , а также ТЕС в Ольштыне и $foF2$ в Калининграде 21-26 октября 2018 г. Пунктирными линиями указаны медианные значения ТЕС и $foF2$.

Для определения частотных характеристик вариаций параметров ионосферы над областью метеорологического возмущения применялись методы вейвлет-анализа к данным наблюдений полного электронного содержания, определенных по сигналам пролетных спутников GPS. Методы вейвлет-анализа широко применяются для обработки и анализа нестационарных во времени и неоднородных в пространстве сигналов [11; 12]. Результаты такого анализа позволяют получить информацию о распределении энергии в спектре сигнала и сведения о времени появления определенных частотных составляющих. При вейвлет-преобразовании одномерных сигналов частота и время рассматриваются как независимые переменные, что позволяет получать сведения о временной эволюции сигнала.

Коэффициенты вейвлет-преобразования вычисляются следующим образом:



$$W(a, b) = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} x(t) \psi\left(\frac{t-b}{a}\right) dt, \quad (1)$$

где $x(t)$ – случайный процесс; $\psi(t)$ – выбранный анализирующий вейвлет; b – параметр сдвига.

При вычислении вейвлет-коэффициентов нерегулярных процессов методом прямоугольников выражение (1) преобразуется к следующему виду:

$$W(a, b) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sum_{k=0}^{N-2} (t_{k+1} - t_k) x_k \psi_k\left(\frac{t_k - b}{a}\right), \quad (2)$$

где N – число отсчетов реализации неэквилидистантного временного ряда.

В настоящем исследовании был выбран комплексный вейвлет Морле

$$\psi = e^{i\omega b t} e^{-\frac{t^2}{2}}.$$

Использование данных ТЕС пролетных спутников дает возможность выделять на фоне регулярных и нерегулярных возмущающих факторов в возмущения в ионосфере на основе точных фазовых измерений [13]. Данные имеют временное разрешение 30 с, что позволяет исследовать различные периодичности сигнала.

На рисунке 2 представлены периодограммы полного электронного содержания, полученные по наблюдениям сигналов спутника PRN 22 над станцией VIS0 (57.5° N, 18.4° E) 22–28 октября 2018 г. Пороговое значение угла места Солнца для анализа отклика ионосферы на метеорологические возмущения в тропосфере было определено равным 20°. В анализе наблюдений основное внимание уделялось выделению вариаций ТЕС с периодами 2–20 мин. АГВ с такими периодами распространяются практически вертикально из области возмущений в тропосфере.

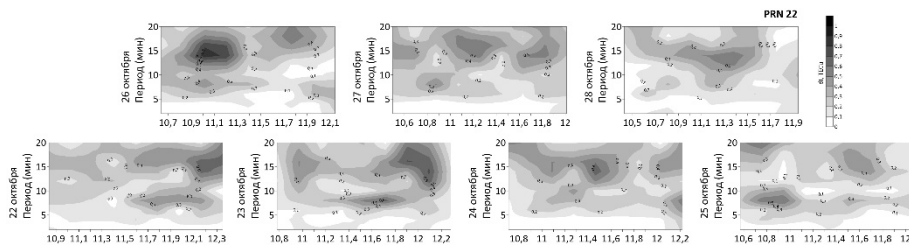


Рис. 2. Спектры вариаций ТЕС 22–28 октября 2018 г. на станции VIS0

Как видно из рисунка 2, дни метеорологического возмущения в тропосфере сопровождаются усилением амплитуд вариаций ТЕС с периодами 6–10 и 12–18 мин 25–26 октября. Такое увеличение может быть связано с увеличением активности АГВ, распространяющихся из области метеорологического шторма.

Таким образом, результаты анализа вариаций ТЕС показывают усиление волновой активности АГВ с периодами ~6-20 мин в периоды метеорологического шторма в 25–26 октября 2018 г.

Моделирование

Для оценки влияния на верхнюю атмосферу АГВ, возбуждаемых в тропосфере в период метеорологического шторма, был выполнен численный эксперимент с применением численной модели генерации и распространения АГВ Atmosym [14]. Методика проведения численного эксперимента с использованием в качестве источника возмущений наблюдаемых вариаций приземного давления представлена в [15; 16].

В проведенном численном эксперименте по исследованию возмущений верхней атмосферы в Балтийском регионе от метеорологических источников были использованы двухминутные данные изменения температуры в Балтийском море. Данные были приведены к вариациям давления и использованы в качестве нижнего граничного условия в модельных расчетах. Область интегрирования уравнений модели составляла 2000 км в горизонтальном направлении и 500 км — по вертикали.

Возмущения атмосферного давления на нижней границе модели воспроизводили условия, в которых вариации давления в области с $x < 1000$ км определялись по данным, полученным над водной поверхностью, а в области с $x > 1000$ км — по наблюдениям на суше. Модельный источник движется от начала левой границы расчетной области до середины (1000 км) и продолжает работать на этом участке все оставшееся время. На рисунке 3 показаны пространственные распределения волновых возмущений температуры в верхней атмосфере от источника в нижней атмосфере.

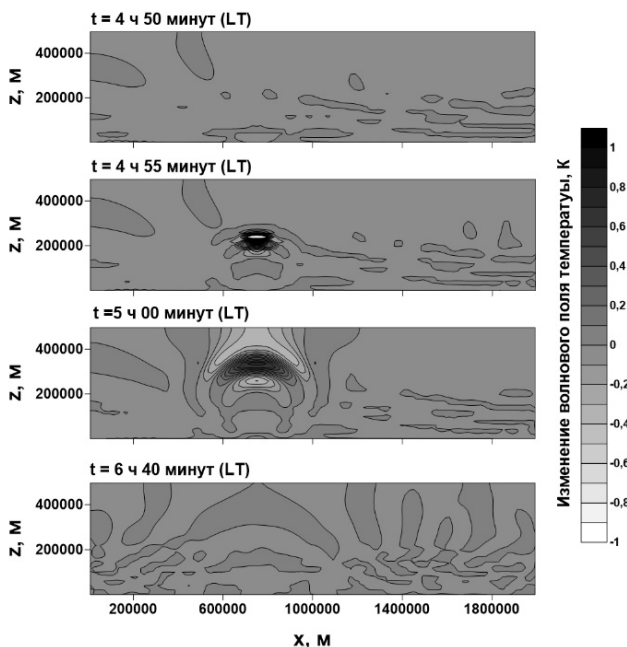


Рис. 3. Волновые возмущения температуры в верхней атмосфере от наземного источника АГВ



Результаты расчетов показали, что такой источник генерирует в основном инфразвуковые волны с малыми амплитудами. На фоне резкого понижения давления около 5 часов утра по местному времени наблюдается резкое увеличение температуры, которое можно ассоциировать с приходом внутренних гравитационных волн с периодом более 15 мин. Волновая добавка, показанная на рисунке 3, превышает значения, соответствующие спокойным метеорологическим условиям [17], почти в 2 раза. Поскольку используемые данные о вариациях давления получены косвенным методом, реальный нагрев атмосферы может быть существенно выше. Эффекты, вызванные распространением этих волн, держатся в верхней атмосфере около 1,5 ч. Предполагаемые физические механизмы возмущений верхней атмосферы подробно описаны в [17; 18].

Заключение

Анализ наблюдений атмосферных и ионосферных параметров в период развития метеорологического шторма на Балтике в октябре 2018 г. показал, что быстрые изменения скорости ветра и приземного давления ведут к увеличению ТЕС до 2,4 стандартного отклонения и критической частоты F2-слоя до 1,6 стандартного отклонения непосредственно над областью метеорологических возмущений. Изменение скорости ветра определяется неустойчивым состоянием атмосферы и характеризует процессы возбуждения атмосферных волн.

В условиях метеорологических штормов усиливаются процессы возбуждения АГВ в нижней атмосфере. Распространение таких волн в верхнюю атмосферу приводит к формированию возмущений состояния термосферы на пространственных масштабах, определяемых длительностью и пространственными размерами области, находящейся в зоне метеорологического возмущения. Появление таких областей влияет на циркуляцию и электродинамические процессы в термосфере и ионосфере локальным ионосферным возмущениям, проявляющимся в изменениях ионосферных параметров. Модельное исследование результатов распространения АГВ от наземных источников подтверждают предполагаемые физические механизмы влияния метеорологических штормов на верхнюю атмосферу и ионосферу.

Благодарности. Авторы выражают благодарность International GNSS Service за доступ к данным ГНСС и сервису OMNIWeb Plus NASA / Goddard Space Flight Center за данные геомагнитных индексов, использованные в настоящем исследовании.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Калининградской области, грант №19-45-390005 («Влияние штормовых явлений в прибрежной зоне Балтийского моря на атмосферу и ионосферу в Калининградской области»).

Список литературы

1. Martinis C.R., Manzano J.R. The influence of active meteorological systems on the ionosphere F region // Ann. Geofisica. 1999. Vol. 42, iss. 1. P. 1–7.



2. Polyakova A. S., Perevalova N. P. Comparative analysis of TEC disturbances over tropical cyclone zones in the North-West Pacific Ocean // *Adv. Space Res.* 2013. Vol. 52. P. 1416–1426.

3. Chernigovskaya M. A., Shpynev B. G., Ratovsky K. G. Meteorological effects of ionospheric disturbances from vertical radio sounding data // *J. Atmos. Solar-Terr. Phys.* 2015. Vol. 136. P. 235–243.

4. Chou M. Y., Lin C. C. H., Yue J. et al. Concentric traveling ionosphere disturbances triggered by Super Typhoon Meranti // *Geophys. Res. Lett.* 2017. Vol. 44, iss. 3. P. 1219–1226.

5. Li W., Yue J., Yang Y. et al. Analysis of ionospheric disturbances associated with powerful cyclones in East Asia and North America // *J. Atmos. Solar-Terr. Phys.* 2017. Vol. 161. P. 43–54.

6. Черниговская М. А., Сутырина Е. Н., Ратовский К. Г. Метеорологические эффекты ионосферной возмущенности над Иркутском по данным вертикального радиозондирования // *Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса.* 2014. Т. 11, №2. С. 264–274.

7. Борчевкина О. П., Карпов И. В. Ионосферные неоднородности в периоды метеорологических возмущений // *Геомагнетизм и аэрономия.* 2017. Т. 57, №5. С. 670–675.

8. Azeem I., Barlage M. Atmosphere-ionosphere coupling from convectively generated gravity waves // *Adv. Space Res.* 2018. Vol. 61, iss. 7. P. 1931–1941.

9. Yiğit E., Koucká Knížová P., Georgieva K., Ward W. A review of vertical coupling in the Atmosphere-Ionosphere system: Effects of waves, sudden stratospheric warmings, space weather, and of solar activity // *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics.* 2016. Vol. 141. P. 1–12.

10. Hocke K., Schlegel K. A review of atmospheric gravity waves and travelling ionospheric disturbances: 1982–1995 // *Annales Geophysicae.* 1996. Vol. 14. P. 917–940.

11. Захаров В. И., Зиенко А. С. Методика статистического анализа вейллет-спектров ионосферных сигналов системы GPS // *Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия.* 2007. №2. С. 44–49.

12. Астафьева Н. М. Вейвлет-анализ: основы теории и примеры применения // *Успехи физических наук.* 1996. Т. 166, №11. С. 1145–1170.

13. Davies K., Hartmann G. K. Studying the ionosphere with global positioning system // *Radio Sci.* 1997. Vol. 32. P. 1695-1698.

14. Gavrilov N. M., Kshevetskii S. P. Numerical modeling of propagation of breaking nonlinear acoustic-gravity waves from the lower to the upper atmosphere // *Advances in Space Research (includes Cospas Information Bulletin).* 2013. Vol. 51, iss. 7. P. 1168–1174.

15. Kurdyayeva Y., Kulichkov S., Kshevetskii S. et al. Propagation to the upper atmosphere of acoustic-gravity waves from atmospheric fronts in the Moscow region // *Ann. Geophys.* 2019. Vol. 37. P. 447–454.

16. Kurdyayeva Yu. A., Kshevetskii S. P., Gavrilov N. M., Kulichkov S. N. Correct Boundary Conditions for the High-Resolution Model of Nonlinear Acoustic-Gravity Waves Forced by Atmospheric Pressure Variations // *Pure and Applied Geophysics.* 2018. Vol. 175, iss. 10. P. 3639–3652.

17. Карпов И. В., Кшевецкий С. П., Борчевкина О. П. и др. Возмущения верхней атмосферы и ионосферы, инициированные источниками акустико-гравитационных волн в нижней атмосфере // *Химическая физика.* 2016. Т. 35, №1. С. 59–64.

18. Карпов И. В., Борчевкина О. П., Карпов М. И. Локальные и региональные возмущения ионосферы в периоды метеорологических возмущений // *Геомагнетизм и аэрономия.* 2019. Т. 59, №4. С. 492–500.



Об авторах

Ольга Павловна Борчевкина — канд. физ.-мат. наук, мл. науч. сотр., Калининградский филиал Института земного магнетизма, ионосферы и распространения радиоволн им. Н.В. Пушкова РАН (ИЗМИРАН); науч. сотр., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: olgaborchevkina@gmail.com

Юлия Андреевна Курдяева — мл. науч. сотр., Калининградский филиал Института земного магнетизма, ионосферы и распространения радиоволн им. Н.В. Пушкова РАН (ИЗМИРАН), Россия.

E-mail: yakurdyeva@gmail.com

27

Иван Викторович Карпов — д-р физ.-мат. наук, ведущ. науч. сотр., Калининградский филиал Института земного магнетизма, ионосферы и распространения радиоволн им. Н.В. Пушкова РАН (ИЗМИРАН); проф., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: ivkarpov@inbox.ru

Михаил Иванович Карпов — канд. физ.-мат. наук, науч. сотр., Калининградский филиал Института земного магнетизма, ионосферы и распространения радиоволн им. Н.В. Пушкова РАН (ИЗМИРАН); инженер-исследователь, Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: mikhailkarpov@hotmail.com

Борис Валентинович Чубаренко — канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., Атлантическое отделение Института океанологии РАН, Россия.

E-mail: chuboris@mail.ru

Дмитрий Александрович Домнин — канд. геогр. наук, науч. сотр., Атлантическое отделение Института океанологии РАН, Россия.

E-mail: dimanisha@gmail.com

Нина Алексеевна Коренькова — ст. науч. сотр., Калининградский филиал Института земного магнетизма, ионосферы и распространения радиоволн им. Н.В. Пушкова РАН (ИЗМИРАН), Россия.

E-mail: wdizmiran@gmail.com

The authors

Dr Olga P. Borchevkina, Junior Research Fellow, Kaliningrad Branch of Pushkov Institute of Terrestrial Magnetism, Ionosphere and Radio Wave Propagation, Russian Academy of Sciences; Research Fellow, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: olgaborchevkina@gmail.com

Yuliya A. Kurdyeva, Junior Research Fellow, Kaliningrad Branch of Pushkov Institute of Terrestrial Magnetism, Ionosphere and Radio Wave Propagation, Russian Academy of Sciences, Russia.

E-mail: yakurdyeva@gmail.com



Prof. Ivan V. Karpov, Leading Research Fellow, Kaliningrad Branch of Pushkov Institute of Terrestrial Magnetism, Ionosphere and Radio Wave Propagation, Russian Academy of Sciences; Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: ivkarpov@inbox.ru

Prof. Mikhail I. Karpov, Leading Research Fellow, Kaliningrad Branch of Pushkov Institute of Terrestrial Magnetism, Ionosphere and Radio Wave Propagation, Russian Academy of Sciences; Research Engineer, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: mikhailkarpov@hotmail.com

Dr Boris V. Chubarenko, Senior Research Fellow, Atlantic Branch of the Institute of Oceanology, Russian Academy of Sciences, Russia.

E-mail: chuboris@mail.ru

Dr Dmitry A. Domnin, Research Fellow, Atlantic Branch of the Institute of Oceanology, Russian Academy of Sciences, Russia.

E-mail: dimanisha@gmail.com

Nina A. Korenkova, Senior Research Fellow, Kaliningrad Branch of Pushkov Institute of Terrestrial Magnetism, Ionosphere and Radio Wave Propagation, Russian Academy of Sciences, Russia.

E-mail: wdizmiran@gmail.com

С. А. Ботман, С. Б. Лебле

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ РАССЕЙЯНИЯ ЗОННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В АТОМНОЙ ЦЕПОЧКЕ НА ПРИМЕСЯХ В ПРИБЛИЖЕНИИ ПОТЕНЦИАЛОВ НУЛЕВОГО РАДИУСА

Рассматривается проблема рассеивания связанных электронов атомной цепочки в трехмерном пространстве на атомах примесей. Для описания зонных электронов используются блоховские функции, построенные с учетом симметрии системы. При этом для описания как потенциалов отдельных атомов цепочки, так и потенциалов примесей используется приближение потенциалов нулевого радиуса.

In this work the problem of electron bound to 3d linear atom chain scattering on impurity atoms is considered. In order to describe zone electrons the Bloch functions are constructed with respect to symmetry consideration. In addition, zero range potential approximation is used to model both atoms in chain and impurity atoms.

Ключевые слова: блоховские функции, рассеяние, примесь, потенциал нулевого радиуса.

Keywords: Bloch wavefunction, scattering, impurity, zero range potential.

Введение

В основе потенциалов нулевого радиуса (ПНР) [1] лежит замена реального потенциала атома соответствующим граничным условием в точке расположения атома, что позволяет получать точные решения для целого класса задач. Одним из основных условий данного приближения является относительная малость энергий частиц, движущихся в искомом потенциале. Для таких частиц длина волны де Бройля будет велика, что позволяет не учитывать в рассмотрении точную форму и параметры реального потенциала и заменить его ПНР.

Метод ПНР был успешно применен для описания значительного числа наблюдаемых явлений, включая межзонные переходы в нанотрубках [2], эффект Рамзауэра для электрон-молекулярного рассеяния [3]. Также был проведен ряд попыток использовать ПНР для описания электронного транспорта в квазиодномерных периодических структурах [4; 5]. К таким структурам относятся нанонити, которые находят применение в различных областях, включая наносенсоры, транзисторы и квантовые компьютеры.

Принципиальным отличием рассеяния зонного электрона от свободного является необходимость его описания с позиций блоховских функций. В данной работе рассматривается вопрос построения таких функций, а также постановки задачи рассеяния с их использованием.



Функции Блоха

Рассмотрим линейную цепочку эквидистантно расположенных атомов в трехмерном пространстве. Потенциал такой цепочки будет задаваться следующей суммой:

$$V(\vec{r}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_0(\vec{r} - n\vec{a}), \quad (1)$$

где V_0 — потенциал отдельного атома, \vec{a} — вектор расстояния между соседними атомами.

30

Далее, будем считать, что длина волны зонных электронов данной цепочки велика, что позволяет нам использовать приближение ПНР. Согласно простейшему варианту данного приближения, учитывающему только s состояния, точный потенциал атома V_0 , расположенного в точке \vec{R}_s , можно заменить следующим граничным условием, накладываемым на волновую функцию электрона Ψ :

$$\lim_{\vec{r} \rightarrow \vec{R}_n} \left(\frac{\partial}{\partial |\vec{r} - \vec{R}_n|} (|\vec{r} - \vec{R}_n| \Psi) - \alpha |\vec{r} - \vec{R}_n| \Psi \right) = 0, \quad (2)$$

где параметр α описывает мощность потенциала.

Затем введем цилиндрическую систему координат (ρ, ϕ, z) таким образом, что ось z сонаправлена с вектором \vec{a} и проходит через все атомы цепочки. Нас будут интересовать связанные состояния электронов в этой цепочке. Волновые функции для таких электронов необходимо искать как собственные функции полного набора коммутирующих операторов. В случае цепочки атомов таким набором будут следующие операторы:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}), \quad (3)$$

— оператор Гамильтона, где \hbar — постоянная планка; m — масса электрона; $V(\vec{r})$ — полный потенциал цепочки (1);

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{d}{d\phi}, \quad (4)$$

— оператор проекции момента импульса;

$$\hat{T}_a \psi(\rho, \phi, z) = \psi(\rho, \phi, z + a), \quad (5)$$

— оператор трансляции на вектор \vec{a} .

Очевидно, эти операторы коммутируют

$$[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0, \quad [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0, \quad [\hat{T}_a, \hat{L}_z] = 0$$

и образуют в трехмерном пространстве полный набор.



Соответственно, для нахождения блоховской волновой функции необходимо решить задачи на собственные значения и функции для операторов (3)–(5).

Поставим для начала задачу на собственные значения оператора трансляции:

$$\hat{T}_a \xi(z) = \xi(z+a) = \nu \xi(z), \quad (6)$$

где μ – собственное значение оператора \hat{T}_a .

Из требования конечности функции ξ при $z \rightarrow \pm\infty$ следует, что $|\nu| = 1$. С учетом линейности оператора \hat{T}_a можно записать

$$\nu = e^{i\kappa a}. \quad (7)$$

Задачу на собственные значения оператора \hat{L}_z с учетом явного вида оператора в введенной системе координат можно записать следующим образом:

$$\hat{L}_z \zeta(\phi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \zeta(\phi) = \hbar \mu \zeta(\phi), \quad (8)$$

где μ – собственное значение оператора \hat{L}_z . Решение этого уравнения имеет следующий вид:

$$\zeta(\phi) = e^{i\mu\phi}, \quad \mu \in \mathbb{Z}. \quad (9)$$

В гамильтониане (3) в случае приближения ПНР полный потенциал обращается в ноль, поэтому собственные функции будут соответствовать таковым для пустого пространства. Таким образом, с учетом требований накладываемых граничными условиями и симметрией системы, удобным будет представить полную волновую функцию в виде следующей суммы:

$$\psi_{k,\kappa,\mu}(\vec{r}) = C(k, \kappa, \mu) e^{i\mu\phi} \sum_n f_n \frac{e^{-k|\vec{r}-\vec{R}_n|}}{|\vec{r}-\vec{R}_n|}, \quad (10)$$

где $\vec{R}_n = n\vec{a}$. Значение коэффициента f_n находится из уравнений (6) и (7):

$$f_n = \nu^n = e^{i\kappa n a}. \quad (11)$$

Далее, подставим полученную волновую функцию (10) в стационарное уравнение Шредингера для области пространства вне точек \vec{R}_n :

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} C(k, \kappa, \mu) \left[e^{i\mu\phi} \Delta \sum_n e^{i\kappa n a} \frac{e^{-k|\vec{r}-\vec{R}_n|}}{|\vec{r}-\vec{R}_n|} + \right.$$



$$\begin{aligned}
& + (\Delta e^{i\mu\phi}) \sum_n e^{ikna} \frac{e^{-k|\vec{r}-\vec{R}_n|}}{|\vec{r}-\vec{R}_n|} + 2\vec{\nabla} e^{i\mu\phi} \cdot \vec{\nabla} \sum_n e^{ikna} \frac{e^{-k|\vec{r}-\vec{R}_n|}}{|\vec{r}-\vec{R}_n|} \Big] = \\
& = -\frac{\hbar^2}{2m} (-\mu^2 + k^2) \psi = E\psi.
\end{aligned} \tag{12}$$

Таким образом, мы получили связь между энергией и квантовыми числами:

$$k^2 - \mu^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2}. \tag{13}$$

32

Подставив волновую функцию (10) в граничное условие (2) для атома m , получим:

$$\sum_{n \neq m} e^{ikna} \frac{e^{-k|m-n|a}}{|m-n|a} - e^{ikma} (k + \alpha) = 0. \tag{14}$$

Если ввести $q = |m - n|$, то сумму в (14) можно преобразовать следующим образом:

$$2 \sum_{q=1}^{\infty} \cos(\kappa qa) \frac{e^{-kqa}}{qa} = k + \alpha. \tag{15}$$

Из полученного уравнения можно получить информацию о зонной структуре потенциала (1).

Задача рассеяния

Для расчета вероятностей рассеяния удобно будет воспользоваться нормировкой волновой функции (10) на единицу потока. При этом в зависимости от знака волнового числа k_z поток может быть как положительным, так и отрицательным. Введем обозначения ψ_{\rightarrow} и ψ_{\leftarrow} таким образом, что выполняется

$$\iint_S \hat{j}_z \psi_{\rightarrow} ds = \pm 1, \tag{16}$$

где S – плоскость, перпендикулярная оси z ; \hat{j}_z – оператор потока:

$$\hat{j}_z \psi = \frac{\hbar}{2m_e i} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial z} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial z} \psi^* \right). \tag{17}$$

Подстановка (10) в (16) с учетом (17) дает

$$\iint_S \frac{\hbar k}{2m_e} \left| C_{\leftarrow} \right|^2 \sum_{n,m} 2 \sin(\kappa(m-n)a) \times$$



$$\begin{aligned} & \times \frac{e^{-k\sqrt{\rho^2+(z-ma)^2}}}{\sqrt{\rho^2+(z-ma)^2}} \frac{e^{-k\sqrt{\rho^2+(z-na)^2}}}{(\rho^2+(z-na)^2)^{\frac{3}{2}}} \times \\ & \times (z-na) \left(k\sqrt{\rho^2+(z-na)^2} + 1 \right) ds = \pm 1. \end{aligned} \quad (18)$$

Из полученного условия (18) можно получить выражение для нормированных коэффициентов C_{\rightarrow}
 C_{\leftarrow}

Далее, будем рассматривать рассеяние блоховских функций Ψ_{\rightarrow}
 Ψ_{\leftarrow} на примесном атоме, расположенном в точке $\vec{R}_s(\rho_s, \phi_s, z_s)$, ограничиваясь для простоты рассмотрением случая $\mu = 0$. Если полагать, что волна движется слева направо и с некоторой вероятностью упруго рассеивается, начиная двигаться справа налево, то анзац для для такого случая можно записать следующим образом:

$$\Psi = A_i \psi_{\rightarrow} + A_r \psi_{\leftarrow} + \psi_s, \quad (19)$$

где ψ_s – решение для связанного электрона в потенциале атома примеси:

$$\psi_s = C_s \frac{e^{-k|\vec{r}-\vec{R}_s|}}{|\vec{r}-\vec{R}_s|}. \quad (20)$$

Значение коэффициента $C_s = \sqrt{k/2\pi}$ находится из обычного условия нормировки.

Следуя приближению ПНР, подставим (19) в граничное условие для примеси:

$$\lim_{\vec{r}-\vec{R}_s \rightarrow 0} \left(\frac{\partial}{\partial |\vec{r}-\vec{R}_s|} (|\vec{r}-\vec{R}_s| \Psi) - \beta |\vec{r}-\vec{R}_s| \Psi \right) = 0, \quad (21)$$

где β – выражает мощность потенциала рассеивателя.

В результате получим

$$\begin{aligned} & A_i C_{\rightarrow} \sum_n e^{ikna} \frac{e^{-k|\vec{R}_s-\vec{R}_n|}}{|\vec{R}_s-\vec{R}_n|} + \\ & + A_r C_{\leftarrow} \sum_n e^{ikna} \frac{e^{-k|\vec{R}_s-\vec{R}_n|}}{|\vec{R}_s-\vec{R}_n|} - C_s k - C_s \beta = 0. \end{aligned} \quad (22)$$

Полагая $A_i = 1$ и учитывая, что $C_{\rightarrow} = C_{\leftarrow}$, можно получить

$$A_r = \frac{C_s}{C_{\leftarrow}} (k + \beta) \left[\sum_n e^{ikna} \frac{e^{-k|\vec{R}_s-\vec{R}_n|}}{|\vec{R}_s-\vec{R}_n|} \right]^{-1} - \frac{C_{\rightarrow}}{C_{\leftarrow}}. \quad (23)$$



Заключение

Полученный результат в дальнейшем можно использовать для расчета электронных транспортных такой системы с использованием кинетической теории. Также дальнейшее развитие подхода будет направлено на описание более сложных конфигураций квазиодномерных структур и рассеивателей.

Список литературы

34

1. Демков Ю.Н., Островский В.Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л., 1975.
2. Тищенко С.В. Зонная структура и межзонные переходы в углеродных нанотрубках : дис. ... канд. физ.-мат. наук. Одесса, 2007.
3. Yalunin S., Leble S.B. Multiple-scattering and electron-uracil collisions at low energies // The European Physical Journal Special Topics. 2007. Vol. 144, №1. P. 115–122.
4. Botman S.A., Leble S.B. Bloch wave – ZRP scattering as a key element of solid state physics computation: 1D example // TASK Quarterly. 2016. Vol. 20, №2. P. 197–206.
5. Botman S.A., Leble S.B. Electrical conductivity model for quasi-one-dimensional structures // Наносистемы: физика, химия, математика. 2017. Т. 8, №2. С. 231–235.
6. Leble S.B. Cyclic-periodic ZRP structures. Scattering problem for generalized Bloch functions and conductivity // Наносистемы: физика, химия, математика. 2018. Т. 9, №2. С. 225–243.

Об авторах

Степан Александрович Ботман — мл. науч. сотр., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: SBotman@kantiana.ru

Сергей Борисович Лебле — д-р физ.-мат. наук, проф., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: lebleu@mail.ru

The authors

Stepan A. Botman, Junior Research Fellow, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: SBotman@kantiana.ru

Prof. Sergey B. Leble, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: lebleu@mail.ru

S. B. Leble, A. Yu. Chychkalo

HYSTERESIS LOOPS FOR A BULK FERROMAGNETIC BY HEISENBERG MODEL

35

In a framework of Heisenberg theory, that link quantum-statistical description taking Gauss distribution into account, explicit form is obtained by permutations group theory, the division paramagnetic/ferromagnetic is studied. The magnetization curves are built for a given set of parameters, such as exchange integral, number of closest neighbours and temperature. In a special range of the parameters a transition from unique solution of the resulting Heisenberg equation to multi-valued is observed. For this case exemplary hysteresis loops are built. The expression for Curie temperature allows to evaluate the exchange integral and proceed into temperature range above the critical temperature.

В рамках теории Гейзенберга, связывающей квантово-статистическое описание с учетом распределения Гаусса, явная форма получается с помощью теории групп перестановок, изучается парамагнитное / ферромагнитное разделение. Кривые намагниченности построены для заданного набора параметров, таких как обменный интеграл, число ближайших соседей и температура. В специальной области параметров наблюдается переход от единственного решения полученного уравнения Гейзенберга к многозначному. Для этого случая построены примерные петли гистерезиса. Выражение для температуры Кюри позволяет учесть обменный интеграл и перейти в температурный диапазон выше критической температуры.

Keywords: hysteresis loop, ferromagnetism, paramagnetism, Curie temperature, Curie point, magnetisation curve, Curie – Weiss law, transcendental equation.

Ключевые слова: петля гистерезиса, ферромагнетизм, парамагнетизм, температура Кюри, точка Кюри, кривая намагничивания, закон Кюри – Вейсса, трансцендентное уравнение.

Introduction

The problem of theoretical description of magnetization takes the significant place in modern studies, beginning from seminal results of Weiss [2]. In the famous paper of Heisenberg [3] on ferromagnetism it was established that the Weiss electric forces are originated from exchange effect of quantum mechanics primarily introduced in textbooks' Heitler – London results. This paper [3] contains also very deep results of general significance. Multielectron terms theory was built using the very common symmetry: in respect to group of electrons permutations. It has its extension based on joint symmetry group of permutations and space symmetry group [9], where the exchange integral notion is «lifted» up the Hartree – Fock equations level. The permutation group theory allows to express energy via its irreducible



representations characters [6] and, in same context, statistical distribution function is constructed. Its derivative gives the internal parameter (magnetisation M value conjugate to magnetic field H , that results in equation of state $M(H)$).

The microscopic Heisenberg model goes to macroscopic Landau – Lifshits – Gilbert (LLG) equations as in [7]. For example, in the article of Rivas [1] the ferromagnetic alloy $Co_{66}Fe_4Mo_2Si_{16}B_{12}$ is studied. They explore such LLG-based model for hysteresis loop building with the help of LLG differential equations of the second order. Experimentally, the alloy was isothermally annealed: the following material was heated, then slowly cooled, in order to change the structural organisation of molecules in it. When the lattice (or other amorphous analog of it) changes, that changes the distance between units (atom or molecule), the properties of a material change too. The result is obtained at 530 degrees Celsius heating – there were some agglomerates of only 1–6 particles surrounded by the amorphous material. The group proceeded to the tests of its magnetic properties, changing the angle of applied magnetic field and other characteristics. Moreover, the bias of HL was detected.

In our paper we experienced two alike ways of graphical solutions of the resulting transcendent Heisenberg equations for the paramagnetism and ferromagnetism cases. It admits unique solution in the paramagnetism range, that gives the magnetisation curve. In the ferromagnetism domain few branches of solutions take place, that yields the loops.

Practically, notching the intersection points (IP) of functions into the so called matrix of values, which depends on the changes of external magnetic field strength and characteristics of the material. Connecting the extreme values of the matrix in case of multiple intersection between the same graphs, we managed either to build a hysteresis loop for a bulk ferromagnetic, or to identify some special cases, such as double loops with the central symmetry [10; 11].

In the last section we study a transition between para- and ferro-magnetics, parametrized by Curie temperature, that generalizes the Curie – Weiss relation.

Para-magnetic materials. On theoretical base

The Heisenberg equations, derived in [3–5] result in a couple of explicit functions, depending on M [9]:

$$y_1 = M, \quad (1)$$

$$y_2 = \tanh\left(\frac{\alpha + \beta M - \beta^2 \frac{M}{z} + \beta^2 \frac{M^3}{2z}}{2}\right), \quad (2)$$

where

$$\alpha = \frac{e\hbar}{mk_B T} H, \quad (3)$$



$$\beta = \frac{zJ}{k_B T}, \quad (4)$$

z – a number of closest neighbours; e – an electron charge; \hbar – Plank constant; m – an electron mass; k_B – Boltzmann constant; T – temperature; J – an exchange integral.

The values of the parameters e, m, \hbar are quite definite, while the z, J, T ones choice need some discussion. So, Heisenberg [3–5] estimates the parameter J by the note, that the exchange energy should be about $k_B T$, giving the value $J \approx 10^{-13} \text{ erg}$. For such the value the parameter β is of order of 1 for the room temperature.

The paramagnetic case domain in $z\beta$ plane is fixed by the condition:

$$\beta\left(1 - \frac{\beta}{z}\right) < 2. \quad (5)$$

The magnetisation curve construction

To build the magnetisation curve the values of M for each α are required. We take them by the means of solving the system of equations (1) and (2) graphically (Fig. 1). There is one intersection point between the line and the curve for para-magnetic materials, for the choice of z, β , such that (5) holds.

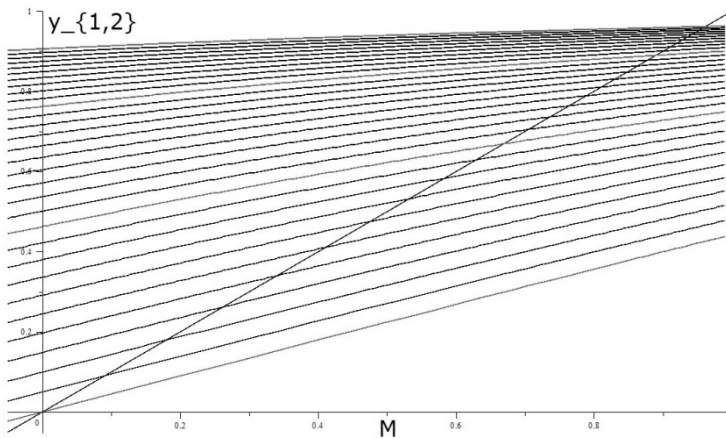


Fig. 1. The choice of parameters: $\beta = 1; z = 10$

The intersection points (IP) of a diagonal line with curves are the solution of the system of equations (1) and (2). The curves correspond to α , that is proportional to the magnetic field H , substitution from 0 value (the lowest curve) to 3 (the highest curve). The value of α between the closest curves differs in 0.1.

Next, the magnetization curve by the mentioned algorithm is built in Figure 2.

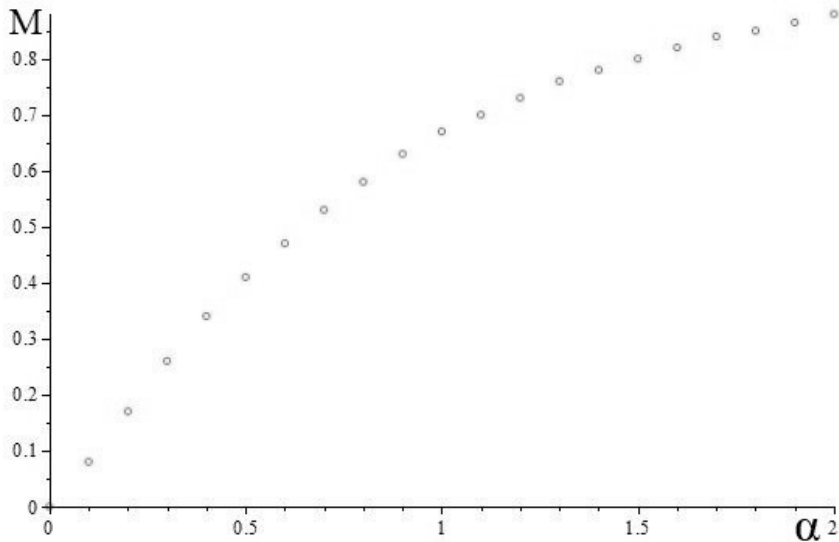


Fig. 2. Magnetisation curve for para-magnets looks typical [8]

The dependence of M on α in a range of $\alpha = 0..2$, shown for the same parameter values $\beta = 1; z = 10$ as in Figure 1. With the increase of α value the curve changes like a linear. The thickening of intersection points is observed.

Ferromagnetic materials

In the case of ferromagnetic state the domain by (5) is above the curve $z(\frac{J}{k_B T})$, whence the solution of the Eq. 2 is not unique. In order to find out the values of joint points of (1) and (2) graphs, we should follow the bends of hysteresis loop curves more accurately, using the alternative variant of graphical solution of the following equivalent equations:

$$\tilde{y}_1 = \arctan h(M), \quad (6)$$

$$\tilde{y}_2 = \frac{\alpha + \beta M - \beta^2 \frac{M}{z} + \beta^2 \frac{M^3}{2z}}{2}. \quad (7)$$

As it is observed in Figure 3 – the resultant loops, built by the means of (6) and (7) system, are rather convex and curved, comparing with (1) and (2) variant. The results of two different cases are presented in Figures 3–5.

Grey curves show the change of α value in 0.25 one by one. The black curve (6), unlike its possible alternative (1), gives the resultant thickening of



intersection points in fracture areas of the function. There are cases of 5 intersections of a single grey curve with the black — this is a critically needed condition to obtain the loop, illustrated at Figure 4.

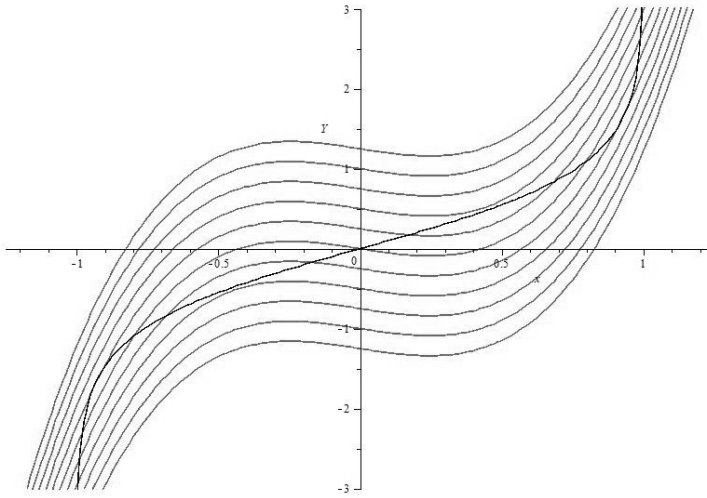


Fig. 3. The intersection points of (6) and (7) are carried out for $\alpha = -0.75..0.75$; $\beta = 10$; $z = 8$

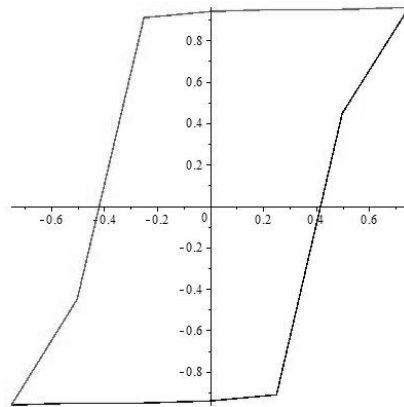


Fig. 4. The hysteresis loop for common ferromagnetic materials. The values for its compilation are obtained from Figure 3. The presence of 5 intersection points (IP) described at Figure 3, gives the expansion of a loop at the approaching area to abscissa axis

The further away from each other are the extreme points from the set of 5 IP (for a single grey tangensoid curve), the wider is the entire loop. The medium IP are not pictured and are not taken into account here. Though, medium IP are all inside the loop area.

The Heisenberg theory do not take into account domain walls presence in explicit form. It uses the Gauss distribution of states per energy level with

parameters expressed in terms of characters of the universal symmetry group, the group of permutations. Few interesting properties however are exhibited in some range of the parameters z and T , see again [10; 11].

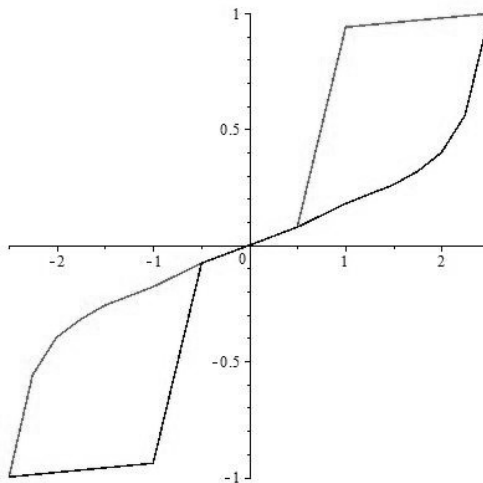


Fig. 5. The double loop with the center symmetry of sub-loops

The represented graph is the Hysteresis loop in case of maximum 3 intersections of (1) with the single curve (2) ($\alpha = -2.50..2.50; \beta = 11; z = 8$). There is no tangible difference if we take either ((6) and (7)) or ((1) and (2)) system for compilation. The vivid peculiarity is in 3 IP at once for a single curve ((2) and (7)) with the auxiliary functions from appropriate for each system of equations. The critical condition of double loop compilation: all three IP must be found in the same quarter area. The curves have a central symmetry for positive and negative α values, so the sub-loop at the third quarter ($-\alpha$) always repeats the sub-loop at the first ($+\alpha$) if α value is the same, having the difference only in its sign.

Towards the Curie law

To add, the Ferromagnetism existence is demonstrated via the set of features, including the Curie law [8]. Its analog is derived at Heisenberg's paper [3] as well. According to it, there exists the critical temperature for switching from paramagnetic into ferromagnetic properties appearance and vice versa, by the boundary of the domain (5). It is marked as θ at original text:

$$\theta = \frac{2J}{k_B(1 - \sqrt{1 - \frac{8}{z}})}. \quad (8)$$

As well, the author emphasizes the similarity of the Curie Law with modification to the Weiss theory. Thus, the critical point is taken from the following conclusion, where M, T, z are mathematically connected.



As a result of following the Heisenberg's algorithm of transformations, we have obtained the resembling formula (9). We use it for graphical analysis and further substitutions of contingent constants, proceeding the imitations of practical situations with real materials.

$$M = \frac{4\alpha T^2}{z(1 - \sqrt{1 - \frac{8}{z}})(T - \theta)(T(1 + \sqrt{1 - \frac{8}{z}}) - \theta(1 - \sqrt{1 - \frac{8}{z}}))}. \quad (9)$$

Iron (Fe) was chosen as the primary sample of the corresponding section of this article out of its lattice structure. The approximation formula got vastly simplified (10) throughout the graphing procedure, because of the number of closest neighbours, which is 8 in our graphical imitation.

$$M = \frac{\alpha T^2}{2(T - \theta)^2}. \quad (10)$$

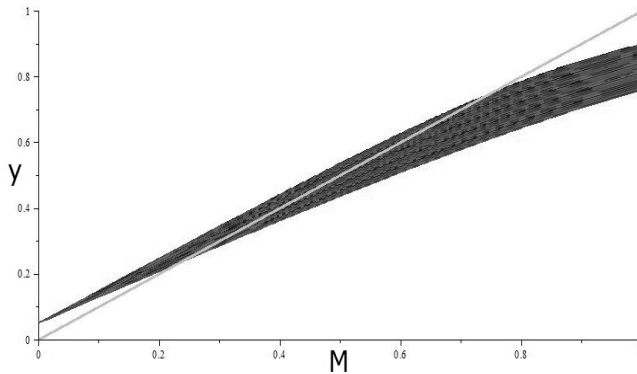


Fig. 6. The IP-printing for building (A) from Figure 7 with the usage of (1) and (2) system of equations. The horizontal axis shows the designation of magnetisation recession ($z = 8; \alpha = 0.1; \theta = 1043[K]; T = 1143..1903[K]$)

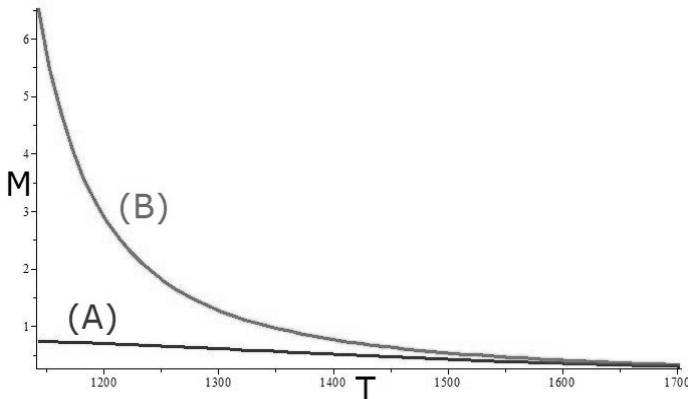


Fig. 7. The dependence of magnetisation on temperature (for Iron), where $T > \theta$.

The comparison of two methods is graphed
 $(z = 8; \alpha = 0.1; \theta = 1043[K]; T = 1143..1703[K])$

(A) – the solutions of the equation system (1) and (2); (B) – the result plotted by (10)



Conclusions

We have built the magnetisation curves for paramagnetic and ferromagnetic ranges for temperatures below and above Curie temperature, appropriate for chosen material. We would note that microscopic Heisenberg model has its continuous analog, named Landau – Lifshits – Gilbert equations. It could be used in making description of domain walls dynamics [12] and hysteresis phenomenon as well [1].

References

1. *Martinez-Garzia J.C., Rivas M, Garcia J.A.* Induced ferro-ferromagnetic exchange bias in nanocrystalline systems // Journal of magnetism and magnetic materials. 2015. Vol. 377. P. 424 – 229.
2. *Weiss P.* Molecular field and ferromagnetic property // Journ. de phys. 1907. Vol. (4) 6. P. 661.
3. *Heisenberg W.* Zur Theorie des Ferromagnetismus // Zs. Phys. 1928. Vol. 49. P. 619 – 636.
4. *Heisenberg W.* Zur Quantentheorie des Ferromagnetismus // Probleme der Modernen Physik, A. Sommerfeld Festschrift. Leipzig, 1928. P. 114 – 122.
5. *Heisenberg W.* Zur Theorie des Magnetpstriktin und der Magnetisierungskurve // Zs. Phys. 1931. Vol. 69. P. 287 – 297.
6. *Heitler W.* Störungsenergie und Austausch beim Mehrkörperproblem // Zs. Phys. 1927. Vol. 46. P. 47.
7. *Lakshmanan M.* The fascinating world of the Landau – Lifshitz – Gilbert equation: an overview // Phil. Trans. R. Soc. A. 2011. Vol. 369. P. 1280 – 1300.
8. *Kittel C.* Introduction to Solid State Physics. Wiley, 2004.
9. *Leble S.* Heisenberg chain equations in terms of Fockian covariance with electric field account and multiferroics in nanoscale // Nanosystems: physics, chemistry, mathematics. 2019. Vol. 10 (1). P. 18 – 30.
10. *Hirsch A.* Double hysteresis loops in ferromagnetic crystals // J. Phys. Radium. 1959. Vol. 20 (2 – 3). P. 262 – 263.
11. *Brandão J., Dugato D.A., Seeger R.L. et al.* Observation of magnetic skyrmions in unpatterned symmetric multilayers at room temperature and zero magnetic field // Sci Rep. 2009. Vol. 9. 4144. doi:10.1038/s41598-019-40705-4.
12. *Leble S.* Waveguide Propagation of Nonlinear Waves. Impact of Inhomogeneity and Accompanying Effects. Springer, 2019.

The authors

Prof. Sergey B. Leble, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.
E-mail: lebleu@mail.ru

Anastasiia Yu. Chychkalo, Master's Student, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.
E-mail: nanacappella23@gmail.com

Об авторах

Сергей Борисович Лебле – д-р физ.-мат. наук, проф., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.
E-mail: lebleu@mail.ru

Анастасия Юрьевна Чичкало – магистрант, Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.
E-mail: nanacappella23@gmail.com

I. S. Vereshchagina, S. D. Vereshchagin

**ON THE PROBLEM OF EVALUATING THE ACCURACY
OF DIAGNOSTICS OF WAVE DISTURBANCES CARRIED OUT USING
THE TECHNIQUE OF PROJECTION OPERATORS**

43

In this note we study the problem of a function reconstruction in a context of a Laplace method application. We use a unitary space of splines with a double dimension of one, that approximate the set of points, representing the results of observation. The conventional scalar product allows to project the approximation onto the subspace of observations. The use of the same scalar product yields the norm that we use to estimate error deviations within the model under consideration. Its minimum defines both a function reconstruction and its error, which also include the measurements errors. The results we apply to the problems of reconstruction of initial or boundary conditions for 1D wave equation, that imply the procedure of directed waves division.

Изучается проблема восстановления функции в контексте применения метода Лапласа. Мы используем унитарное пространство сплайнов с удвоением количества, которое аппроксимирует множество точек, представляющих результаты наблюдения. Обычное скалярное произведение позволяет проецировать приближение на подпространство наблюдений. Использование того же скалярного произведения дает норму, которую мы используем для оценки отклонений ошибок в рассматриваемой модели. Его минимум определяет как восстановление функции, так и ее ошибку, которая также включает ошибки измерений. Полученные результаты применимы к задачам восстановления начальных или граничных условий для одномерного волнового уравнения, предполагающих процедуру разделения направленных волн.

Keywords: atmosphere, diagnostics of disturbances, projection operators, math modeling.

Ключевые слова: атмосфера, диагностика возмущений, операторы проектирования, математическое моделирование.

Introduction

The problem we touch relates to sampling theory and interpolation, with some focus on the Shannon – Niquist – Kotelnikov theorem [1; 2]. We do restrict ourselves by practical aims, having in mind estimations of intermediate ordinates between observed values of a function that represent wave phenomena [3; 4]. The second paper [4] use the Fourier basis and state, that for unambiguous restoration of a continuous signal from its samples need to double the sampling rate maximum frequency in the signal spectrum. The procedure we propose consumes the Laplace – Legendre ideas about minimization of a functional space distance between the continuous function representation by $2n$ -dim-splines and n -dim splines that mimic observa-



tions. The procedure implies a definition of projection the $2n$ -dim space onto the n -dim space that fix intermediate ordinates of the wave function under consideration. The minimization gives simple system of equations, that contain $2n \times n$ matrix A , hence the problem is classical ill-posed one. Its simplest regularization is given by $A^t A$, that determines quasi-solution of the problem [5]. Its minimum also defines both a function reconstruction and its error, which also includes the measurements errors. The results we apply to the problems of reconstruction of initial or boundary conditions for 1D wave equation, that imply the procedure of directed waves division within the dynamic projecting method [6].

Dynamic projection operator method

The main idea of the method of projection operators is to divide the solution space into subspaces of solutions corresponding to various branches of the dispersion relation [7]. To do this, it is necessary to present the original problem in matrix form

$$\psi_t = L\psi$$

with the evolution operator L and a state ψ of a system $\psi = \begin{pmatrix} V \\ p \end{pmatrix}$.

The Fourier transformation $V(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}(k) e^{ikx} dk$ may be written as

the matrix substitution $\tilde{\psi} = F\psi$ and describes transition to k -representation of the evolution operator L :

$$\tilde{\psi}_t = F^{-1} L F \tilde{\psi} = \tilde{L} \tilde{\psi}.$$

The matrix eigenvalue problem $\tilde{L} \tilde{\phi} = \lambda \tilde{\phi}$ introduces subspaces, which we would represent by the matrix of solutions $\tilde{\Psi}$, so that $\tilde{L} \tilde{\Psi} = \tilde{\Psi} \Lambda$, where $\Lambda = \text{diag} \{ \lambda_1, \lambda_2 \}$ – diagonal matrix. If $\lambda_1 \neq \lambda_2$ (eigenvalues) the inverse matrix exists and $\tilde{L} = \tilde{\Psi} \Lambda \tilde{\Psi}^{-1}$.

Spectral decomposition of the matrix L

$$L_{ij} = \psi_{ik} \Lambda_{kl} \psi_{lj}^{-1} = \psi_{ik} \lambda_k \psi_{kj}^{-1} = \sum_k \lambda_k \psi_{ik} \psi_{kj}^{-1} = \sum_k \lambda_k (P_k)_{ij}.$$

The projection operator can be also found using the relations and properties of the projection operators P_i $\psi = \psi_i$, ψ_i – eigenvectors of the evolution matrix \tilde{L} . Properties of the projection operator:

$$P_i * P_j = 0, \quad P_i^2 = P_i, \quad \sum_i P_i = 1.$$



The spectral decomposition of the matrix [6] allows to find the projection operator through the direct product

$$\tilde{P}_i = \psi_i \otimes \psi_i^{-1},$$

ψ_i – i -th column; ψ_i^{-1} – i -th row of inverse Fourier transform of Ψ .

Diagnosics of wave disturbances

One-dimensional adiabatic acoustic wave propagation for the ideal gas can be represented as solution of the system

$$\begin{cases} V_t - c p_x = 0, \\ p_t - c V_x = 0. \end{cases}$$

45

The initial conditions

$$p(x,0) = \varphi_1(x), \quad V(x,0) = \varphi_2(x),$$

define the Cauchy problem.

The evolutionary equation has the form $\psi_t = L\psi$, where

$$\psi = \begin{pmatrix} v \\ p \end{pmatrix}, \quad L = cD \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad D = \frac{\partial}{\partial x}.$$

Projection operators of one-dimensional adiabatic acoustic wave propagation for the ideal gas looks as $P_{\pm} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \pm 1 \\ \pm 1 & 1 \end{pmatrix}$.

The general solution is determined by the relation $(P_+ + P_-)\psi = \psi$.

Acting as a design operator, we select a unidirectional wave

$$P_+ \psi = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_+ \end{pmatrix}, \quad P_- \psi = \begin{pmatrix} \psi_- \\ -\psi_- \end{pmatrix}.$$

For a one-dimensional adiabatic acoustic problem, this allows us to determine the coupling equations and evolution equations for unidirectional waves

$$\psi_+ = \frac{1}{2}(p+v); \quad \psi_- = \frac{1}{2}(p-v);$$

$$(\psi_+)_t + c(\psi_+) = 0,$$

$$(\psi_-)_t - c(\psi_-) = 0.$$

Evaluation the accuracy of diagnostics of wave disturbances

Let we have some set of datapoints $y_i = y(x = x_i)$ defined in the points $x = x_i \in [0, 1], i = 0..n$. They can, for example, be result of application of some projection operators to data in some diagnostic problem, but in fact their origin does not really matter. Its spline representation is constructed as



$$\phi = \sum_{i=1}^n \eta_i \tilde{s}_i(x) \in S^n, \text{ where } \tilde{s}_i(x) = \begin{cases} 1, & x \in \left[\frac{i}{n}, \frac{i+1}{n} \right] \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}.$$

The scalar product in S is defined as

$$(\phi, \phi_1) = \int_0^1 \phi(x) \phi_1(x) dx.$$

Next, we search the solution of the problem in the space S^{2n} via splines

$$\psi = \sum_{i=1}^{2n} \xi_i \tilde{s}_i(x) \in S^{2n},$$

where its projection to the S^n is defined by the relation

$$\xi = \frac{\xi_i + \xi_{i+1}}{2},$$

hence

$$\psi_+ = \sum_{i=1}^{2n} \frac{\xi_i + \xi_{i+1}}{2} \tilde{s}_i(x) \in S^n,$$

whence its components are calculated via the scalar product

$$(\tilde{s}_i, \psi_+) = \psi_{i+}.$$

Let's first apply proposed method to the simplest possible case where we have two points with values A and B separated by the distance h on the OX axis (i.e. their x – coordinates are x_0 and $x_0 + h$).

We will use piecewise-constant approximation for our function. To do it we can introduce new point situated at the midpoint between our initial points with value

$$C = \frac{A+B}{2}.$$

In a case we have some background information about our function method, it can be modified by using another value for C but here we do not have it and half-point should work good enough.

Now we will try to construct another approximation of our function. Simplest is two-point piecewise-constant, where function has one value, let's call it X , for the first half of our interval and the second value, Y , on the second half.

Now we will try to find X and Y in such a way as to minimize a norm

$$E = \int_{x_0}^{x_0 + \frac{h}{3}} (A - X)^2 dx + \int_{x_0 + \frac{h}{3}}^{x_0 + \frac{h}{2}} (C - X)^2 dx + \int_{x_0 + \frac{h}{2}}^{x_0 + \frac{2h}{3}} (C - Y)^2 dx + \int_{x_0 + \frac{2h}{3}}^{x_0 + h} (B - Y)^2 dx.$$



Since they are independent we can separately solve this for X and Y . We'll get

$$X = \frac{5A+B}{6}, \quad Y = \frac{A+5B}{6},$$

then minimal possible value of norm is

$$N_{min} = \frac{(A-B)^2 h}{18}.$$

Now if we have a set of datapoints we can apply this formula at each interval (x_i, x_{i+1}) independently. That means that, assuming all intervals have the same length h , that global error over all datapoints take the form

$$E = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{h}{18} (y_i - y_{i+1})^2 = \frac{h}{18} \sum_{i=0}^{N-1} (y_i - y_{i+1})^2 = \frac{L}{18N} \sum_{i=0}^{N-1} (y_i - y_{i+1})^2, \quad (1)$$

where $L = x_N - x_0$ – distance between first and last points of our set.

If we assume that the modulus of the derivative is always less than some constant Z then when h is small

$$E = \frac{L}{18N} \sum_{i=0}^{N-1} (y_i - y_{i+1})^2 \leq \frac{L}{18N} \sum_{i=0}^{N-1} (Zh)^2 = \frac{L}{18N} (N-1)Z^2 h^2 \approx \frac{L^3}{18N^2} Z^2,$$

so at least this method pass sanity check – error goes down with increase of number of data points.

Let's look how does it work on simplest example – string equation. Equation of string have the form

$$\frac{\partial^2 U(x, t)}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 U(x, t)}{\partial x^2}.$$

We can rewrite this equation as a system of two first order ordinary differential equations over $U(x, t)$ and $V(x, t) = \frac{\partial U(x, t)}{\partial t}$. In this case it is trivial to obtain projection operators (for procedure look for example [6])

$$P_{\pm} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \pm 1 \\ \pm 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

The general solution in this case take form of sum of left-and right-running waves:

$$F = \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_+ \\ F_+ \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} F_- \\ -F_- \end{pmatrix},$$

where F_+ and F_- are arbitrary functions. These projection operators does indeed separate our functions into two waves with different directions. While we act in the space of symbolical functions this result is exact.



Now let us choose for example $F_+ = F_0$ and fix the point of «measurement» $x = x_0$. Then we can generate a series of N datapoints taking values of one of our waves in the points $t = i \cdot h$, where $i = 1..N$ is the number of point, $h = \frac{L}{N}$ is the step between points and L is the length of the time interval we are interested in.

$$F_+[n] = \begin{pmatrix} F_0(kh) \\ F_0(kh) \end{pmatrix}.$$

48

Then we can try to restore continuous function by pulling splines over datapoints and then we can calculate of error of this restoration according to formula (1).

If we choose $F_0 = \exp(-(x - c \cdot t - 5)^2)$ and $x_0 = 5$ then depending on the number of points we take our error is presented on the graphics (Fig. 1) (horizontal axis is the common logarithm of number of points):

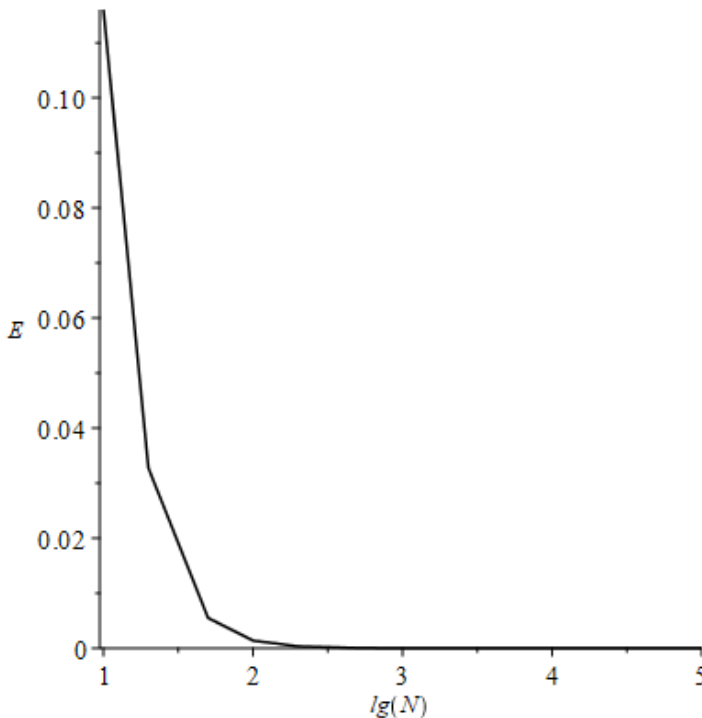


Fig. 1. Error as function of number of points for Gaussian

If our function is not as smooth as Gaussian then error, predictably, is a log bigger. For example if we choose fast oscillating function $F_0 = \exp(-(x - c \cdot t - 5)^2) \cdot \cos(30t)$ we'll get (Fig. 2).

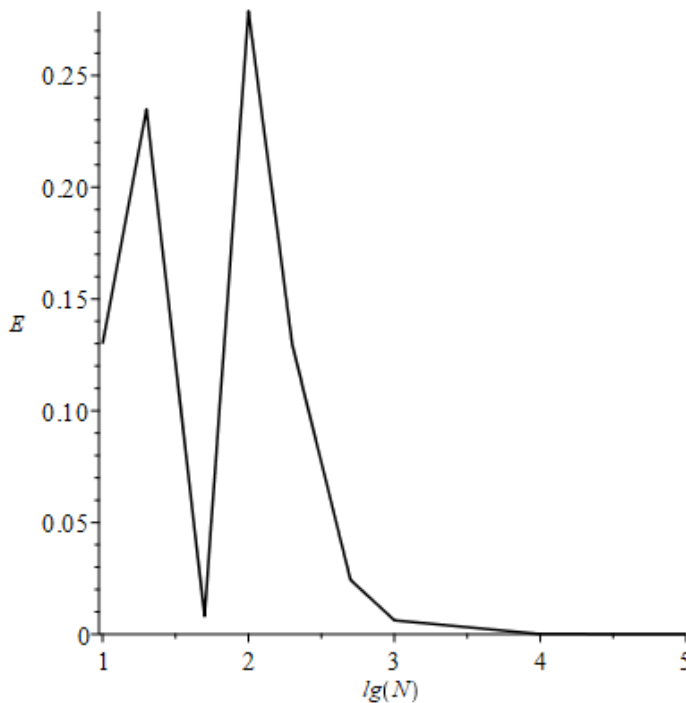


Fig. 2. Error as function of number of points for fast oscillating function

Of course, because of Shannon – Niquist – Kotelnikov theorem we can't really use the part of this graphics which is to the left of $\lg(N) = 2$. As can be seen the error does indeed goes to zero when the number of points grow. If we can choose N , for example when we are deciding on the parameters of the numerical model, this method, following the general idea of the Runge's rule, can be one of deciding factor in choosing model's number of points. If it is applied to the experimental data, where number of points is generally fixed, it can be used to determine an error of reconstruction of continuous function.

Acknowledgment. Authors would like to expresses gratitude to S. Leble for the problem statement and consultations on the content of article and formulation of the results.

Reference

1. Котельников В.А. О пропускной способности «эфира» и проволоки в электросвязи // Успехи физических наук. 2006. №7. С. 762–770.
2. Nyquist H. Certain topics in telegraph transmission theory // Trans. AIEE. 1928. Vol. 47. P. 617–644.
3. Smale S., Zhou D.X. Shannon Sampling and Function Reconstruction from Point Values // Bull of the Amer. Math. Soc. 2014. Vol. 41 (03). P. 279–306.
4. Зуитдинов С.И. Восстановление сигнала по его выборкам на основе теоремы отсчетов Котельникова // Изв. вузов. Приборостроение. 2010. Т. 53, №5. С. 44–47.



5. Ягола А. Г. Некорректные задачи и методы их численного решения. Спец. курс для аспирантов МГУ им. М. В. Ломоносова. М., 2005.

6. Leble S., Perelomova A. The Dynamical Projectors Method: Hydro and Electrodynamics. CRC Press, 2018.

7. Leble S. B. Nonlinear Waves in Waiveguides with Stratification. Springer, 1991.

The authors

Dr Irina S. Vereshchagina, Associate Professor, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: ver_is@mail.ru

Dr Sergey D. Vereshchagin, Associate Professor, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: sergey.ver@gmail.com

Об авторах

Ирина Сергеевна Верещагина — канд. физ.-мат. наук, доц., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: ver_is@mail.ru

Сергей Дмитриевич Верещагин — канд. физ.-мат. наук, доц., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: sergey.ver@gmail.com

A. I. Ivanov, A. A. Shpilevoi, A. A. Kulagina

THE INFLUENCE OF IMPLANTATION ON THE BRIGHTNESS OF NITROGEN-VACANCY CENTERS

We investigate the properties of spin states in the electronic ground state of a single nitrogen-vacancy center (NV⁻) in ¹³C-enriched diamond. The analysis is based on application of a method that uses a complete set of commuting operators (CSCO). Each state is characterized by a single set of values of CSCO. The properties of the spin states change at the level anti-crossing (LAC). This change leads to an increase in the spin-lattice relaxation rate and to a change in the ODMR spectrum. The LAC can occur during implantation and thus influence the observed yield of NV⁻ centers of a certain type. We assume that during cascade transitions between the states of some NV⁻ centers obtained by implantation, an intense ¹³C NMR signal can be observed. It is important to note that optical pumping of such NV⁻ centers can be carried out in an arbitrary magnetic field.

Исследованы свойства спиновых состояний в электронном основном состоянии единого азотно-вакансионного центра (NV⁻) в алмазе, обогащенном ¹³C. Анализ основан на применении метода, который использует полный набор коммутующих операторов (CSCO). Каждое состояние характеризуется одним набором значений CSCO. Свойства спиновых состояний изменяются на уровне пересечения уровня (LAC). Это изменение приводит к увеличению скорости спин-решеточной релаксации и изменению спектра ODMR. LAC может возникать во время имплантации и, таким образом, влиять на наблюдаемый выход NV-центров определенного типа. Мы предполагаем, что при каскадных переходах между состояниями некоторых NV-центров, полученных имплантацией, может наблюдаться интенсивный сигнал ¹³C ЯМР. Важно отметить, что оптическая накачка таких NV-центров может осуществляться в произвольном магнитном поле

Keywords: diamond, implantation, level anti-crossing.

Ключевые слова: алмаз, имплантация, антипереход уровня.

The controlled creation of single centers in solid state systems is an important step in the development of quantum devices. In particular, the negatively charged nitrogen-vacancy (NV⁻) center in diamond has been considered as a suitable candidate for quantum information processing and magnetometry [1; 2]. The NV⁻ center is an atom-like impurity in diamond crystal. The optical transitions of the NV⁻ allow a high degree of spin polarization at room temperature via optical pumping. The electronic spin of the NV⁻ centers is polarized into the ground-state magnetic sublevel $m_s=0$ under optical illumination and measured using optical detection techniques [3].

Typically, NV⁻ centers in diamond are mainly created by N⁺ ion implantation or by nitrogen-doping during CVD growth [4]. Many factors may in-



fluence the probability of obtaining optically observable NV⁻ color centers. Amongst these factors there are proximity to the surface, the implantation and annealing temperature. In this article, we will consider an additional factor: the level anti-crossing (LAC). LAC may arise during implantation and may affect the output of NV⁻ centers. The NV⁻ center has a ground state triplet $|\pm 1\rangle$ and $|0\rangle$. In a magnetic field B along the N-V axis at $B \sim 1024$ G there are a ground state level anti-crossing (GSLAC) between $m_s = -1$ and $m_s = 0$ [5]. However, in the presence of magnetic field the NV⁻ experiences a complex LAC, due to hyperfine interaction of the NV⁻ electron spin with other spins. The properties of the spin states change at the LAC. This change leads to an increase in the spin-lattice relaxation rate and to a change in the ODMR spectrum. The LAC can occur during implantation and, thus, affect the observed output of certain types of NV⁻ centers. We hope that this factor can have a significant impact on the improvement of the observation methods of NV⁻ centers and the expansion of their application.

The basis of the presented approach of NV⁻ LAC investigation is the calculation of NV⁻ energy levels in magnetic field. To find an eigenvalues for a NV⁻ spin Hamiltonian, it is necessary to choose the spin basis functions. Usually, simple products of one-particle spin functions are used as approximations for a many-particle basis functions. To obtain eigenvectors and eigenvalues of the spin Hamiltonian we introduce a method based on a complete set of commuting operators (CSCO). This method is well known in quantum mechanics for a long time, but has never been implemented in spectroscopy up until recently [6–8]. The Hamiltonian in the presented approach is considered either a CSCO operator, or a function of CSCO. Most of eigenvectors are qualified as entangled spin states. In our approach, energy levels can be found by solving a series of equations of a lesser degree than those that need to be solved when the Hamiltonian is diagonalized using numerical methods. It is also possible to obtain analytical expressions for certain energy levels. The properties of spin states are uniquely determined by CSCO and each spin eigenvector is determined by a unique set of CSCO values.

The NV⁻ center in diamond consists of a nitrogen atom, which substitutes for a carbon atom, and a lattice vacancy. Its ground state is triplet state ($S=1$) with an spin quantization axis provided by the NV⁻ center axis of symmetry. We consider a single NV⁻ center with three of ¹³C atoms in the first shell. The spin of ¹³C nucleus is $I=1/2$. The hyperfine coupling of nearest neighbor carbons is around 130 MHz [8]. Hyperfine coupling of the electron spin to ¹⁴N at the NV⁻ center around 3 MHz. The ground-state spin Hamiltonian of NV⁻ center in the presence of magnetic field B reads as (in frequency units):

$$\hat{H} = D \left(\hat{S}_z^2 - \hat{S}^2 / 3 \right) - \gamma_e \hat{S}_z B_z + A_{\perp} (\hat{S}_x \hat{I}_x + \hat{S}_y \hat{I}_y) + A_{\parallel} \hat{S}_z \hat{I}_z - \gamma_n \hat{I}_z B_z, \quad (1)$$

where $\vec{\hat{S}}$ is electron spin operator, $\vec{\hat{I}}_i$ is spin operator of ¹³C nucleus ($i=1, 2, 3$), $\vec{\hat{I}} = \vec{\hat{I}}_1 + \vec{\hat{I}}_2 + \vec{\hat{I}}_3$, $D \approx 2870$ MHz is the fine structure splitting, $A_{\parallel} = -121$ MHz and $A_{\perp} = 166$ MHz are the axial and non-axial magnetic hy-



perfine parameters, z-axis aligns with electronic spin quantization axis, γ_e is the electron gyromagnetic ratio and $\gamma_n = 10.705\text{kHz} / mT$ is the nuclear gyromagnetic ratio of ^{13}C .

To calculate the energy spectrum for the Hamiltonian we first determine the total spin operator:

$$\vec{J} = \vec{S} + \vec{I}.$$

The operators

$$\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{I}_{12}^2, \hat{I}^2, \hat{S}^2, \hat{I}_1^2, \hat{I}_2^2, \hat{I}_3^2$$

form a complete set of commuting operators. Note that the Hamiltonian (1) does not commute with the operator \hat{J}^2 . The operators

$$\hat{H}, \hat{J}_z, \hat{I}_{12}^2, \hat{I}^2, \hat{S}^2, \hat{I}_1^2, \hat{I}_2^2, \hat{I}_3^2$$

also form a complete set of commuting operators (CSCO). The properties of the eigenvectors of this set are uniquely determined by CSCO and every spin eigenvector is determined by the unique value set of CSCO: $|E_n, M_j, I_{12}, I, S, I_1, I_2, I_3\rangle$. Since for all of these states $S=1, I_1 = I_2 = I_3 = 1/2$, then the equation for the eigenvalues and eigenvectors of the Hamiltonian (1) can be written as

$$\hat{H}|E_n, M_j, I_{12}, I\rangle = E_n |E_n, M_j, I_{12}, I\rangle, \tag{2}$$

where the index n is introduced in order to distinguish the states with different values of energy E. Having solved equation (2), we found all energy levels and the corresponding eigenvectors of the NV⁻ center in a magnetic field.

Thus, all the energy levels of the NV⁻ center in a magnetic field were calculated. Radiation transitions between these states are subject to selection rule $\Delta M_j = \pm 1$.

Figure 1 shows a comparison between theoretical (vertical) and experimental [9; 10] NV⁻ ODMR spectra.

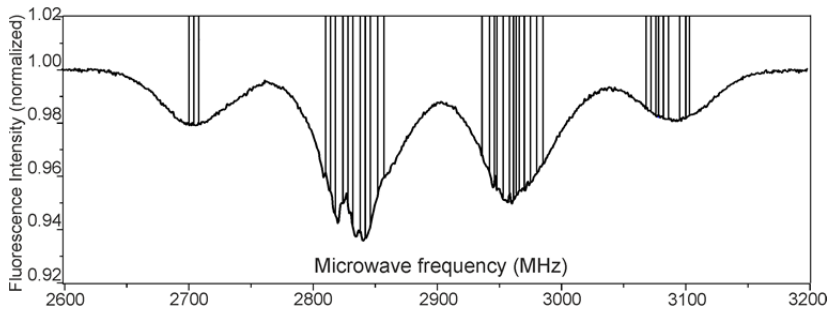


Fig. 1. Theoretical (vertical lines) and experimental [9; 10] NV⁻ ODMR spectra



The ODMR spectrum consists of four irregularly shaped overlapping peaks with a substructure of features observed on the two central peaks. These features are due to the LAC. Indeed, the energy levels are pairwise equal ($E_{11(12)} = E_{13(14)}$, $E_{15(16)} = E_{17(18)}$) and we have the special case of the LAC, which is not removed by magnetic field. Therefore, in the states $|E_{11(12)}, 1/2, 1, 1/2\rangle$, $|E_{13(14)}, 1/2, 0, 1\rangle$, $|E_{15(16)}, -1/2, 1, 1/2\rangle$, $|E_{17(18)}, -1/2, 0, 1\rangle$ the observed I_{12} and I are not a functions of the observed E [11]. This means that if the observed E has the definite value ($E_{11(12)} = E_{13(14)}$, $E_{15(16)} = E_{17(18)}$), then in these states observed I_{12} and I do not have automatically definite values. The uncertainty of the values of I_{12} and I leads to an increase in the relaxation rate of these states. Taking into account intersystem crossing, we can assume that these states do not contribute to photoluminescence, and their microwave excitation will lead to a substructure in the ODMR spectrum.

Let $A_{\perp} = 0$, then the Hamiltonian (1) takes the form

$$\hat{H} = D \left(\hat{S}_z^2 - \hat{S}^2 / 3 \right) - \gamma_e \hat{S}_z B_z + A_{\parallel} \hat{S}_z \hat{I}_z - \gamma_n \hat{I}_z B_z. \quad (3)$$

The operators

$$\hat{I}_z, \hat{S}_z, \hat{I}_{12}^2, \hat{I}^2, \hat{S}^2, \hat{I}_1^2, \hat{I}_2^2, \hat{I}_3^2$$

also form a CSCO and eigenvectors are $|M_1, m_s, I_{12}, I\rangle$. Hamiltonian (3) commute with this set. Moreover, the Hamiltonian (3) is a function of this operator set. The energy levels and the corresponding eigenvectors of the NV- center in a magnetic field are listed in the Supplementary materials. In particular, when $A_{\perp} = 0$, we get

$$E_8 = -2D/3 - 3\gamma_n B_z / 2, \quad E_{10} = -2D/3 + 3\gamma_n B_z / 2, \quad (4)$$

$$E_{12} = E_{14} = E_{21} = -2D/3 - \gamma_n B_z / 2, \quad (5)$$

$$E_{16} = E_{18} = E_{24} = -2D/3 + \gamma_n B_z / 2. \quad (6)$$

When the equalities (4–6) are satisfied, the spin states

$$\begin{aligned} & |E_8, 3/2, 1, 3/2\rangle, |E_{10}, -3/2, 1, 3/2\rangle, \\ & |E_{12}, 1/2, 1, 1/2\rangle, |E_{14}, 1/2, 0, 1/2\rangle, |E_{21}, 1/2, 1, 3/2\rangle, \\ & |E_{16}, -1/2, 1, 1/2\rangle, |E_{18}, -1/2, 0, 1/2\rangle, |E_{24}, -1/2, 1, 3/2\rangle \end{aligned} \quad (7)$$



change and take the following form:

$$\begin{aligned}
 |E_8, 3/2, 1, 3/2\rangle &\rightarrow |3/2, 0, 1, 3/2\rangle = \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 |0\rangle, \\
 |E_{10}, -3/2, 1, 3/2\rangle &\rightarrow |-3/2, 0, 1, 3/2\rangle = \beta_1 \beta_2 \beta_3 |0\rangle, \\
 |E_{12}, 1/2, 1, 1/2\rangle &\rightarrow |1/2, 0, 1, 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(2\alpha_1 \alpha_2 \beta_3 - \alpha_1 \beta_2 \alpha_3 - \beta_1 \alpha_2 \alpha_3) |0\rangle, \\
 |E_{14}, 1/2, 0, 1/2\rangle &\rightarrow |1/2, 0, 0, 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1 \beta_2 - \beta_1 \alpha_2) \alpha_3 |0\rangle, \\
 |E_{21}, 1/2, 1, 3/2\rangle &\rightarrow |1/2, 0, 1, 3/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(\alpha_1 \alpha_2 \beta_3 + \alpha_1 \beta_2 \alpha_3 + \beta_1 \alpha_2 \alpha_3) |0\rangle, \quad (8) \\
 |E_{16}, -1/2, 1, 1/2\rangle &\rightarrow |-1/2, 0, 1, 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(2\beta_1 \beta_2 \alpha_3 - \alpha_1 \beta_2 \beta_3 - \beta_1 \alpha_2 \beta_3) |0\rangle, \\
 |E_{18}, -1/2, 0, 1/2\rangle &\rightarrow |-1/2, 0, 0, 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1 \beta_2 - \beta_1 \alpha_2) \beta_3 |0\rangle, \\
 |E_{24}, -1/2, 1, 3/2\rangle &\rightarrow |-1/2, 0, 1, 3/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(\alpha_1 \beta_2 \beta_3 + \beta_1 \alpha_2 \beta_3 + \beta_1 \beta_2 \alpha_3) |0\rangle,
 \end{aligned}$$

where $|0\rangle$ is eigenvector of operator \hat{S}_z , α_i and β_i are eigenvectors of operator \hat{I}_{iz} with eigenvalues $1/2$ and $-1/2$, respectively. The states (8) are spin-polarized states of ^{13}C nuclei and electron spin. The electron spin in these states is not entangled with nuclear spins. Moreover, since in the states (8) the quantum number m_s is a good quantum number ($m_s = 0$), then under optical pumping these states are effectively populated. It is seen from equalities (5) that LAC takes place for the states $|1/2, 0, 1, 1/2\rangle$, $|1/2, 0, 0, 1/2\rangle$ and $|1/2, 0, 1, 3/2\rangle$. Therefore, in these states, the observed I_{12} and I are not a functions of the observed E [11]. This means that if the observed E has the definite value ($E = -2D/3 - \gamma_n B_z/2$), then in these states observed I_{12} and I do not have automatically definite values. The uncertainty of the values of I_{12} and I leads to an increase in the relaxation rate of these states. Taking into account intersystem crossing, we can assume that these states do not contribute to photoluminescence. A similar conclusion holds for the states $|-1/2, 0, 1, 1/2\rangle$, $|-1/2, 0, 0, 1/2\rangle$ and $|-1/2, 0, 1, 3/2\rangle$ at $E = -2D/3 + \gamma_n B_z/2$.

Thus, for the ODMR spectrum of such an NV center, two peaks are characteristic: one peak is due to transitions to the state $|3/2, 0, 1, 3/2\rangle$ with energy $E_8 = -2D/3 - 3\gamma_n B_z/2$, the other peak is due to transitions to the state $|-3/2, 0, 1, 3/2\rangle$ with energy $E_{10} = -2D/3 + 3\gamma_n B_z/2$. The energy levels (4–6) do not depend on the parameter $A_{||}$ of the hyperfine interaction and, therefore, in a weak magnetic field difference between peaks is small. For example, in the Earth's magnetic field this difference ≤ 1.5 kHz. Thus, the ODMR



spectrum of such an NV⁻ center in a weak magnetic field coincides with the ODMR spectrum of a single NV⁻ center that does not interact with neighboring spins.

We assume that during cascade transitions between states (7) one can observe an intense ¹³C NMR signal. It is important to note that in this NMR experiment, unlike [12; 13], the optical pumping of NV⁻ centers can be carried out in an arbitrary magnetic field.

We note that parameter A_{\perp} represent an isotropic contribution to the energy. This contribution has small value for the implantation, since the ion beam has strong anisotropy. This conclusion is consistent with the results of ref. [4]. Indeed, in [4], a diamond layer of nanometer thickness with ¹³C carbon atoms on two substrates, called samples I and II, was manufactured by chemical vapour deposition (CVD). In sample I the ¹³C layer was additionally doped with nitrogen and sample II was implanted with nitrogen ions, in order to create NV⁻ centers in the vicinity of the ¹³C layer. Three implantation energies were used – 5, 2.5 and 1 keV. ODMR spectra of over 483 NV⁻ centers (sample I) and 584 NV⁻ centers (sample II) at zero magnetic field showed strong coupling of the NV⁻s to ¹³C. The spectra were divided into four groups, distinguished by the number of ¹³C next to the vacancy: NVs (A) lacking a first-shell ¹³C spin, (B) interacting with a single first-shell ¹³C spin, (C) interacting with two first-shell ¹³C spins and (D) interacting with three first-shell ¹³C spins. It were obtained the probability p_A, p_B, p_C, p_D of finding an NV⁻ center of group A, B, C, D (see Table).

Probability of finding the four groups of NV-centers in samples I and II (from ref. [4])

Probability in %	Sample I	Sample II		
		$E_{\text{impl}} = 5 \text{ keV}$	$E_{\text{impl}} = 2.5 \text{ keV}$	$E_{\text{impl}} = 1 \text{ keV}$
p_A	73.4	88.1	84.5	88.5
p_B	13.7	11.9	14.6	11.5
p_C	7.2	0	1.0	0
p_D	5.7	0	0	0

From the results presented in Table I, it can be seen that the probability p_D for sample II is zero. Therefore, it is natural to assume that the NV⁻ centers of group D are not formed in sample II, obtained by implantation. However, based on our results, it can also be assumed that the implantation of nitrogen ions also leads to the formation of NV⁻ centers of group D, but their ODMR spectra coincide with ODMR spectra of group A in a weak magnetic field.

From the results presented in Table I, it can also be seen that the output of type A NV⁻ centers increases with implantation. This is an indirect confirmation of the validity of our assumption. In order to detect the NV⁻ centers of group D obtained by implantation, it is necessary to change the experimental conditions.

We investigated the properties of the spin states in single diamond NV⁻ center in the electronic ground state. The used approach is based on the us-



ing a complete set of commuting operators (CSCO). Each state is characterized by a single set of values of CSCO. The uniqueness of this set of values is sometimes violated. In this case the energy levels are pairwise equal and can be considered a special case of a LAC. The properties of the spin states change at the LAC. This change leads to an increase in the spin-lattice relaxation rate and to a change in the ODMR spectrum. The LAC can occur during implantation and thus influence the observed yield of NV⁻ centers of a certain type. We assume that during cascade transitions between the states of some NV⁻ centers obtained by implantation, an intense ¹³C NMR signal can be observed. It is important to note that optical pumping of such NV⁻ centers can be carried out in an arbitrary magnetic field.

References

1. Neuman P., Kolesov R., Naydenov B. *et al.* Scalable quantum register based on coupled electron spins in a room temperature solid // *Nature Physics*. 2010. Vol. 6. 249.
2. Maertz B.J., Wijnheijmer A.P., Fuchs G.D. *et al.* Vector magnetic field microscopy using nitrogen vacancy centers in diamond. 2009. arXiv:0912.1355v1.
3. Jelezko F., Gaebel T., Popa I. *et al.* Observation of coherent oscillation in a single electron spin // *Physical Review Letters*. 2004. Vol. 92. 076401.
4. Unden T., Tomek N., Weggler T. *et al.* Coherent control of solid state nuclear spin nano-ensembles. 2018. arXiv:1802.02921v1.
5. Auzinsh M., Berzins A., Budker D. *et al.* Hyperfine level structure in nitrogen-vacancy centers near the ground state level anticrossing. 2018. arXiv:1805.01251v1.
6. Ivanov A.A., Ivanov A.I. Side resonances and metastable exited state of NV center in diamond. 2017. arXiv:1701.04097v1.
7. Ivanov A.A., Ivanov A.I. Diamond side resonances: influence of isotopic substitution of carbon // *Task Quarterly*. 2017. Vol. 21. 205.
8. Talatay A.A., Ivanov A.I., Halikov A.T. Level anti-crossing in ¹³C enriched diamond // *IEEE Xplore*. 2018. Vol. 19 F. 3086. doi:10.1109/PIERS-FALL.2017.8293664.
9. Jarmola A., Bodrog Z., Kehayias P. *et al.* Optically detected magnetic resonance of nitrogen-vacancy ensembles in ¹³C enriched diamond. 2016. arXiv:1608.08706v1.
10. Parker A.J., Wang H., Li Y. *et al.* Decoherence-protected transitions of nitrogen vacancy centers in 99% ¹³C-enriched diamond. 2015. arXiv:1506.05484v1.
11. Dirac P.A.M. *The principles of quantum mechanics*. Oxford, 1958.
12. Pagliero D., Rao K.R.K., Zangara P.R.P. Multi-spin-assisted optical pumping of bulk ¹³C nuclear spin polarization in diamond // *Physical Review B*. 2018. Vol. 97. 024422.
13. Wunderlich R., Kohlrautz J., Abel B. *et al.* Room temperature bulk diamond ¹³C hyperpolarization. Strong evidence for a complex four spin coupling. 2017. arXiv:1703.09243v1.

The authors

Prof. Alexey I. Ivanov, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.
E-mail: Aivanov@kantiana.ru

Dr Andrey A. Shpilevoy, Associate Professor, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.
E-mail: AShpilevoi@kantiana.ru



Anastasia A. Kulagina, Assistant Professor, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: Alebedkina@kantiana.ru

Об авторах

Алексей Иванович Иванов — д-р физ.-мат. наук, проф., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: Aivanov@kantiana.ru

Андрей Алексеевич Шпилевой — канд. физ.-мат. наук, доц., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: AShpilevoi@kantiana.ru

Анастасия Алексеевна Кулагина — ст. преп., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: Alebedkina@kantiana.ru

А. В. Юров, А. А. Юрова, В. А. Юров

КОГДА ОЖИДАТЬ НЕОЖИДАННЫХ СИНГУЛЯРНОСТЕЙ: АНТРОПНЫЙ ПРИНЦИП И ТЕМНАЯ ЭНЕРГИЯ ВСЕЛЕННОЙ

59

Антропное объяснение малости наблюдаемой величины темной энергии подразумевает наличие переменной компоненты, компенсирующей величину вакуумной энергии. Согласно Гаррига и Виленкину, эта компонента должна медленно уменьшаться, приводя к смене режима ускоренного расширения на фазу коллапса, но не раньше чем через триллион лет. Однако убывающее скалярное поле может приводить к неожиданным сингулярностям при конечном значении масштабного фактора. Мы анализируем эту ситуацию на примере SFS и получаем неожиданный результат: время появления таких особенностей – того же порядка, что и время жизни наблюдаемой вселенной.

The anthropic explanation of the smallness of the observed amount of dark energy implies the presence of a variable component compensating for the magnitude of the vacuum energy. According to Garriga and Vilenkin, this component should decrease slowly, leading to a change in the accelerated expansion regime to the collapse phase, but not earlier than in a trillion years. However, a decreasing scalar field can lead to unexpected singularities with a finite value of the scale factor. We analyze this situation using the example of SFS and get an unexpected result: the time of appearance of such features of the same order as the lifetime of the observed universe.

Ключевые слова: темная энергия, скалярные поля, сингулярность, антропный принцип.

Keywords: dark energy, scalar fields, singularity, anthropic principle.

Введение

В уже ставшей классической работе [1] предложено антропное решение двух загадок «космологической постоянной»: ее малости и time coincidence. Основная идея заключается в рассмотрении плотности темной энергии ρ_D как случайной переменной. Точнее, плотность записывается в виде суммы двух слагаемых, плотности вакуумной энергии, которая является константой и может быть как положительной, так и отрицательной, и плотности динамической компоненты темной энергии. Если эти компоненты приблизительно одного порядка по модулю и противоположного знака (скажем, вакуумная компонента отвечает AdS вакууму в соответствии с теорией струн), то величина ρ_D может оказаться много меньше модуля каждой из компонент, что с учетом антропного ограничения решает загадку малости темной энергии.

Кроме того, авторам [1] удалось элегантно решить вторую загадку (космических совпадений) и сделать еще ряд тестируемых предсказа-



ний. Среди них находится наиболее сложно тестируемое, но и одновременно самое интересное предсказание: наблюдаемая нами часть вселенной должна в будущем перейти к стадии сжатия (правда, не ранее чем через триллион лет ускоренного расширения). Это экстремально неожиданное заключение сделано следующим образом: предполагается, что динамическая компонента ассоциирована с некоторым скалярным полем φ с очень малой массой [2; 3].

На следующем шаге учитывается, что наблюдатели могут существовать только в очень узком антропном диапазоне возможных значений плотности темной энергии, ограниченной справа квадратом обратного момента времени, при котором сформировались самые первые галактики (этот момент времени определяется произведением текущего возраста вселенной и множителя $(1+z)^{-3/2}$, где величина красного смещения отвечает моменту формирования первого поколения галактик, то есть $z=5$). Во избежание недоразумений отметим, что всюду мы используем удобную систему единиц, при которой $\frac{8\pi G}{3} = c = 1$.

В очень узком диапазоне потенциал самодействия $V(\varphi)$ практически не меняется, так что с хорошей точностью его можно разложить в ряд окрест точки нуль и ограничиться линейным по полю членом. Если поле убывает с течением времени, то можно использовать приближение медленного скатывания и получить оценку момента смены ускорения сжатием, отсчитывая от текущего момента времени. Качественные оценки, проведенные в [1], дают характерный временной масштаб в триллион (10^{12}) лет. Неожиданные следствия, составляющие предмет данной работы, связаны с динамической компонентой темной энергии. Определим новую полевую переменную φ , так что плотность темной энергии определяется новым потенциалом самодействия $\rho_D = V(\varphi)$, и будем считать, что поле φ медленно уменьшается, а потенциал самодействия является полиномиальным с вещественными коэффициентами. Например, он определяется одним членом с положительной константой связи и степенью n , которая необязательно является целой. Разумеется, называть такие потенциалы полиномиальными является некоторым злоупотреблением терминологией, но мы надеемся, что это не вызовет неправильных ассоциаций.

В работе [4] Бэрроу и Грэхэм изучили такие потенциалы и обнаружили следующее замечательное свойство: полиномиальные потенциалы с нецелой степенью могут приводить к появлению сингулярностей за конечное время при стремлении полевой переменной к нулю. В частности, если показатель степени лежит в интервале $M < n < M + 1$ и M натуральное число, то производная

$$\frac{d^{M+2}\varphi}{dt^{M+2}} \rightarrow (-1)^{M+1} \times \infty$$



при $\varphi \rightarrow 0$, а все производные более низких порядков остаются конечными. Скажем, при наименьшем допустимом значении числа $M = 0$ расходится только вторая производная от поля по времени. В этом случае и давление, и плотность остаются конечными, а возникающая особенность относится к четвертому классу по классификации, предложенной в работе [5], и считается «слабой сингулярностью» в соответствии с уже устоявшейся терминологией, восходящей к классическим работам [6; 7].

Появление таких особенностей в реалистичных полевых моделях с полиномиальным потенциалом носит определяющий характер для данной работы. Мы покажем, что предсказание Виленкина — Гаррига о смене режима ускоренного расширения на сжатие оказывается значительно более близким, буквально на два порядка ближе (10^{10} вместо 10^{12}). В этой статье мы рассматриваем простую интегрируемую, но достаточно общую модель, чтобы оценить характерное время наступления такой сингулярности. В следующем разделе мы кратко описываем метод суперпотенциала, чтобы рассмотреть появление особенностей, и обнаруживаем, что нелинейные скалярные поля в плоской фридмановской вселенной способны привести к еще более драматичной особенности, а именно сингулярности класса SFS, за конечное время, если потенциал имеет вид суммы полиномиального потенциала и потенциала, характерного для моделей газа Чаплыгина. Поскольку потенциалы такого типа вполне допустимы, мы заключаем, что возможным следствием гипотезы Виленкина — Гаррига может быть появление в будущем SFS. Используя это наблюдение, в третьем разделе мы строим такую модель в приближении медленно меняющегося скалярного поля и анализируем ее. В результате мы приходим к уже озвученному удивительному заключению: если SFS появится в будущем в приближении медленно убывающего поля, то время ее наступления имеет тот же порядок, что и возраст наблюдаемой вселенной! Другими словами, если она наступит, то это будет весьма скоро (по космологическим масштабам, конечно).

SFS и метод суперпотенциала

Следуя работе [4], рассмотрим плоскую вселенную Фридмана, заполненную минимально связанным скалярным полем, так что параметр Хаббла определяется простым уравнением

$$\frac{\dot{\varphi}^2}{2} + V(\varphi) = H^2,$$

а полевое уравнение с константой связи A^2 имеет вид

$$\ddot{\varphi} = -3H\dot{\varphi} - nA^2\varphi^{n-1}.$$

Предположим, что начальные значения поля, параметра Хаббла и скорости изменения поля положительны. В этом случае в начальный момент времени вторая производная скалярного поля отрицательна, а



значит, $\dot{\phi}$ уменьшается и за конечное время обращается в нуль. После этого начинает убывать само поле ϕ . Если $0 < n < 1$, то за конечное время поле обращается в нуль, а вторая производная — в минус бесконечность. При этом первая производная $\dot{\phi}$ остается все время конечной, так же, как и плотность энергии и давление. Другими словами, расходятся все производные по времени от масштабного фактора начиная с третьей (подробности см. в [4]).

Потенциалы рассматриваемого вида неинтегрируемы, что затрудняет исследование. Чтобы упростить ситуацию, обратимся к модельной задаче, используя метод суперпотенциала [8]. Пусть $W(\phi)$ — суперпотенциал, формально совпадающий с выражением для плотности энергии, но считающийся однозначной функцией полевой переменной. Легко показать (см. общий случай в работе [8]), что динамические уравнения Фридмана сводятся к простому уравнению первого порядка

$$\dot{\phi} = -3^{-1} \frac{dW(\phi)}{d\phi} / \sqrt{W(\phi)},$$

а потенциал определяется из соотношения

$$V(\phi) = W(\phi) - 3^{-2} \left(\frac{dW(\phi)}{d\phi} \right)^2 / W(\phi).$$

Положим $W(\phi) = A^2 \phi^n$. В этом случае уравнения тривиально интегрируются, и, считая, что параметр n лежит в интервале от нуля до четырех, мы находим полевую функцию

$$\phi(t) = \left[(An(4-n)6^{-1}(t_s - t)) \right]^{2/(4-n)}$$

и потенциал

$$V(\phi) = A^2 \phi^n - \frac{A^2 n^2 \phi^{n-2}}{9}.$$

Теперь легко показать, что имеют место три принципиально различных случая: (1) $0 < n < 2$, (2) $2 < n < 3$ и (3) $3 < n < 10/3$. В случае (1) при $t \rightarrow t_s$ расходится первая производная $\dot{\phi} \rightarrow -\infty$; в случае (2) $\ddot{\phi} \rightarrow \infty$, а $\dot{\phi}$ и ϕ остаются конечными. Наконец, в случае (3) расходимость появляется только в третьей производной: $\ddot{\phi} \rightarrow -\infty$. Заметим: поскольку нас не интересуют целые показатели степени у ϕ , мы всюду используем только строгие неравенства. Другими словами, при $n > 2$ могут реализовываться необычные особенности, найденные Бэрроу и Грэхэмом. Однако мы сконцентрируемся на случае (1), который выходит из класса сингулярностей, изученного в [4]. Очевидно, это SFS. Действительно, прямой проверкой можно убедиться, что плотность и давление определяются выражениями (достаточно громоздкими), которые



при $t \rightarrow t_s$ демонстрируют следующее простое поведение: $\rho \rightarrow 0$ и $p \rightarrow \infty$. Соответственно, все энергетические условия выполнены. Не сложно понять, почему этот случай был пропущен в работе [4]. Авторы рассматривали только полиномиальные потенциалы с положительной (хотя и не целой!) степенью. Однако, как легко убедиться, такие потенциалы в принципе не могут привести к особенностям типа SFS. Тем не менее тот факт, что SFS может возникать при убывании скалярного поля, приводит к чрезвычайно интересному вопросу: не может ли подобная ситуация реализоваться в модели Виленкина – Гаррига при медленной эволюции динамической компоненты скалярного поля? В этом случае SFS появилась бы как «плата» за удачную компенсацию вакуумной энергии скалярным полем, компенсацию, которая сделала наблюдаемую вселенную гостеприимной, по крайней мере до возникновения SFS!

Обобщенные SFS

Предположим, что имеет место медленно убывающее скалярное поле, которое приводит (точнее, приведет) к появлению SFS. Мы будем рассматривать более общий класс SFS, таких, что при расхождении давления плотность стремится к некоторому, в общем говоря, ненулевому значению (существование таких решений доказано в [9]). Поскольку, как уже отмечалось, антропное ограничение вырезает чрезвычайно узкий допустимый диапазон в плотности, вся динамика выглядит следующим образом: величина ρ_D является фактически константой вплоть до наступления SFS. Аналогично ведет себя и давление $p_D \approx -\rho_D$, однако при $t \rightarrow t_s$, $p_D \rightarrow \infty$, а величина $\rho_D \neq 0$ и остается конечной. Таковую модель легко построить, если считать, что плотность определяется моделью Λ CDM,

$$\rho = \Lambda + \frac{C_{DM}}{a^3},$$

а выражение для давления содержит дополнительное необычное слагаемое:

$$p = -\Lambda + \alpha \delta \left(\frac{t_s - t}{T} \right).$$

При $\alpha = 0$ это Λ CDM-модель, причем $\rho_D = \Lambda$ и $p_D = p$, поскольку вклад от давления темной материи и барионов (барионы учтены в коэффициенте C_{DM} как малая поправка к вкладу темной материи) отсутствует. Такой выбор выражений для плотности и давления полностью соответствует вышеописанным условиям, так что соответствующие уравнения качественно описывают крайне медленную эволюцию динамической компоненты. Соответственно, мы ожидаем, что качественные оценки, которые мы сейчас будем делать, существенно не изменятся



при рассмотрении более сложных (и реалистичных) ситуаций, если только они соответствуют общей картине Виленкина – Гаррига. Обозначим $a_{\pm}(t)$ решения при $t < t_s$ и $t > t_s$ соответственно. Очевидно, в области до наступления сингулярности масштабный фактор совпадает с хорошо известным решением для Λ CDM-модели, поэтому мы не будем его здесь выписывать. При $t > t_s$ имеем $a_{+}(t) = a_{-}(2t_s - t)$. Дополнительно накладываем условия неразрывности в точке $t = t_s$ для масштабного фактора и его первой производной. Это гарантирует непрерывность плотности энергии на протяжении всей эволюции системы. Отсюда находим величину $T = \sqrt{2/\Lambda}$. Таким образом, при $t = t_s$ плотность остается постоянной, давление расходится (SFS), а параметр Хаббла меняет знак:

$$H_{+}(t_s) = -H_{-}(t_s) = -\frac{2}{3T} \cot \frac{t_s}{T},$$

то есть при $t > t_s$ вселенная сжимается, причем эта смена ускоренного расширения сжатием всецело связана с наличием SFS.

У нас остались неопределенными два параметра: положительная «константа связи SFS» α и время наступления SFS $t = t_s$. Для проведения соответствующей оценки поступим следующим образом. Во-первых, подставим наши выражения в уравнение Фридмана для второй производной от масштабного фактора, затем проинтегрируем его по малому интервалу, центрированному окрест точки t_s , и перейдем к пределу бесконечно малого интервала. В результате получается условие, связывающее два неопределенных параметра, а значит, остался только один свободный параметр. Второе условие, которое мы используем, есть предположение о том, что параметр связи не определяется какой-либо неизвестной физикой. Возможно, это достаточно сильное условие, однако нам оно представляется вполне оправданным. Поскольку в любом случае природа появления α неизвестна, мы вполне можем применять байесовский подход и гипотезу о равномерном распределении. В результате мы находим, что наиболее правдоподобной является следующая оценка в годах:

$$t_s \approx T \cot^{-1} 1.155 \approx 13.6 \times 10^9.$$

Разумеется, это не более чем приближение, но в любом случае правдоподобной выглядит величина того же порядка, что и T . Термин «правдоподобный» означает здесь: если $t_s \gg T$, то это будет означать либо наличие некоторой тонкой настройки, либо наличие некоторой неизвестной пока физики, определяющей величину константы связи SFS. На данном этапе это выглядит малообоснованным, поэтому мы предполагаем, что полученный результат является достаточно общим в антропных моделях Виленкина – Гаррига с очень медленно уменьшающимся скалярным полем, если, конечно, они содержат SFS.



Обсуждение

Поскольку окончательный результат выглядит достаточно неожиданно, мы еще раз кратко опишем ход наших рассуждений. Мы исходили из антропного решения проблемы «космологической постоянной», предложенной в [1]. Согласно этому подходу, наблюдаемая плотность темной энергии состоит из двух компонент — собственно вакуумной энергии и медленно меняющейся динамической компоненты. Например, можно считать, что вакуумная энергия отрицательна, а плотность динамической компоненты положительна, так что происходит практически нулевая плотность темной энергии. В этом случае применимы антропные соображения, позволяющие количественно предсказать эту величину с хорошим согласием с натурными данными. С другой стороны, динамическая компонента должна медленно убывать, поэтому данная модель предсказывает смену фазы ускоренного расширения наблюдаемой вселенной на фазу сжатия, но не раньше чем через 10^{12} лет ускоренного расширения. Если считать, что переменная компонента описывается некоторым скалярным полем, то плотность темной энергии можно задать в виде эффективного потенциала самодействия некоторого очень медленно уменьшающегося скалярного поля. Разумно считать, что этот потенциал имеет вид $V(\varphi) \sim \varphi^n$, но априори нет оснований полагать, что показатель степени эффективного потенциала должен быть целым или даже положительным. В этом случае, как показано в [4], по мере убывания поля могут появиться новые неожиданные особенности при конечном значении масштабного фактора. Более того, мы показали, что такая динамика может привести и к sudden future singularity. Поскольку SFS являются наиболее «жесткими» в рассматриваемом контексте (хотя и наиболее спекулятивными в этом же контексте!), мы сосредоточились в этой работе исключительно на них. Чтобы изучить появление SFS, мы построили предельно простую модель, обладающую всеми необходимыми ингредиентами сценария [1], но содержащую SFS. Учитывая, что модель строилась с минимумом предположений, можно ожидать, что полученные количественные оценки будут в среднем справедливы и для более реалистичных моделей. Удивительным следствием является то, что в время наступления SFS оказалось того же порядка, что и возраст наблюдаемой вселенной (порядка 10 гигаlet). Другими словами, такая SFS должна оказаться неожиданно близко к нам по времени.

В заключение прокомментируем кажущуюся нефизичность этой модели. На первый взгляд, добавление дельта-функции к давлению кажется чисто формальным приемом и является явно нефизичным примером. Однако такое заключение будет весьма поспешно. В работах [10; 11] приводится интересное обсуждение физической природы сингулярностей в рамках ОТО. Традиционный взгляд на эти особенности заключается в том, что появление сингулярностей свидетельствует о нарушении применимости ОТО и требует построения квантовой теории



гравитации. Однако авторы [10] и [11] демонстрируют, что любой способ избежать этих сингулярностей приводит к гораздо более серьезным особенностям, возникающим при вычислении действия. Другими словами, здесь защищается точка зрения, что должен существовать принцип финитности действия и этот принцип отсекает множество известных моделей как нефизичных (например, стационарную модель Эйнштейна, вечную модель Де Ситтера, модели перемешанного мира и т.д.). Мы не будем подробнее обсуждать это вопрос, отметим только, что наша модель с SFS приводит к конечному действию в замкнутой вселенной.

Список литературы

1. *Garriga J., Vilenkin A.* Testable anthropic predictions for dark energy // *Phys. Rev.* 2003. D67. 043503.
2. *Dvali G., Vilenkin A.* Field theory models for variable cosmological constant // *Phys. Rev.* 2001. D64. 063509.
3. *Garriga J., Vilenkin A.* On likely values of the cosmological constant // *Phys. Rev.* 2000. D61. 083502.
4. *Barrow J.D., Graham A.A.H.* New Singularities in Unexpected Places // *Int. J. Mod. Phys.* 2015. D24. 1544012.
5. *Nojiri S., Odintsov S.D., Tsujikawa S.* Properties of singularities in (phantom) dark energy universe // *Phys. Rev.* 2005. D71. 063004.
6. *Tipler F.J.* Singularities in conformally flat spacetimes // *Phys.Lett.* 1977. A64. P. 8–10.
7. *Krolak A.* Towards the proof of the cosmic censorship hypothesis // *Class. Quantum Grav.* 1986. Vol. 3. P. 267.
8. *Yurov A.V., Yurov V.A., Chervon S.V., Sami M.* Total energy potential as a superpotential in integrable cosmological models // *Theoret. and Math. Phys.* 2011. Vol. 166, iss. 2. P. 259–269.
9. *Yurov A.V.* Brane-like singularities with no brane // *Phys. Lett.* 2010. B689. P. 1–7.
10. *Barrow J.D.* Finite Action Principle Revisited // *Phys. Rev.* 2020. D101. 023527.
11. *Barrow J.D., Tipler F.J.* Action principles in nature // *Nature.* 1988. 331. P. 31–34.

Об авторах

Артём Валерианович Юров – д-р физ.-мат. наук, проф., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: AIUrova@kantiana.ru

Алла Александровна Юрова – канд. физ.-мат. наук, доц., Калининградский государственный технический университет; Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: AIUrova@kantiana.ru

Валериан Артёмович Юров – канд. физ.-мат. наук, доц., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: vayt37@gmail.com



The authors

Prof. Artyom V. Yurov, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.
E-mail: AIUrov@kantiana.ru

Dr Alla A. Yurova, Associate Professor, Kaliningrad State Technical University;
Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.
E-mail: AIUrova@kantiana.ru

Dr Valerian A. Yurov, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.
E-mail: vayt37@gmail.com

А. А. Юрова, Р. В. Чириков

К ВОПРОСУ О РАСШИРЕННОЙ ДВУМЕРНОЙ НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЙ СУПЕРСИММЕТРИИ

Описан алгоритм реализации алгебры двумерной суперсимметричной квантовой механики. Подробно описаны случаи $N=2$ и $N=3$. Отдельно рассмотрена процедура итераций преобразований Дарбу. В отличие от одномерного случая, в котором задача полностью решается формулами Крама, итерации двумерных преобразований Дарбу остаются недостаточно понятыми.

An algorithm for realizing the algebra of two-dimensional supersymmetric quantum mechanics is described. The cases $N=2$ and $N=3$ are described in detail. The procedure for iterating Darboux transformations is considered separately. In contrast to the one-dimensional case, in which the problem is completely solved by Krum's formulas, iterations of two-dimensional Darboux transformations remain insufficiently understood.

Ключевые слова: суперсимметрия, преобразование Дарбу, двумерный гамильтониан, расширенная суперсимметрия, итерации.

Keywords: supersymmetry, Darboux transform, 2D-Hamiltonian, extended supersymmetry, iterations.

Введение

Преобразования Дарбу иногда называют преобразованиями суперсимметрии. Это, конечно, некорректно. Правильнее говорить, что преобразования Дарбу позволяют реализовывать алгебру нерелятивистской суперсимметрии. Наиболее разработан одномерный случай, при этом логарифм опорной функции оказывается суперпотенциалом (с отрицательным знаком) и устанавливается точная связь между дискретными спектрами гамильтонианов-суперпартнеров [1; 2]. Чрезвычайно просто оказывается реализовать не только точную, но и нарушенную суперсимметрию (с ненулевым нижним уровнем), а также одномерную расширенную суперсимметрию [3; 4]. Целью данной работы является развитие алгоритма построения расширенной суперсимметрии в двумерном случае, который гораздо богаче по своей структуре (см., например, [5]).

Основные базовые блоки

Рассмотрим три квантовомеханических двумерных гамильтониана, два скалярных и один матричный. Обозначения здесь взяты из работы [1] с заменой заглавных букв на прописные. Два скалярных гамильтониана имеют «квази-факторизованный» вид, по повторяющимся ла-



тинским индексам подразумевается суммирование от 1 до 2. Операторы, обозначенные буквой q с нижним индексом, имеют вид обычных операторов Дарбу:

$$h_0 = q_1^+ q_1, \quad h_1 = q_1 q_1^+ \equiv q_1^{+(1)} q_1^{(1)}, \quad q_i^{(k)} = \varepsilon_{lm} q_m^{+(k-1)},$$

$$h_{lm} = q_l q_m^+ + q_l^{(1)} q_m^{+(1)},$$

то есть

$$h_{lm} = \begin{bmatrix} q_1 q_1^+ + q_2^+ q_2 & [q_1, q_2^+] \\ [q_2, q_1^+] & q_2 q_2^+ + q_1^+ q_1 \end{bmatrix}, \quad [q_1, q_m] = 0.$$

Напомним, операторы Дарбу и дуальные к ним сплетают скалярные гамильтонианы с матричным, но сами скалярные гамильтонианы не связаны друг с другом. Здесь традиционно считается, что значение энергии, отвечающее опорной функции преобразования, равно нулю.

Определим два суперсимметричных гамильтониана

$$H_1 = \begin{bmatrix} h_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_{lm} & h_{lm} & 0 \\ 0 & h_{lm} & h_{lm} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h_1 \end{bmatrix}, \quad H_2 = \begin{bmatrix} h_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_{lm} & h_{lm} & 0 \\ 0 & h_{lm} & h_{lm} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h_2 \end{bmatrix}$$

и четыре матричных вспомогательных оператора (на самом деле шесть, но два, эрмитово сопряженных к первым двум, мы не выписываем в явном виде)

$$\hat{q}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ q_1 & 0 & 0 & 0 \\ q_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q_2 & -q_1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{q}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -q_2^+ & 0 & 0 & 0 \\ q_1^+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -q_1^+ & -q_2^+ & 0 \end{bmatrix},$$

$$A \equiv \begin{bmatrix} 0 & q_2 & -q_1 & 0 \\ -q_1 & 0 & 0 & q_2^+ \\ -q_2 & 0 & 0 & -q_1^+ \\ 0 & -q_1^+ & -q_2^+ & 0 \end{bmatrix}, \quad A^+ \equiv \begin{bmatrix} 0 & -q_1^+ & -q_2^+ & 0 \\ q_2^+ & 0 & 0 & -q_1 \\ -q_1^+ & 0 & 0 & -q_2 \\ 0 & q_2 & -q_1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Несложно убедиться в справедливости следующих перестановочных соотношений (фигурные скобки означают антикоммутатор):

$$\hat{q}_2^+ A + A \hat{q}_1^+ = 0; \quad \left\{ \hat{q}_1^+, \hat{q}_1 \right\} = H_1; \quad \left\{ \hat{q}_2^+, \hat{q}_2 \right\} = H_2,$$

$$A H_1 = H_2 A, \quad H_1 = A^+ A, \quad H_2 = A A^+; \quad \hat{q}_2^+ A + A \hat{q}_1^+ = 0.$$

Введенные операторы послужат нам основными строительными блоками для реализации расширенной двумерной симметрии.

**N = 2. Расширенная суперсимметрия**

Определим набор матричных операторов

$$H_{N=2} = \begin{bmatrix} H_1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{bmatrix}; \quad Q_1 = \begin{bmatrix} \hat{q}_1 & 0 \\ 0 & \hat{q}_2 \end{bmatrix}, \quad Q_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{bmatrix},$$

которые реализуют обычную алгебру суперсимметрии

$$\{Q_i, Q_k^+\} = \delta_{ik} H, \quad [Q_i, H] = 0.$$

70

Для удобства выпишем используемые блоки:

$$H_1 = \begin{bmatrix} H_1 & & & \\ & H_2 & & \\ & & H_2 & \\ & & & H_1 \end{bmatrix}, \quad Q_1 = \begin{bmatrix} \hat{q}_1 & & & \\ & \hat{q}_2 & & \\ & & \hat{q}_2 & \\ & & & \hat{q}_1 \end{bmatrix},$$

$$Q_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A^+ & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} H_1 & \\ & H_2 \end{bmatrix} \equiv B^+ B \Rightarrow B = \begin{bmatrix} A & \\ & A^+ \end{bmatrix}.$$

Следующий шаг очевиден, вводим новые «штрихованные» операторы

$$Q_2 \rightarrow Q_2' = (A \rightarrow B)$$

и определяем новый гамильтониан

$$\begin{bmatrix} B^+ B & \\ & B B^+ \end{bmatrix} \equiv C^+ C \Rightarrow C = \begin{bmatrix} B & \\ & B^+ \end{bmatrix}.$$

В результате получаем новый набор операторов с удвоенной матричной размерностью. Приведем по очереди только супергамильтониан и два супергенератора:

$$\begin{bmatrix} H_1 & & & & & & & \\ & H_2 & & & & & & \\ & & H_2 & & & & & \\ & & & H_1 & & & & \\ & & & & H_2 & & & \\ & & & & & H_1 & & \\ & & & & & & H_1 & \\ & & & & & & & H_2 \end{bmatrix},$$



$$\begin{bmatrix} \hat{q}_1 & & & & & & \\ & \hat{q}_2 & & & & & \\ & & \hat{q}_2 & & & & \\ & & & \hat{q}_1 & & & \\ & & & & \hat{q}_2 & & \\ & & & & & \hat{q}_1 & \\ & & & & & & \hat{q}_1 \\ & & & & & & & \hat{q}_2 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} A & & & & & & \\ & A^+ & & & & & \\ & & A^+ & & & & \\ & & & A^+ & & & \\ & & & & A & & \end{bmatrix}.$$

Размерность матриц тут 32 на 32, а незаполненные клетки содержат нули.

$$\begin{bmatrix} A_N^+ A_N & \\ & A_N A_N^+ \end{bmatrix} \equiv A_{N+1}^+ A_{N+1},$$

$$A_{N+1} = \text{diag}(A_N, A_N^+),$$

$$H^{(3)} = \text{diag}(H_1, H_2, H_2, H_1); \quad Q_1^{(3)} = \text{diag}(\hat{q}_1, \hat{q}_2, \hat{q}_2, \hat{q}_1);$$

$$Q_2^{(3)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A^+ & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad Q_3^{(3)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -A^+ & 0 \end{bmatrix},$$

$$N=3, \dim H = 2^4 = 2^{3+1},$$

$$\{Q_i, Q_k^+\} = \delta_{ik} H, [Q_i, H] = 0,$$

$$N=4,$$

$$H^{(4)} = \text{diag}(H_1, H_2, H_2, H_1, H_2, H_1, H_1, H_2);$$

$$Q_1^{(4)} = \text{diag}(\hat{q}_1, \hat{q}_2, \hat{q}_2, \hat{q}_1; \hat{q}_2, \hat{q}_1, \hat{q}_1, \hat{q}_2);$$



$$Q_2^{(4)} = \begin{bmatrix} A & & & \\ & A^+ & & \\ & & A^+ & \\ & & & A \end{bmatrix},$$

$$Q_2^{(4)} = \begin{bmatrix} A & & & \\ & A^+ & & \\ & & & -A^+ \\ & & & & -A \end{bmatrix},$$

$$Q_4^{(4)} = \begin{bmatrix} A & & & & \\ & -A^+ & & & \\ & & & & \\ & & & -A^+ & \\ & & & & A \end{bmatrix}, \quad \dim H = 32 = 2^5 = 2^{4+1},$$

то есть $d = 2^{N+1}$.

Итерации

В одномерном случае вопрос об итерациях преобразований Дарбу полностью решается формулами Крама. В двумерном случае ситуация оказывается намного сложнее и до сих пор далека от окончательного решения. В этом разделе мы представим некоторые наши предварительные результаты. Прежде всего введем ненулевую энергию для опорной функции:

$$h_0 = q_m^+ q_m + E_0, \quad p_m = \varepsilon_{mk} q_k^+, \quad p_1 = q_2^+, \quad p_2 = q_1^+,$$

$$h_1 = q_m q_m^+ + E_0 = p_m^+ p_m + E_0,$$

$$h_{lm}^{(1)} = q_l q_m^+ - \varepsilon_{km} p_l q_k + E_0 \delta_{lm} = p_l p_m^+ + \varepsilon_{km} q_l p_k + E_0 \delta_{lm}.$$



Все основные соотношения остаются теми же:

$$h_{lm}^{(1)} = \begin{bmatrix} q_1 q_1^+ + q_2^+ q_2 + E_0 & [q_1, q_2^+] \\ [q_2, q_1^+] & q_1^+ q_1 + q_2 q_2^+ + E_0 \end{bmatrix},$$

$$q_l h_0 = h_{lm}^{(1)} q_m, \quad p_l h_1 = h_{lm}^{(1)} p_m,$$

$$q_m^+ h_{ml}^{(1)} = h_0 q_l^+, \quad p_m^+ h_{ml}^{(1)} = h_1 p_l^+.$$

Несложно убедиться, что

$$h_0 \Psi^{(0)} = E^{(0)} \Psi^{(0)}, \quad h_0 \varphi = E_0 \varphi, \quad h_1 \Psi^{(1)} = E^{(1)} \Psi^{(1)},$$

$$\varphi_l = q_l \Psi^{(0)}, \quad \Phi_l = p_l \Psi^{(1)}, \quad h_{lm}^{(1)} \varphi_m = E^{(0)} \varphi_l, \quad h_{lm}^{(1)} \Phi_m = E^{(1)} \Phi_l.$$

Причем выполняются соотношения нормировки

$$(\varphi_l, \varphi_l) = E^{(0)} - E_0, \quad (\Phi_l, \Phi_l) = E^{(1)} - E_0$$

и

$$q_l^+ \varphi_l = (E^{(0)} - E_0) \Psi^{(0)}, \quad p_l^+ \Phi_l = (E^{(1)} - E_0) \Psi^{(1)},$$

$$q_l^+ \Phi_l = p_l^+ \varphi_l = 0.$$

Если положить

$$E_0 = E^{(1)} = E^{(0)} \Rightarrow q_m^+ q_m \Psi^{(0)} = q_m^+ q_m \varphi = q_m q_m^+ \Psi^{(1)} = 0,$$

а значит,

$$\Psi^{(1)} = \frac{1}{\varphi} \int dx^m \varepsilon_{km} \varphi q_k \Psi^{(0)}, \quad \tilde{\varphi}_l = q_l \Psi^{(0)}, \quad \tilde{\Phi}_l = p_l \Psi^{(1)},$$

$$q_l^+ \tilde{\varphi}_l = p_l^+ \tilde{\Phi}_l = 0, \quad \tilde{\Phi}_l = -\tilde{\varphi}_l.$$

Удобно формально ввести векторное поле, которое оказывается чисто вихревым:

$$A_l \equiv \varphi \Psi_l \Rightarrow \text{div } \vec{A} = 0, \quad \text{rot } \vec{A} = \frac{2}{\varphi} \left[\vec{\nabla} \varphi, \vec{A} \right].$$

Для следующей итерации определим

$$h^{(1)} \equiv Q_L^+ Q_L + \tilde{E}_0 I, \quad h_{lm}^{(1)} \equiv Q_{L,lk}^+ Q_{L,km} + \tilde{E}_0 \delta_{lm},$$

$$h^{(1)} \equiv Q_L Q_L^+ + \tilde{E}_0 I = P_L^+ P_L + \tilde{E}_0 I, \quad P_L = \varepsilon_{LM} Q_M^+, \quad L, M=1,2,$$

$$H_{LM} = Q_L Q_M^+ - \varepsilon_{KM} P_L Q_K + \tilde{E}_0 \delta_{LM},$$



$$\left[\begin{array}{cccc}
 0 & q_1^{(1)+} & q_2^{(1)+} & 0 \\
 q_1^{(2)} & 0 & 0 & q_1^{(1)} \\
 q_2^{(2)} & 0 & 0 & q_2^{(1)} \\
 0 & q_2^{(1)} & -q_1^{(1)} & 0
 \end{array} \right],$$

$$\left[\begin{array}{cccc}
 0 & q_1^{(2)+} & q_2^{(2)+} & 0 \\
 q_1^{(3)} & 0 & 0 & q_1^{(2)} \\
 q_2^{(3)} & 0 & 0 & q_2^{(2)} \\
 0 & q_2^{(2)} & -q_1^{(2)} & 0
 \end{array} \right]$$

$$\left[\begin{array}{cccc}
 0 & & & \\
 q_1^{(0)} & & & \\
 q_2^{(0)} & & & \\
 0 & q_2^{(0)} & -q_1^{(0)} & 0 \\
 & & 0 & \\
 & & q_1^{(1)} & \\
 & & q_2^{(1)} & \\
 & & 0 & q_2^{(1)} & -q_1^{(1)} & 0
 \end{array} \right],$$

$$\left[\begin{array}{cccc}
 0 & q_1^{(2)+} & q_2^{(2)+} & 0 \\
 q_1^{(3)} & 0 & 0 & q_1^{(2)} \\
 q_2^{(3)} & 0 & 0 & q_2^{(2)} \\
 0 & q_2^{(2)} & -q_1^{(2)} & 0
 \end{array} \right]$$



$$\left[\begin{array}{cccc} 0 & q_1^{(1)} & q_2^{(1)} & \\ q_1^{(2)} & 0 & 0 & q_1^{(1)} \\ q_2^{(2)} & 0 & 0 & q_2^{(1)} \\ 0 & q_2^{(1)} & -q_1^{(1)} & 0 \end{array} \right] \cdot \left[\begin{array}{cccc} 0 & & & \\ q_1^{(1)} & & & \\ q_2^{(1)} & & & \\ 0 & q_2^{(1)} & -q_1^{(1)} & 0 \end{array} \right] \cdot \left[\begin{array}{cccc} 0 & & & \\ q_1^{(2)} & & & \\ q_2^{(2)} & & & \\ 0 & q_2^{(2)} & -q_1^{(2)} & 0 \end{array} \right]$$

Общая структура связей изображена на рисунке.

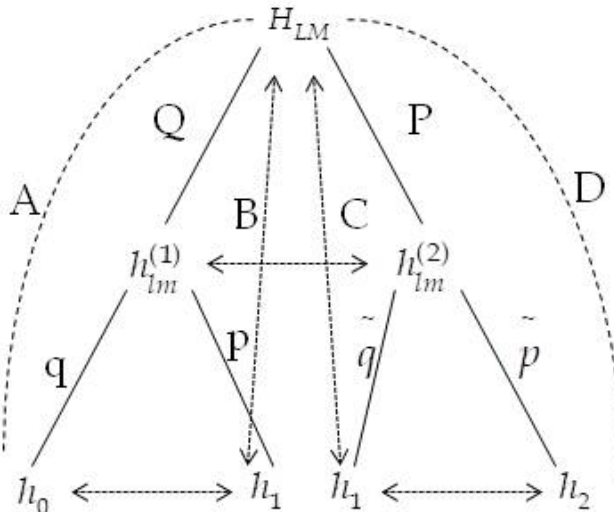


Рис. Общая структура связей

Разумеется, это только часть полной итерационной схемы. Более полная диаграмма будет представлена в отдельной работе.



Заключение

Перечислим несколько открытых вопросов, ответы на которые хотелось бы получить. Во-первых, нельзя ли модернизировать описанную схему построения алгебры расширенной суперсимметрии, чтобы включить в нее центральный заряд? Во-вторых, такие модели могут приводить к вырожденному нулевому уровню. Необычность ситуации в том, что суперсимметрия при этом точна. Вероятно, здесь есть связь с состояниями BPLS, но это только гипотеза. Наконец, чрезвычайно интересен вопрос об итерациях. В первой работе на эту тему задача сводилась к поиску некоторой матрицы, приводящей к чисто нулевым связностям, но с существенным ограничением — она должна быть эрмитова. Если ослабить это условие, то возникает занятная мысль использовать в качестве поставщика итерлируемых схем представления нулевой кривизны для интегрируемых иерархий типа НУШ! Удастся ли на этом пути получить что-то содержательное, покажут будущие исследования, однако, учитывая широкую распространенность уравнений, допускающих этот вид симметрий [6–11], легко понять, что такие результаты могут оказаться исключительно важны и интересны.

Список литературы

1. Андрианов А.А., Борисов Н.В., Иоффе М.В. Метод факторизации и преобразование Дарбу для многомерных гамильтонианов // ТМФ. 1984. Т. 61, №2. С. 183–198.
2. Андрианов А.А., Борисов Н.В., Иоффе М.В., Эйдес М.И. Суперсимметричная механика: новый взгляд на эквивалентность квантовых систем // ТМФ. 1984. Т. 61, №1. С. 17–28.
3. Андрианов А.А., Соколов А.В. Расширенная суперсимметрия и скрытые симметрии в одномерной матричной квантовой механике // ТМФ. 2016. Т. 186, №1. С. 5–26.
4. Березовой В.П., Паишев А.И. Суперсимметричная квантовая механика и перестройка спектров гамильтонианов // ТМФ. 1987. Т. 70, №1. С. 146–153.
5. Иоффе М.В., Канната Ф., Нишнанидзе Д.Н. Точно решаемая двумерная комплексная модель с вещественным спектром // ТМФ. 2006. Т. 148, №1. С. 102–111.
6. Yurov A. V., Yurov V. A. A look at the generalized Darboux transformations for the quasinormal spectra in Schwarzschild black hole perturbation theory: Just how general should it be? // Physics Letters A. 2019. Vol. 383, iss. 22. P. 2571–2578.
7. Matveev V. B., Salle M. A. Darboux transformations and solitons. Berlin ; Heidelberg, 1991.
8. Yurov A. V., Yurov V. A. The Landau-Lifshitz Equation, the NLS, and the Magnetic Rogue Wave as a By-Product of Two Colliding Regular «Positons» // Symmetry. 2018. Vol. 10. P. 82. arXiv:1701.04903.
9. Levi D. Nonlinear differential difference equations as Bäcklund transformations // J. Phys. A: Math. Gen. 1981. Vol. 14. P. 1083–1098.
10. Шабат А.Б. Третий вариант метода одевания // ТМФ. 1999. Т. 121, №1. С. 165–176.
11. Leble S. B., Ustinov N. V. Deep reductions for matrix Lax system, invariant forms and elementary Darboux transforms // J. Phys. A: Math. Gen. 1993. Vol. 26. P. 5007–5016.



Об авторах

Алла Александровна Юрова — канд. физ.-мат. наук, доц., Балтийский федеральный университет им. И. Канта; Калининградский государственный технический университет, Россия.

E-mail: AIUrova@kantiana.ru

Роман Викторович Чириков — асп., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: RChirikov1@kantiana.ru

The authors

Dr Alla A. Yurova, Associate Professor, Immanuel Kant Baltic Federal University; Kaliningrad State Tehnical University, Russia.

E-mail: AIUrova@kantiana.ru

Roman V. Chirikov, PhD Student, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: RChirikov1@kantiana.ru

V. A. Yurov, A. V. Yurov, R. B. Morgunov

A SURPRISING TALE OF LONG-PERIODIC SPIN OSCILLATIONS
IN THE SYNTHETIC ANTIFERROMAGNETS:
SOME EXACT SOLUTIONS

This article is devoted to construction of a mathematical theory capable of explaining those experimentally observable periodic magnetic oscillations in the synthetic antiferromagnet Pt/Co/Ir/Co/Pt that take place after a switch in the direction of an external magnetic field. In particular, we demonstrate that in order to understand the aforementioned phenomenon it is essential to first properly model the collisions between the magnetic domains of different spin orientations (P^- and AP^-). The resulting model comprised of a system of nonlinear differential equations is closely examined, after which we propose a simple analytical method of construction of its exact solutions. This method is shown to generate an infinite family of solutions associated with the degenerate hypergeometric functions, parameterized by a natural number N . One of those solutions with $N=2$ produces the magnetization function which perfectly fits the experimental data.

79

Данная работа посвящена построению математической теории, корректно объясняющей экспериментально наблюдаемые периодические осцилляции намагниченности в синтетическом антиферромагнетике Pt/Co/Ir/Co/Pt при изменении направления внешнего магнитного поля. Показано, что существенную роль в модели играют столкновения друг с другом магнитных доменов различной спиновой ориентированности (P^- и AP^-). Обсуждены особенности полученной системы нелинейных дифференциальных уравнений и предложен простой аналитический метод построения бесконечного множества решений этой системы, выраженных через специальным образом выбранные вырожденные гипергеометрические функции, параметризованные целым числом N . Показано, что решение с $N=2$ в точности совпадает с экспериментальной кривой намагниченности.

Keywords: synthetic antiferromagnets, domain walls, Schrödinger equation, degenerate hypergeometric equation.

Ключевые слова: синтетические антиферромагнетики, доменные стенки, уравнение Шрёдингера, вырожденное гипергеометрическое уравнение.

Introduction

Ever since the pioneering work on the potential coupling between the adjacent layers of different magnetic materials, published in 1986 (see [1–4]), the subject of multilayered ferro-, ferri, and anti-ferromagnetics has never left the limelight. The realization of the fact that a subtle change in a thicknesses of a non-magnetic material — the «spacer» between two (or more) layers of

ferromagnets – can totally change the character of the interaction between those layers and switch it between non-existent (a very thick spacer) to ferromagnetic to antiferromagnetic came as a storm. Out of this storm a number of very interesting devices has emerged, including the spin valves and the synthetic antiferromagnets (SAF). The range of current and prospective applications of such devices is staggering; it ranges from the magnetic random access memory [5; 6] to the sensors for various biomedical applications [7; 8].

Despite the fact that a general mechanism at work in the SAF – the Ruderman – Kittel – Kasuya – Yosida (RKKY) coupling between the magnetic domains in different layers has been known since the end of 1950-s (see [9; 11]), the particulars of the behavior of magnetization in SAF are still capable of puzzling the scientists. One such enigma has been described in [12]: a very unusual non-monotonous relaxation pattern in a Pt/Co/Ir/Co/Pt multilayered SAF after the switching of the direction of the external magnetic field. This was rather unexpected as the equations normally used to describe the dynamics of the magnetic domains in SAF were all linear and did not predict the dynamics observed in [12].

A year later the answer has been found [13]: the culprit was shown to be the collisions between the different magnetic domain in the magnetic layers. This article serves as a mathematical supplement to [13] and is designed to provide a detailed mathematical exploration of the subject whereas [13] is dedicated mostly to the experimental and physical side of the research.

The statement of the problem

Our goal for this article would be to study the behavior of the coupled magnetic domains in the SAF with a perpendicular anisotropy after the switching of the external magnetic field. For certainty we will assume that the thicker of the two magnetic layers – the “anchor” – is the lowest of the two. A total of four types of magnetic domains are possible: two parallel states (P^+ with spins in both magnetic layers looking up and P^- where the spins point downwards) and two antiparallel (AP^+ and AP^- – the sign determined by the spin orientation in the anchor) – see Fig. 1.

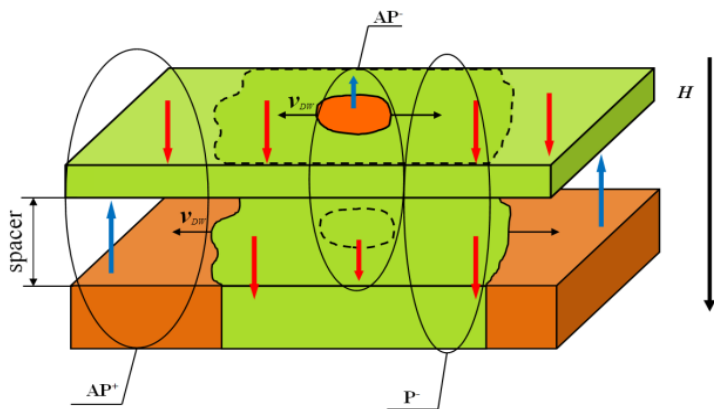


Fig. 1. The scheme of the SAF and the main types of the magnetic domains therein



Initially the SAF in its entirety consists of just one magnetic domain – the AP^+ type (for that end we switch on the external magnetic field and wait until the magnetization of SAF stabilizes). However, if we should turn on the external magnetic field again, but this time of opposite direction, the new types of domains will start emerging: the nuclei of the P^- and the AP^- phases. But, of course our sample being SAF, only one type – the AP^- will survive in the end.

With that being said, let us look at the simplest model of the dynamics of those three types of domains.

Let z be a concentration density of AP^+ nuclei;

x – a density of P^- nuclei;

y – a density of the AP^- nuclei;

$\alpha(H, T)$ – an efficiency of the P^- nuclei generation from the AP^+ phase;

$\beta(H, T)$ – an efficiency of AP^- nuclei generation from the P^- phase;

$\gamma(H, T)$ – an efficiency of the AP^- nuclei generation from the AP^+ phase.

Naturally, since the P^- phase is only transitory, and the total concentration is limited by the size of the sample, we conclude that the rate of growth of AP^- must be proportional to both z (the more AP^+ nuclei means more chance for an AP^- to emerge) and the x (every P^- nuclei has a chance to morph into AP^- nuclei). For the same reason the growth of x shall also be proportional to z but be stifled by the big x (the more of them we have the more will convert to AP^- phase). Finally, the finite size of the sample determines that the sum of all three types of nuclei must be a constant – in our case 1 (since we are working with the concentrations).

This produces the following simple linear system:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \alpha z - \beta x \\ \frac{dy}{dt} = \gamma z + \beta x \\ x + y + z = 1 \end{cases} \quad (1)$$

with the initial conditions corresponding to the starting P^+ state at $t=0$ are $z=1, x=0, y=0$. Once we solve this system, calculating the total magnetization of SAF will be an easy task:

$$M(t) = M_{s1}(-x - 0.3y + z),$$

where M_{s1} would be the saturating magnetization of the thick layer.

So, how do we solve (1)? First of all, if we sum up the first two equation in (1) we will end up with

$$\dot{z} = -(\alpha + \gamma)z,$$

whose general solution is

$$z = z_0 e^{-(\alpha + \gamma)t}.$$



Plugging this into the first equation in (1) produces the following equation on x :

$$\dot{x} = \alpha z_0 e^{-(\alpha+\gamma)t} - \beta x,$$

which is an inhomogeneous linear differential equation. Its general solution is:

$$x = \left(x_0 - \frac{\alpha z_0}{\beta - \alpha - \gamma} \right) e^{-\beta t} + \frac{\alpha z_0}{\beta - \alpha - \gamma} e^{-(\alpha+\gamma)t}.$$

This we can of course use in the equation on y . Solving it and using the condition $y_0 = 1 - x_0 - z_0$ yields the following solution

$$y = 1 - \frac{z_0}{\alpha + \gamma} \left(\gamma + \frac{\alpha\beta}{\beta - \alpha - \gamma} \right) e^{-(\alpha+\gamma)t} - \left(x_0 - \frac{\alpha z_0}{\beta - \alpha - \gamma} \right) e^{-\beta t}.$$

The resulting magnetization M together with the experimental results are shown on Figure 2.

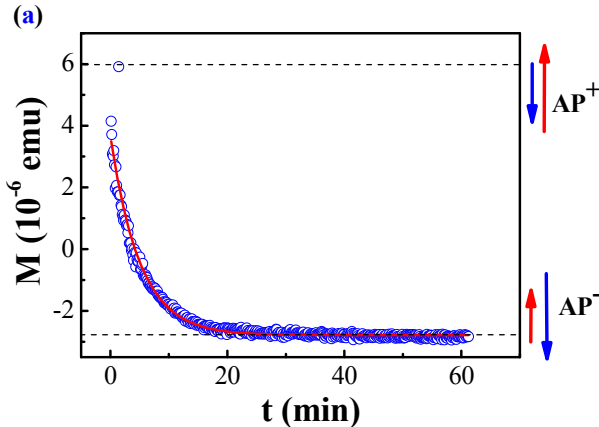


Fig. 2. Magnetic relaxation in Pt(3 nm)/Co(1.05 nm)/Ir(1.5 nm)/Co(0.7 nm)/Pt(3 nm) in the magnetic field -1350 Oe at $T=100$ K. Here $M(t) = M_{S1}(-x - 0.3y + z)$, where M_{S1} is the saturating magnetization of the thick layer. The solid line is the exact solution of (1), the blue circles – the results of the observations (for further details see [13])

Everything looks good if not for one little thing: while the behaviour of the solution is monotonous (owing to the linearity of the system (1)), at some values of the external magnetic field the magnetization's dynamic is *no longer monotonous*.

This can only mean one thing: at those values the model must be incorrect!

The model with the domain interaction

Let's take into account the fact that in the process of their growth the P- and AP- domains inevitably bump into each other. In the process the $P^- \rightarrow AP^-$ transition takes place: a P- phase absorption by AP- phase.



To account for this absorption, we have to add two additional terms, proportional to the probability δxy of the nuclei approaching each other:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \alpha z - \beta x - \delta xy \\ \frac{dy}{dt} = \gamma z + \beta x + \delta xy' \\ x + y + z = 1 \end{cases} \quad (2)$$

where the coefficient δ describes the efficiency of the P- phase absorption by AP- phase.

The initial conditions at $t=0$ remain the same: $z=1, x=0, y=0$.

A close look at our system is in order...

If we sum up first and second equations in (2), we'll get:

$$\dot{z} = -(\alpha + \gamma)z,$$

whose general solution is

$$z = z_0 e^{-\rho t} \quad (3)$$

and $\rho = \alpha + \gamma$. According to (2), this yields the system:

$$y = 1 - x - z_0 e^{-\rho t}, \quad (4)$$

$$\dot{x} = \alpha z_0 e^{-\rho t} + \left[\delta z_0 e^{-\rho t} - \beta - \delta + \delta x \right] x. \quad (5)$$

The equation (5) should look familiar to anyone proficient in the theory of O.D.E.'s: it is the famous *Riccati equation* [14]. One of its interesting properties is that this equation is homogenous with respect to the variables \dot{x} and x (but not t), which implies that (5) can be linearized by the following change of variable:

$$x(t) = -\frac{1}{\delta} \frac{d}{dt} \ln f(t), \quad (6)$$

which converts the Riccati equation into an even more famous *Schrödinger equation*. And if we move one step further and additionally rescale $f(t)$ as:

$$f(t) = \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\sigma t + \frac{\delta z_0}{\rho} e^{-\rho t} \right) \right] V(t), \quad \sigma = \beta + \delta,$$

then we'll end up with the Schrödinger equation that looks like this:

$$\frac{\ddot{V}}{V} = \frac{\delta^2}{4} e^{-2\rho t} + \frac{\delta}{2} [\rho - \sigma - 2\alpha] e^{-\rho t} + \frac{1}{4} \sigma^2. \quad (7)$$

Hence, the entire problem reduces to finding a regular solution of (7) which does not vanish for any given $t > 0$ (so that the r.h.s of (7) remains well-defined), and then using it to find x :

$$x(t) = \frac{\sigma}{2\delta} - \frac{z_0}{2} e^{-\rho t} - \frac{1}{\delta} \frac{\dot{V}(t)}{V(t)}. \quad (8)$$



Prior to that, however, it would be handy to replace the time variable t with a new independent variable $\xi = e^{-\rho t}$. After that, the Schrödinger equation assumes a much simpler form:

$$V'' + \frac{1}{\xi} V' - \left[a^2 + \frac{ab}{\xi} + \frac{c^2}{\xi^2} \right] V = 0, \quad (9)$$

where for the sake of simplicity we have introduced three new coefficients:

$$a = \frac{\delta}{2\rho}, \quad b = 1 - \frac{\sigma + 2\alpha}{\rho}, \quad c = \frac{\sigma}{2\rho}.$$

84

The goal now would be to study this equation and to find out a way to construct its solutions. But we once again remind our reader, that we also have an additional burden on our shoulders: respecting the physical implications of (6), by making sure that the newly discovered solutions do not vanish (for if they do, the density x of P- will become singular, and this definitely would *not do!*). How shall we approach this daunting task?

Let us start by figuring out the general behavior of the solutions of (9) at the boundaries of the domain $0 < \xi < +\infty$.

1. What happens with the solutions of (9) around $\xi = 0$?

For sufficiently small ξ (9) turns into

$$V'' + \frac{1}{\xi} V' - \frac{c^2}{\xi^2} V = 0.$$

It is easy to see that this equation has two partial solution $V_1 = \xi^{-c}$ and $V_2 = \xi^{+c}$, so its general solution would be just a linear combination of the two: $V(\xi) = c_1 \xi^{-c} + c_2 \xi^{+c}$. By assumption, V cannot be equal to zero (so $c_1 \neq 0$), hence when $\xi \rightarrow 0$

$$V \rightarrow \xi^{-c}.$$

2. Similarly, when $\xi \rightarrow \infty$, (9) reduces to

$$V'' - a^2 V = 0,$$

whose solutions have the asymptotes

$$V \rightarrow e^{\pm a\xi}.$$

Armed with this knowledge, we can utilize a new variable $w(\xi)$, defined as:

$$V = \xi^{-c} e^{ka\xi} w(\xi), \quad k = \pm 1,$$

which, upon substitution into (9) reduces it to the equation for the *degenerate hypergeometric function* [15]:

$$\frac{d^2 w(\zeta)}{d\zeta^2} + (1 - 2c - \zeta) \frac{dw(\zeta)}{d\zeta} - a\lambda(k - 2ck - b)w(\zeta) = 0, \quad (10)$$



where

$$\zeta = -2ka\xi. \tag{11}$$

In order to proceed further, it is advisable to represent the solution of degenerate hypergeometric equation as [16]:

$$V(t) = e^{\frac{\sigma t}{2}} \left[c_1 \exp\left(\frac{\delta}{2\rho} e^{-\rho t}\right) w_+(t) + c_2 \exp\left(-\frac{\delta}{2\rho} e^{-\rho t}\right) w_-(t) \right], \tag{12}$$

where, as before, c_1 and c_2 are arbitrary real constants, the functions w_+ and w_- are defined as:

$$\begin{aligned} w_+(t) &= F\left(\frac{\alpha}{\rho}, 1 - \frac{\sigma}{\rho}, -\frac{\delta}{\rho} e^{-\rho t}\right), \\ w_-(t) &= F\left(1 - \frac{\sigma + \alpha}{\rho}, 1 - \frac{\sigma}{\rho}, \frac{\delta}{\rho} e^{-\rho t}\right) \end{aligned} \tag{13}$$

and the function F in (13) is given by the following convergent series:

$$F(A, B, \zeta) = 1 + \frac{A}{B} \frac{\zeta}{1!} + \frac{A(A+1)}{B(B+1)} \frac{\zeta^2}{2!} + \dots \tag{14}$$

So, what possible benefit might we gain from (12)–(14) which we could not from the original Schrödinger equation (9)? Quite a lot, in fact, since now the problem of regularity of $x(t)$ and $y(t)$ reduces to a question of whether the series (13) has any zeroes or not. And a close look at the series $w_+(t)$ reveals it to be *alternating*! Therefore, if we are to remove any possibility of $V(t)$ turning to zero (henceforth producing a pole in both $x(t)$ and $y(t)$), we have to remove the $w_+(t)$ from the big picture – which we can do by setting $c_1 = 0$. But even that is not the end of the story.

Since we are left with just one series $w_-(t)$, we can play a little bit with its arguments in (14). In particular, we can turn $w_-(t)$ into a *finite* series; all we have to do for that end is introduce a natural number N and choose the parameters A and B for $F(A, B, \zeta)$ to depend on N as

$$\begin{aligned} A &= -N \\ B &= 1 - N - \frac{\gamma}{\rho} \end{aligned} \tag{15}$$

Voila! We end up with an infinite of solutions $V_N(t)$, parameterized via the natural number N , each one of them being containing within a *non-vanishing* polynomial of order N w.r.t. the variable ζ and having the following form



$$V_N(t) = \exp\left[-\frac{\delta}{2\rho}e^{-\rho t} + \frac{\sigma_N t}{2}\right] F\left(-N, 1-N-\frac{\gamma}{\rho}, \frac{\delta}{\rho}e^{-\rho t}\right), \quad (16)$$

where we have defined $\sigma_N = \gamma + N\rho$ and $F(\dots)$ is the series defined by (14).

Since we have gone this far, let us take a look at some first iterations of the function V_N :

$$V_1(t) = \exp\left[-\frac{\delta}{2\rho}e^{-\rho t} + \frac{1}{2}(\gamma + \rho)t\right] \left(1 + \frac{\delta}{\gamma}e^{-\rho t}\right),$$

$$V_2(t) = \exp\left[-\frac{\delta}{2\rho}e^{-\rho t} + \frac{1}{2}(\gamma + 2\rho)t\right] \cdot \left(1 + \frac{2\delta}{\rho + \gamma}e^{-\rho t} + \frac{\delta^2}{\gamma(\rho + \gamma)}e^{-2\rho t}\right),$$

$$V_3(t) = \exp\left[-\frac{\delta}{2\rho}e^{-\rho t} + \frac{1}{2}(\gamma + 3\rho)t\right],$$

$$\left(1 + \frac{3\delta}{2\rho + \gamma}e^{-\rho t} + \frac{3\delta^2}{(2\rho + \gamma)(\rho + \gamma)}e^{-2\rho t} + \frac{\delta^3}{(2\rho + \gamma)(\rho + \gamma)\gamma}e^{-3\rho t}\right).$$

As we can clearly see from these simplest cases already at the second iteration the solution demonstrates a very clear non-monotonic behavior. In particular, that very iteration, $V_2(t)$, corresponds to the following magnetic nuclei concentrations:

$$\begin{cases} x = \frac{m^2 z(1-z)[(1+2m)z+1]}{m(1+2m)z(mz+2)+m^2+4m+2} \\ y = \frac{(1-z)[m(2+3m)z+m^2+4m+2]}{m(1+2m)z(mz+2)+m^2+4m+2}, \\ z = e^{-\rho t} \end{cases}, \quad (17)$$

where $\frac{\delta}{\gamma} = m$.

If we then use (16) to calculate the total magnetization $M(t)$, we will get the following:

$$M = \frac{-3(m^2 + 4m + 2) + z\left[2(3m^2 - 23m - 13) + mz(20m^2 - 49m - 26 - 20m(1+2m)z)\right]}{10\left[m(1+2m)z(mz+2) + m^2 + 4m + 2\right]},$$

which happens to fit the observational data perfectly – see Figure 3.

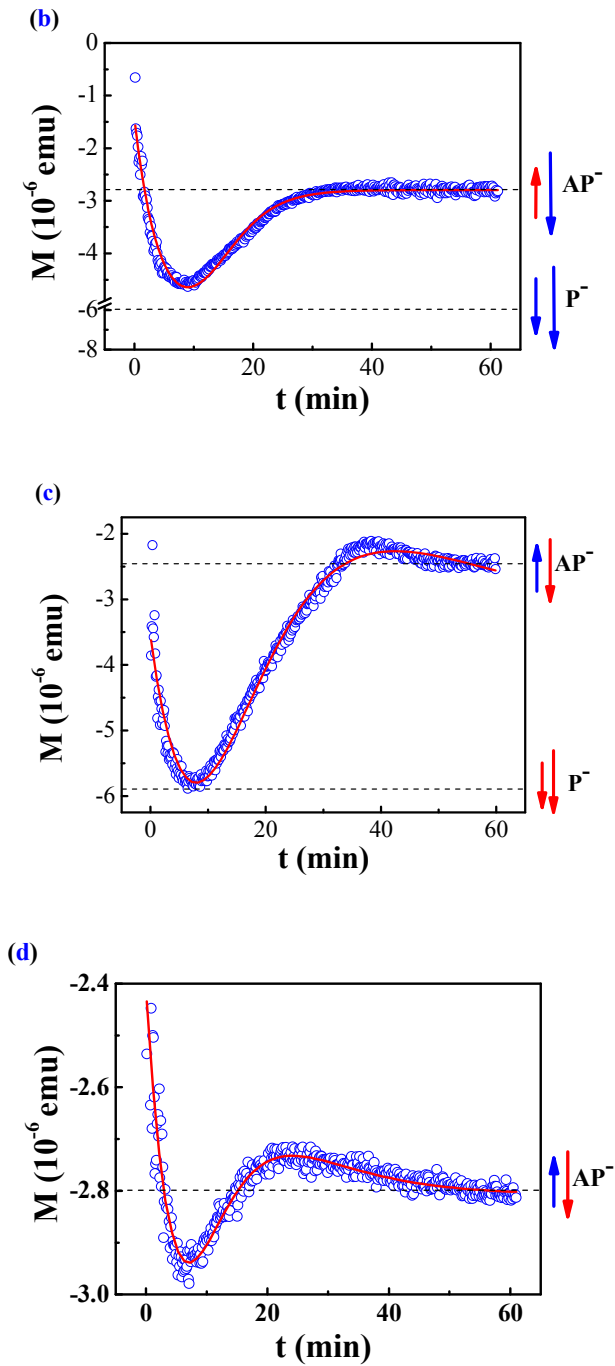


Fig. 3. Magnetic relaxation in Pt(3 nm)/Co(1.05 nm)/Ir(1.5 nm)/Co(0.7 nm)/Pt(3 nm) in the magnetic fields -1360 Oe (b), -1354 Oe (c), -1370 Oe (d) at $T = 100$ K. The solid lines are exact solutions (16), the blue circles – the results of the observations (see [13])



References

1. *Hinchey L.L., Mills D.L.* Magnetic properties of superlattices formed from ferromagnetic and antiferromagnetic materials // *Phys. Rev. B.* 1986. №33. 3329.
2. *Majkrzak C.F., Cable J.W., Kwo J. et al.* Observation of a Magnetic Antiphase Domain Structure with Long-Range Order in a Synthetic Gd-Y Superlattice // *Phys. Rev. Lett.* 1986. №56. 2700.
3. *Gruünberg P., Schreiber R., Pang Y. et al.* Layered Magnetic Structures: Evidence for Antiferromagnetic Coupling of Fe Layers across Cr Interlayers // *Phys. Rev. Lett.* 1986. №57. P. 2442 – 2445.
4. *Salamon M.B., Shantanu S., Rhyne J.J. et al.* Long-range incommensurate magnetic order in a Dy-Y multilayer // *Phys. Rev. Lett.* 1986. №56. 259.
5. *Parkin S., Jiang X., Kaiser C.* Magnetically engineered spintronic sensors and memory // *Proceedings of the IEEE.* 2003. №91. P. 661 – 680.
6. *Bergman A., Björn S., Hellsvik J. et al.* Ultrafast switching in a synthetic antiferromagnetic magnetic random-access memory device // *Phys. Rev. B.* 2011. №83. 224429.
7. *Freitas P.P., Cardoso F.A., Martins V.C. et al.* Spintronic platforms for biomedical applications // *Lab Chip.* 2012. №12. 546.
8. *Li G., Sun S., Wilson R.J. et al.* Spin valve sensors for ultrasensitive detection of superparamagnetic nanoparticles for biological applications // *Sensors and Actuators A: Phys.* 2006. №126(1). 98.
9. *Ruderman M.A., Kittel C.* Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons // *Physical Review.* 1956. №96. 99.
10. *Kasuya T.* A Theory of Metallic Ferro- and Antiferromagnetism on Zener's Model // *Progress of Theoretical Physics.* 1956. №16. 45.
11. *Yosida K.* Magnetic Properties of Cu-Mn Alloys // *Physical Review.* 1957. №106 (5). 893.
12. *Fache T., Tarazona H.S., Liu J. et al.* Nonmonotonic aftereffect measurements in perpendicular synthetic ferrimagnets // *Phys. Rev. B.* 2018. №98. 064410.
13. *Morgunov R.B., Yurov A.V., Yurov V.A. et al.* Oscillatory dynamics of the magnetic moment of a Pt/Co/Ir/Co/Pt synthetic antiferromagnet // *Phys. Rev. B.* 2019. №100. 144407.
14. *Reid W.T.* Riccati Differential Equations. L., 1972.
15. *Riemann B.* Beiträge zur Theorie der durch die Gauss'sche Reihe $F(a, \beta, \gamma, x)$ darstellbaren Functionen // *Abhandlungen der Mathematischen Classe der Königlischen Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen.* Göttingen: Verlag der Dieterichschen Buchhandlung, 1857. №7. S. 3 – 22.
16. *Kamke E.* Differentialgleichungen: Lösungsmethoden und Lösungen. N.Y., 1959.

Об авторах

Артём Валерианович Юров — д-р физ.-мат. наук, проф., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: AIUrov@kantiana.ru

Валериан Артёмович Юров — канд. физ.-мат. наук, доц., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: vayt37@gmail.ru



Роман Борисович Моргунов — д-р физ.-мат. наук, проф., Институт проблем химической физики РАН, Россия.

E-mail: morgunov2005@yandex.ru

The authors

Prof. Artyom V. Yurov, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: AIUrov@kantiana.ru

Dr Valerian A. Yurov, Associate Professor, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: vayt37@gmail.ru

Prof. Roman B. Morgunov, Institute of Problems of Chemical Physics, Russia.

E-mail: morgunov2005@yandex.ru

*S. P. Kshevetskii***FINITE-DIFFERENCE-STEEPEST DESCENT PARADIGM:
NEW NUMERICAL METHOD OF FOCKIAN SPECTRAL PROBLEM**

90

A new numerical method that unifies finite-difference and the method of steepest descent paradigms is suggested. It allows to avoid the wavefunctions space and spin variables division, that leads to superposition in spin projection stationary states. The approach is verified by comparison with conventional methods.

Предложен новый численный метод, объединяющий конечно-разностный метод и метод парадигм наискорейшего спуска. Это позволяет избежать деления пространства волновых функций и спиновых переменных, что приводит к суперпозиции в стационарных состояниях спиновой проекции. Подход проверен путем сравнения с традиционными методами.

Keywords: Hartree – Fock equation, Fockian, wavefunction, Hamiltonian, electron, exchange.

Ключевые слова: уравнение Хартри – Фока, фокиан, волновая функция, гамильтониан, электрон, обмен.

Introduction

A foundation of quantum chemistry and solid state physics in its modern form is based on ideas of Hartree Fock (HF) method, that presents the best one-electron approximation [1]. The method is formulated as a system of nonlinear equations in which each electron «lives» in a self-consistent field of other electrons. Namely the self-consistency is a source of nonlinearity, that yields main difficulty of the system solution. It leads to a necessity of computer modelling/simulation of quantum multi-particle systems that is approved in [2]. The abundance of publications related to HF method forces us to very brief review.

**A brief history of the development of methods
for calculating multi-electron systems**

Hartree proposed a method for approximate calculation of multi-electron wave function in 1929. However, he has not taken into account the symmetry of the wave functions of electrons under action of permutations. In 1930, Fock developed Hartree's method taking the Pauli principle into account, it is now named as Hartree – Fock method (HF method). The effective results are obtained on a way of the HF method simplifications, known as density-functional theory (DFT) [3].



There are also post-Hartree – Fock methods that improve Hartree – Fock calculations. In [4] a concise summary is presented over the existing fully numerical approaches to molecular calculations. The authors own two-dimensional (2D) finite-difference relaxation method for Hartree – Fock, Hartree – Fock – Slater, multiconfiguration Hartree – Fock or Dirac – Slater calculations on diatomic molecules is described in details.

Let us mention popular methods for calculating quantum many-particle systems as an important part of the brief history of the method development. It is matrix and its diagonalization [5] for a Fockian or a Huckel-type models for Hamiltonian matrix of molecule by the non-canonical molecular orbitals (NCMO).

In molecular states calculations of quantum chemistry the so-called molecular orbitals are used. The orbitals are localized in a limited spatial region of a molecule, for example a specific bond or in the case of a lone pair on a specific atom. They can be used to relate molecular orbital calculations to simple bonding theories, and also to speed up post-Hartree–Fock electronic structure calculations by taking advantage of the local nature of electron correlation. In solid state physics such localized orbitals are build using periodic boundary conditions that are known as Wannier functions, see for example [6].

The main problem of a realization of the mentioned methods is a choice of the basic functions for an eigen wave function of the Fockian [7].

The overview [13] touch early attempts to reduce the many-center problems to a somewhat one-center's concentrating on so-called two-dimensional finite-difference HF method (FDHF) Earlier review of the finite-difference approach to the problem is presented in [4], where authors speak about fully numerical HF methods for molecules.

A continuous spectrum states formation that would be responsible for processes of ionization and recombinations are of extreme difficulty by means of localized or periodic functions, more exactly – the an elegant numerical procedure to find optimally localized set of generalized Wannier functions associated with a set of Bloch bands in a crystalline solid [10].

Basic ideas

To avoid the mentioned difficulties of solution of the Fockian eigenvalue problem by means of variational principle, we suggest a direct application of finite-difference method. To accelerate the solution numerical exploration we use the steepest descent method.

Aims and scope

This paper introduces the novel numerical method that unify finite-difference and the steepest descent paradigms. It unifies two main purposes:

- 1) the effective numeric code that accelerates calculations especially within an extent atomic systems;
- 2) it allows to avoid the wavefuncions space and spin variables division, that leads to account of superpositions in spin projection stationary states. The approach is verified by comparison with conventional methods results.



Born – Oppenheimer approximation. Hamiltonian of an electronic system

In the Born – Oppenheimer approximation, the nuclei of a molecule or a solid are assumed to be stationary. The Hamiltonian is written for a system of N electrons, located in the field of a nuclei system:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \Delta_i - \sum_{J,i} \frac{Z_J e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_J|} + \sum_{i,j \neq i} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}. \quad (1)$$

92

In the expression (1), \sum_i is a sum over all electrons, i is the electron number; \sum_J is a sum over all nuclei, J is nucleus number; Z_J is the charge of the nucleus with number J , expressed in charge $|e|$ of an electron; \vec{R}_J is a position of the nucleus J , the vector \vec{r}_i stands for a radius-vector for the electron with number i .

Conventionally, if the energy eigenvalue problem is of interest, the stationary Schrödinger equation writes as :

$$\hat{H}\Phi = E\Phi, \quad (2)$$

where $\Phi = \Phi(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_K, (\vec{r}_1, \sigma_1), \dots, (\vec{r}_N, \sigma_N))$, $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N$ are spin variables of the electrons. Since the electrons are fermions, the wave function must be antisymmetric in the variables of the electrons, that is, for example, reads

$$\Phi(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_K, (\vec{r}_1, \sigma_1), \dots, (\vec{r}_N, \sigma_N)) = -\Phi(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_K, (\vec{r}_N, \sigma_N), \dots, (\vec{r}_1, \sigma_1)).$$

It is convenient to mark electrons arguments simply with their numbers, for the case, we introduce the notation $i = (\vec{r}_i, \sigma_i)$. Then

$$\Phi = \Phi(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_K, 1, \dots, N).$$

Notations. The essence of the Hartree – Fock method

Within the framework of the Hartree – Fock method, the wave function $\Phi = \Phi(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_K, 1, \dots, N)$ is searched in the form of a Slater determinant composed of single-particle functions

$$\Phi = \begin{vmatrix} \Psi_1(1) & \Psi_2(1) & \dots & \dots & \Psi_N(1) \\ \Psi_1(2) & \Psi_2(2) & \dots & \dots & \Psi_N(2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Psi_1(N) & \Psi_2(N) & \dots & \dots & \Psi_N(N) \end{vmatrix}.$$



We skip the nuclei positions parameters \bar{R}_k .

From the variational principle $(\min \langle \Phi, \hat{H}\Phi \rangle)$ the Fock operator components for the spin-orbitals Ψ_i are derived, as follows:

$$\hat{F}_j \Psi_j(1) = \varepsilon_j \Psi_j(1). \quad (3)$$

Here the functions Ψ_j are spin-orbitals, and the \hat{F}_j are Fockians,

$$\hat{F}_j = \hat{h}_1 + \sum_{i=1}^N (\hat{J}_i' - \hat{K}_i'), \quad (4)$$

$$\hat{J}_i' \Psi_j = \int \Psi_i^*(2) \frac{1}{r_{12}} \Psi_i(2) d\bar{r}_2 \Psi_j(1), \quad (5)$$

$$\hat{K}_i' \Psi_j = \int \Psi_i^*(2) \frac{1}{r_{12}} \Psi_j(2) d\bar{r}_2 \Psi_i(1), \quad (6)$$

$$\hat{h}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 - \sum_j \frac{Z_j e^2}{|\bar{r}_1 - \bar{R}_j|}.$$

A prime by the sum means that a term with $i = j$ is skipped. The integration is carried out over the variables of particle 2, $r_{12} = |\bar{r}_1 - \bar{r}_2|$, $\Delta_1 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2}$, $\bar{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$. It is assumed that the functions Ψ_i are orthogonal: $\int \Psi_i^*(1) \Psi_k(1) d\bar{r}_1 = \delta_{ik}$.

Orbitals. Standard method for solving the Hartree – Fock equations

In order to solve the Hartree – Fock equations, the following transformation is usually carried out. The spin variables of the electrons are split off. Namely, it is assumed that a part of electrons have spin up, and the others have spin down. Therefore, the wave functions Ψ_j are taken in the form

$\Psi_j(\bar{r}, \sigma) = \varphi_j(\bar{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ and other functions Ψ_i are taken as

$$\Psi_i(\bar{r}, \sigma) = \varphi_i(\bar{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Substituting these expressions into the Hartree – Fock equations (3), the equations for the orbitals $\varphi_j(\bar{r})$ are derived

$$\hat{F}_j \varphi_j(1) = \varepsilon_j \varphi_j(1). \quad (7)$$



Here φ_j are spin-orbitals, and \hat{F}_j are fokians,

$$\hat{J}'_i \varphi_j = \int \varphi_i^*(2) \frac{1}{r_{12}} \varphi_j(2) d\vec{r}_2 \Psi_j(1), \quad (8)$$

$$\hat{K}'_i \varphi_j = \int \varphi_i^*(2) \frac{1}{r_{12}} \varphi_j(2) d\vec{r}_2 \varphi_i(1). \quad (9)$$

These equations (7) are also called Hartree – Fock equations, although the meaning of these equations is essentially different than (3).

The solution of these equations (7) is sought in the form of series with respect to the basis functions $\varphi_j = \sum_k C_{jk} \Theta_k$, where Θ_k are the basis functions.

When we come to equations (7) from equations (3), the ability to calculate magnetic phenomena correctly within the framework of the Hartree – Fock method becomes lost because we have predetermined the spins of the particles. Especially it relates to so-called frustration phenomenon [14].

However, the original Hartree – Fock equations can be solved differently: the electron spin states can be calculated from the Hartree – Fock equations (7) for spin-orbitals, and then the orientations of the particle spins and magnetic phenomena can be calculated, taking into account the spin-orbit interaction.

Two equivalent forms of the Hartree – Fock equations

Equations (3) are a special form of equations of more general kind:

$$\hat{F}_j \Psi_j(1) = \varepsilon_j \Psi_j(1) + \sum_{i \neq j} \lambda_{ji} \Psi_i(1), \quad (10)$$

where obviously

$$\varepsilon_j = \int \Psi_j^*(1) \hat{F}_j \Psi_j(1) d\vec{r}_1, \quad (11)$$

$$\lambda_{ji} = \int \Psi_i^*(1) \hat{F}_j \Psi_j(1) d\vec{r}_1. \quad (12)$$

It is the equations (10) that are obtained if we derive them from the variational principle neatly.

Both forms of Hartree – Fock equations are equivalent. The operator \hat{F}_j depends on the functions Ψ_j and is invariant under a unitary transformation of the system of functions $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N$. By unitary transformations of the system of functions $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N$, any of these form of equations is transformed to another.

The form (10) of the Hartree – Fock equations is more convenient for calculations. The equivalence of the two forms ((3) and (10) of the Hartree – Fock equations is shown in the literature [11]. However, not all books contain such information.



The resulting equation can be written in the form

$$\hat{S}_j \Psi_j(1) = \varepsilon_j \Psi_j(1), \quad (13)$$

where

$$\hat{S}_j \Psi_j(1) = \hat{F}_j \Psi_j(1) - \sum_{i \neq j} \int \Psi_i^*(2) \hat{F}_j \Psi_j(2) d\bar{r}_2 \Psi_i(1). \quad (14)$$

We multiply the equations (13) by Ψ_k by scalar product, that reads

$$\begin{aligned} \int \Psi_k^*(1) \hat{S}_j \Psi_j(1) d\bar{r}_1 &= \int \Psi_k^*(1) \hat{F}_j \Psi_j(1) d\bar{r}_1 - \sum_{i \neq j} \int \Psi_i^*(2) \hat{F}_j \Psi_j(2) d\bar{r}_2 \int \Psi_k^*(1) \Psi_i(1) d\bar{r}_1 = \\ &= \int \Psi_k^*(1) \hat{F}_j \Psi_j(1) d\bar{r}_1 - \sum_{i \neq j} \int \Psi_i^*(2) \hat{F}_j \Psi_j(2) d\bar{r}_2 \delta_{i,k} = \\ &= \int \Psi_k^*(1) \hat{F}_j \Psi_j(1) d\bar{r}_1 - \int \Psi_k^*(2) \hat{F}_j \Psi_j(2) d\bar{r}_2 \delta_{k,j} = \\ &= \varepsilon_j \int \Psi_k^*(1) \Psi_j(1) d\bar{r}_1. \end{aligned}$$

We see that if $\int \Psi_k^*(1) \Psi_j(1) d\bar{r}_1 = \delta_{j,k}$, then the equality holds.

The new method of solving the Hartree – Fock equations (3) by steepest descent method

To suggest a new solution method, we use some geometric ideas. Let us define a curve $\Psi(t)$ in the functional space of the HF system solutions.

Suppose the curve ends at some eigenfunction $\Psi_j = \Psi(0)$ and hence mark the function by the index j , having $\Psi_j(t)$. Let's allocate in each point of the curve $\Psi_j(t)$ the components parallel to $\hat{S}_j \Psi_j$, and the component orthogonal to $\hat{S}_j \Psi_j$ and introduce the factor δ so, that:

$$\Psi_j = (\Psi_j)_{\parallel} + (\Psi_j)_{\perp} = \delta (\hat{S}_j \Psi_j) + (\Psi_j)_{\perp}. \quad (15)$$

Here δ is a certain factor that is easily computed. Multiplying of the equality (15) by scalar product from the left side by $\hat{S}_j \Psi_j$, we get

$$\delta = \frac{\int (\hat{S}_j(1) \Psi_j(1))^* \Psi_j(1) d\bar{r}_1}{\|\hat{S}_j \Psi_j\|^2}.$$

In this way,

$$(\Psi_j)_{\parallel} = \int \frac{(\hat{S}_j(1) \Psi_j(1))^*}{\|\hat{S}_j \Psi_j\|^2} \Psi_j(1) d\bar{r}_1 \hat{S}_j \Psi_j,$$



$$(\Psi)_{\perp} = \Psi_j - \int \frac{(\hat{S}_j(1)\Psi_j(1))^*}{\|\hat{S}_j\Psi_j\|^2} \Psi_j(1) d\vec{r}_1 \hat{S}_j\Psi_j.$$

Then it is natural to surmise that $\Psi_j(t)$, is obtained as a result of the following iterative procedure

$$\Psi_j(t + \Delta t) = \Psi_j(t) - \left(\alpha(\Psi)_{\perp} + \beta(\Psi_j)_{\parallel} \right) \Delta t$$

under the condition of sufficiently small Δt and for $t \rightarrow \infty$ converges to the solution of the Hartree – Fock equations (13). Here $\alpha > 0$, $\beta > 0$. The term $\beta(\Psi_j)_{\parallel} \Delta t$ is introduced to preserve the normalization and the value of β has to be chosen from the condition of conservation of normalization. For sufficiently small Δt , we can take $\beta = 0$. Therefore, for $\Delta t \rightarrow 0$ we arrive at the equation

$$\frac{d\Psi_j}{dt} = -\alpha \left(\Psi_j - \int \frac{(\hat{S}_j(1)\Psi_j(1))^*}{\|\hat{S}_j\Psi_j\|^2} \Psi_j(1) d\vec{r}_1 S_j\Psi_j \right).$$

We calculate

$$\varepsilon_j^*(t) = \int \frac{(\hat{S}_j(1)\Psi_j(1))^*}{\|\Psi_j\|^2} \Psi_j(1) d\vec{r}_1.$$

This equation follows from (13) and corresponds to our equations (13) for eigenvalues. Then we arrive at the equation

$$\frac{d\Psi_j}{dt} = -\alpha \left(\Psi_j - \frac{\varepsilon_j^*(t)\|\Psi_j\|^2}{\|\hat{S}_j\Psi_j\|^2} S_j\Psi_j \right).$$

This equation is not very convenient for calculations, because in the process it is required to compute $\|\hat{S}_j\Psi_j\|^2$, and this is laborious. However we can use the approximate relation

$$\|\hat{S}_j\Psi_j\|^2 \approx |\varepsilon_j(t)|^2 \|\Psi_j\|^2,$$

that follows from (13), and to simplify the differential equation. This can also be done because the term $\alpha\Psi_j$ affects mainly the normalization change, but normalization can always be corrected. We arrive at a more simple and convenient equation

$$\frac{d\Psi_j}{dt} = -\alpha \left(\Psi_j - \frac{1}{\varepsilon_j(t)} \hat{S}_j\Psi_j \right).$$



It is even more convenient to rewrite this equation in the form

$$\frac{d\Psi_j}{dt} = -\alpha(S_j\Psi_j - \varepsilon_j(t)\Psi_j). \quad (16)$$

We have taken into account that the energies are negative for discrete states. The normalization in this equation is retained automatically.

This form of the equation is relatively simple and understandable. We write out this equation in the original operators:

$$\frac{d\Psi_j(1,t)}{dt} = -\alpha \left(\begin{array}{l} \hat{F}_j(1,t)\Psi_j(1,t) - \sum_{i \neq j} \int \Psi_i^*(2,t)\hat{F}_j\Psi_j(2,t)d\vec{r}_2 \Psi_i(1,t) \\ -\varepsilon_j(t)\Psi_j(1,t) \end{array} \right). \quad (17)$$

Calculation of particle spin states

The solution of the equations (17) for $t \rightarrow \infty$ gives the stationary solution of the equations. Equations (17) realize the method of steepest descent. In this case, we do not necessarily fall into the absolute minimum of energy, because there are local energy minima. Consequently, the result of solving the equations (17), in general, depends on the starting spin orbitals $\Psi_j(t=0)$.

Let's consider a concrete example. Suppose we calculate the spin-orbitals for the helium atom. Suppose that for $t=0$ the spins of both electrons are directed upwards. It is not clear from the equations, by what mechanism in the particular case under consideration, the electrons can turn to make spins of electrons oppositely directed at $t \rightarrow \infty$. The fact is that the operator \hat{F}_j is an integro-differential operator. By itself, it can not transform the structure $\Psi_j = \begin{pmatrix} u_j \\ 0 \end{pmatrix}$ of Ψ_j function into the structure $\Psi_j = \begin{pmatrix} 0 \\ v_j \end{pmatrix}$. The last term in (17) also can not change the structure of the column $\Psi_j = \begin{pmatrix} u_j \\ 0 \end{pmatrix}$.

Numerical experiments show that in the solution of the equations (17), the correct orientations of electron spins are settled automatically with increasing t , if the orientations of the electron spins for $t=0$ do not differ too much from those corresponding to the energy minimum.

Nevertheless, there exist initial $\Psi_j(0)$ such that the spins of particles with increase of t can not turn around and take a position corresponding to energy minimum. So if in the two-electron system the particle spins are parallel to each other at $t=0$, then in the solution of the equations (17) with increasing t the particle spins can not be transformed although the energy decreases and the local energy minimum is achieved. The energy corresponding to this local extremum is larger, since the exchange term is obtained not equal to zero. The situation corresponds, obviously, to unstable equilibrium.



The structure of the equation (17) does not allow us to get out of this local extremum, and this is apparently related to the structure of the original Hartree – Fock equations. In deriving the Hartree – Fock equations, one searches for a minimum of the energy functional, and calculates variation of the energy functional with respect to spatial variables. The orientations of particle spins are also independent variables, but the corresponding minimization of the energy functional over these variables has not been performed. It should be noted that the contribution of the terms J'_i and \hat{h}_1 does not depend on the orientation of the spins, and only the exchange integral determines the contribution of spin-spin interactions of particles into the total energy value.

It is not clear how one can modify the Hartree – Fock equations to exclude local energy extremes corresponding to incorrect spin configurations. But it is relatively easy to propose some modifications of equation (17), which allow minimizing the energy functional over the spin variables.

The simplest way is to introduce into the system of equations the forced oscillations of the spins of particles, which dump with time. This will allow the system to escape from local extremes and help the system to align the spins of the particles so as to find a stable configuration of spins and an absolute minimum of energy. Fortunately, the dead zone in which the spinning of spins to the right directions does not occur, is narrow. We

introduce for each spinor $\Psi_j = \begin{pmatrix} u_j \\ v_j \end{pmatrix}$ the orthogonal spinor $\Psi_j^+ = \begin{pmatrix} v_j \\ -u_j \end{pmatrix}$.

We modify the equations (17) as follows

$$\begin{aligned} \frac{d\Psi_j(1,t)}{dt} = & -\alpha \left(\hat{F}_j(1,t)\Psi_j(1,t) - \sum_{i \neq j} \int \Psi_i^*(2,t)\hat{F}_j(2,t)\Psi_j(2,t)d\vec{r}_2 \Psi_i(1,t) \right) + \\ & + \gamma_j(t) \left(\Psi_j^+(1,t) - \sum_{i \neq j} \int \Psi_i^*(2,t)\Psi_j^+(2,t)d\vec{r}_2 \Psi_i(1,t) \right). \end{aligned} \quad (18)$$

Here the conservation of the normalization follows from the fact that the right-hand side is orthogonal to Ψ_j . To preserve the orthogonality of the functions Ψ_i , in the second line (18) a special summand is introduced

$$-\sum_{i \neq j} \int \Psi_i^*(2,t)\Psi_j^+(2,t)d\vec{r}_2 \Psi_i(1,t).$$

Here $\gamma_i(t)$ are some small rapidly decreasing functions. It is advisable to relate these functions $\gamma_i(t)$ to the norms of the derivatives $\frac{d\Psi_j(1,t)}{dt}$. For example, for a numerical solution, we can take

$$\gamma_j(t) = \gamma_0 \left| \frac{\partial \Psi_j(t)}{\partial t} \right| * 0.1 * random(-1,1).$$



Here the values from +1 to -1 are chosen randomly. $\gamma_j(t)$ is chosen so that the change $\Psi_j(t)$ due to of the introduced spin oscillations be small in comparison with the change of $\Psi_j(t)$ due to the energy changing to energy minimum. The spin oscillations introduced are small, but they are sufficient for the system to leave the dead zone and adjust the spins to achieve the absolute energy minimum. In addition, $\gamma_i(t)$ becomes negligibly small and tends to zero as the extremum point approaches.

However, the block with the turn of the spins is still underdeveloped. It is possible to accurately calculate the operator turning the spins of particles in such a way as to minimize energy. The idea is fresh and not implemented yet.

Some test ab initio calculations. Calculation of electron clouds and spin orientations in simple electron systems

Below we show some examples of ab initio calculations electronic clouds and spin orientations of simple quantum systems.

In Fig. 1, the right-hand side of the figure shows the electron clouds of the helium atom calculated by the method described above. It should be noted that the electron spins are opposite directed, and the correct orientation of the spins is found by itself, it is the result of calculations. The calculated ground state energy $E_0 = -82.27$ eV (experimental value $E_0 = -78.95$ eV [8]), calculated ionization energy $E_1 = -20.94$ eV (experimental value $E_1 = -24.58$ eV [9]). In this work, we did not have the goal of calculating these energy characteristics with high accuracy but just wished to illustrate the proposed calculation method and show that it works. Obviously, using finer the difference grid, it is possible to increase the calculation accuracy. Although we understand that applying standard methods for solving the Hartree – Fock equations and choosing a very good basis system of functions and the correct spin orientations, one can probably achieve the best accuracy. The advantage of the proposed method is its universality, which is very important, and also in the fact that the correct orientation of the spins is obtained automatically within this method. On the left side of the picture, the initial electron clouds are shown to start the calculations. They were especially initiated to be very different from the actual electron clouds of the helium atom, and even were taken primitive, to demonstrate the work out of the method. The starting cloud of the first electron fills the left half of the square (in reality, of the cube), and the starting cloud of the second electron is in the right half of the square (of the cube). Such a choice of starting clouds is made so that the starting clouds are orthogonal, although this is not important for the computations performed. We see that, as a result of computations, we received not only the correct electron clouds but, and most importantly, the correct orientation of the spins.

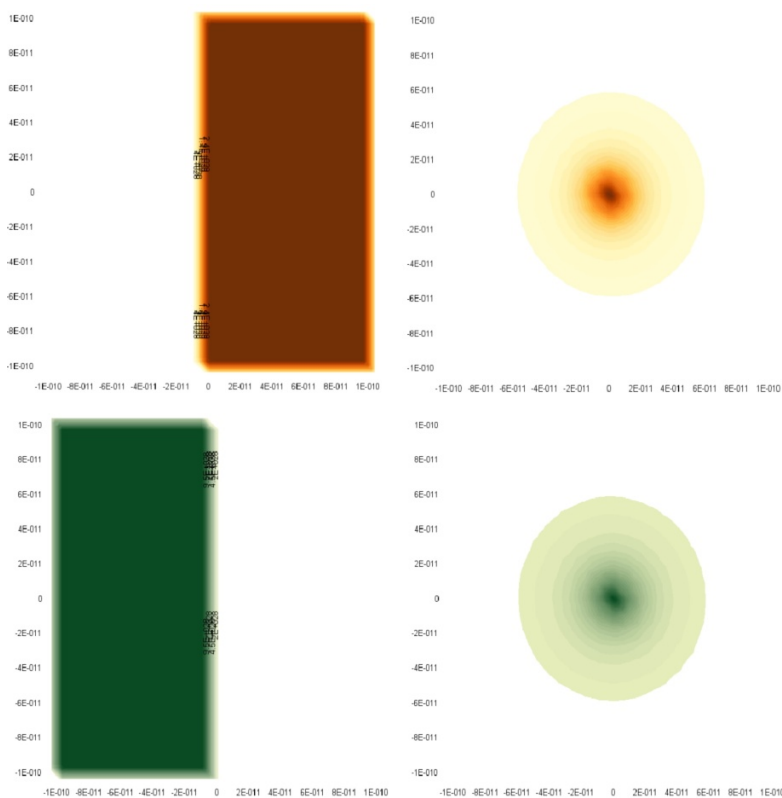


Fig. 1. Helium. On the left side, the initial electron clouds are shown. The computed electron clouds for the helium atom are shown on the right side. The electron spins are directed opposite; this is the result of calculations, and this fact is important

In Fig. 2, the upper row shows the electron clouds of the lithium atom, calculated as described above. It is usually assumed that two electrons in the lithium atom are at the lower level and the spins of these two electrons are directed opposite, while the third electron is at a higher energy level and has one of two possible spin orientations. Simple logic suggests that in reality, the spin of this third electron should rather be in a superposition state because otherwise, the spin-spin interaction is only with one of two lower electrons, which is illogical. The superposition state of the spin of this third electron is shown by calculations. However, if the spin of this third electron is in a superposition state, then the spins of all three electrons must be in a superposition state, and then there must also be a splitting of the lower energy level. This is exactly what we are observing: the lower electrons have slightly different energies. The correct orientations of the spins are found by itself; it is an important result of calculations. The lower part of the figure shows the initial electron clouds to begin the calculations. The initial clouds are taken so that they are orthogonal to each other, and their orthogonality is achieved by the simplest means. We see that we obtained not only the correct electron clouds but also the correct spin orientations.

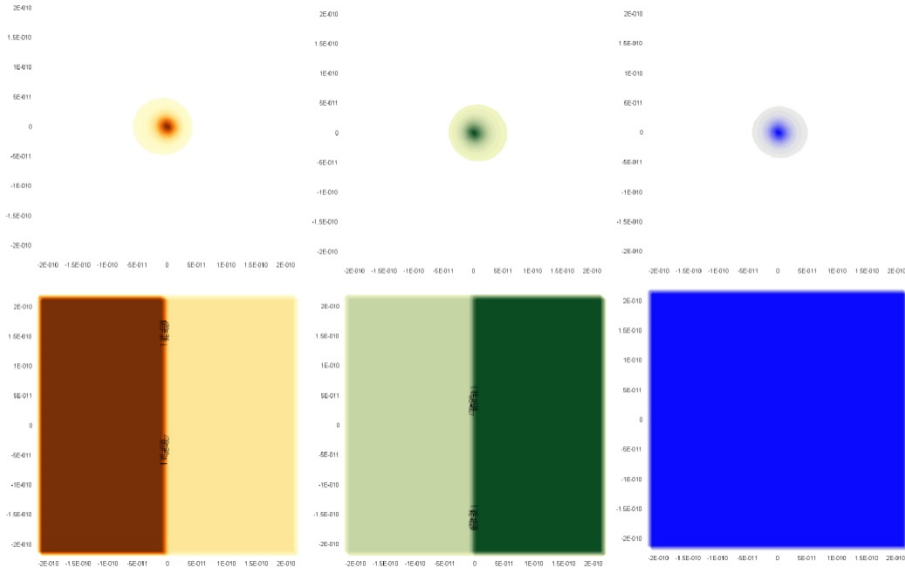


Fig. 2. Lithium. In the upper row, the calculated electron clouds of the lithium atom are shown. Electron spins have been calculated by a computer program. The spins of all three electrons are not pure states, but they are superpositions of states of spin up and spin down. In the bottom row, the initial electron clouds are shown

The electron clouds of a boron atom, calculated in the same way as described above, are shown in Fig. 3 in the top row. Here everything is about the same as in previous cases, but only the number of electrons is more. The lower part of the figure shows the initial electron clouds for starting the calculations, and the initial clouds are orthogonal to each other.

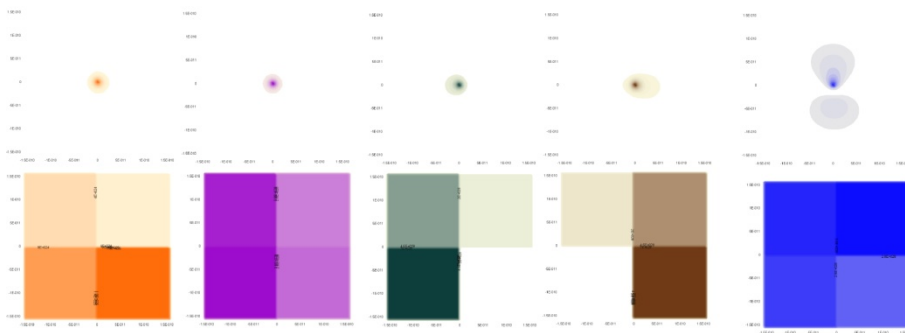


Fig. 3. Boron. In the upper row, calculated electron clouds are shown. Spins of all electrons are calculated by the program. All electron clouds are superpositions of spin-up and spin-down. At the ground energetic level, the two electrons have almost pure spin states. Small displacements of the cloud centers are seen due to the repulsion of electrons at the same level. In the lower row, the initial fields of electron clouds are shown



Discussion

An alternative method for calculating the wave function of electrons is called the DFT method (Density Functional Theory method). It is based on the ideas of Kohn and Sham (1960): the wave function of the ground state is restored with electron density [15]. We do not consider DFT-methods here, but it is quite possible to develop it on base of the ideas, presented here. Some problems However, after all, electrons define how matter is arranged internally, and what happens with it. All that we know about the design of atoms and molecules, we know only from calculations and from our imagination. Therefore, the experimental researches are fundamentally insufficient in modern physics. The significance of the computational part of the work is extremely great in modern physics.

Acknowledgement. Author thanks S. Leble for the essential contribution in literature review and important discussions of statement of problem and its solution.

References

1. Fock V. An Approximate Method for Solving the Quantum Many-Body Problem // Zs. Phys. 1930. Bd. 61, №1–2. S. 126–148.
2. Fock V. The Fundamental Significance of Approximate Methods in Theoretical Physics // UFN. 1936. Vol. 16, iss. 8. 1070.
3. Pople J., Gill P., Johnson B. Kohn-Sham density-functional theory within a finite basis set // Chemical Physics Letters. 1992. Vol. 199, iss. 6. P. 557–560.
4. Laaksonen L. Fully numerical Hartree-Fock methods for molecules. Finnish State Computer Center // Computer Physics Reports. 1986. №4. P. 313–344.
5. Gineityte V. Block Diagonalization Problem for a Fockian Matrix of Molecule and Its Solution by Means of Noncommutative Rayleigh-Schrödinger Perturbation Theory // International Journal of Quantum Chemistry. 1988. Vol. 68. P. 119–127.
6. Shukla A., Dolg M., Stoll H. Wannier-function-based ab initio Hartree-Fock approach extended to polymers: Applications to the LiH chain and trans-polyacetylene // Phys. Rev. B. 1998. №58. 4325.
7. Evarestov R. Quantum Chemistry of Solids: The LCAO First Principles Treatment of Crystals. Springer, 2007.
8. Griffiths D. Introduction to Quantum Mechanics. Pearson Education, 2005.
9. NIST Atomic Spectra Database Ionization Energies Data. Gaithersburg, MD: NIST, 2009.
10. Marzari N., David D. Vanderbilt. Maximally localized generalized Wannier functions for composite energy bands // Phys. Rev. B. 1997. №56. 12847.
11. Dahl J. Introduction to The Quantum World of Atoms and Molecules. World Scientific Publishing, 2001.
12. Quantum Mechanical ab-initio calculations of the properties of crystalline materials. Lecture Notes in Chemistry / ed. by C. Pisam. Springer, 1996.
13. Kobus J. Overview of finite difference Hartree-Fock method algorithm, implementation and application // AIP Conference Proceedings. 2012. Vol. 1504, iss. 1. 189. doi: 10.1063/1.4771715.
14. Zhendong Fu. Spin Correlations and Excitations in Spin-frustrated Molecular and Molecule-based magnets. Jülich, 2012.
15. Kohn W. Nobel Lecture: Electronic structure of matter – wave functions and density functionals // Rev. Mod. Phys. 1991. №71. 1253.



The author

Prof. Sergey P. Kshevetskii, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.
E-mail: SPKshev@gmail.com

Об авторе

Сергей Петрович Кшевецкий — д-р физ.-мат. наук, проф., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.
E-mail: SPKshev@gmail.com

М. Д. Верещагин, А. В. Кузыряцкий

МЕТОД ОЦЕНКИ ШИРИНЫ ДОМЕННОЙ СТЕНКИ ПО СИГНАЛУ, ГЕНЕРИРУЕМОМУ ДОМЕННОЙ СТЕНКОЙ ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ЧЕРЕЗ ИЗМЕРИТЕЛЬНУЮ КАТУШКУ

104

Выведена формула для ЭДС индукции Фарадея от движущейся в микропроводе доменной стенки. Производная по времени магнитного потока в измерительной катушке выражается через пятикратный интеграл по объему стенки и поверхности сечения катушки. Полученное выражение сравнивается с полученными ранее при упрощенном описании объектов измерения.

The formula for the emf Faraday induction from a domain wall moving in a microwire is derived. The time derivative of the magnetic flux in the measuring coil is expressed through a five-fold integral over the wall volume and over the coil section surface. The resulting expression is compared with those obtained previously with a simplified description of the measurement objects.

Ключевые слова: доменная стенка, измерительная катушка, ЭДС индукции.

Keywords: domain wall, measurement coil, Faraday EMF.

Введение

В последнее время ферромагнитные аморфные микронити привлекают повышенное внимание ученых. Это связано с целым набором их замечательных свойств, таких как бистабильность, гигантское магнито-сопротивление, магнитомягкость и др. [1–3]. Микронити на основе железа обладают способностью перемагничиваться под действием внешнего магнитного поля за счет движения доменной стенки (ДС) [2; 3]. Причем скорость движения ДС оказывается очень велика (достигает нескольких км/ч) [2; 3]. Это позволяет использовать магнитные нити для запоминающих и логических устройств, сенсоров различных физических величин (температуры, поля, напряжений) и т.п. [4–6]. Наибольшую популярность приобрели микронити цилиндрической формы, так как благодаря их симметричной форме в них легко контролировать скорость распространения ДС. Для таких нитей скорость имеет прямо пропорциональную зависимость от величины приложенного поля (если поле направлено вдоль нити) [2; 3].

Однако в силу достаточно больших размеров нити (диаметр нити составляет порядка нескольких микронов) [7–12] микромагнитное моделирование является затруднительным. В свою очередь, аморфность материалов, из которых сделаны нити, не позволяет применить резо-



нансные экспериментальные техники для установления микромагнитной структуры внутри нити [13–15]. Оценки микромагнитной структуры позволяют сделать лишь интегральные магнитные методы [16; 17]. Поэтому методы, позволяющие на основе полученных экспериментальных данных оценить геометрические параметры ДС, приобретают важное значение.

В статье [18] был предложен метод оценки ширины доменной стенки, основанный на эффекте Фарадея. В настоящей статье мы рассматриваем ту же экспериментальную методику, существенно уточняя аналитические формулы, используемые для оценки ширины ДС. Также мы укажем случаи, в которых можно пользоваться упрощенными формулами, предложенными в [18].

Микромагнитная структура металлической жилы состоит из двух доменов: внешнего и внутреннего [3]. В зависимости от знака коэффициента магнитострикции λ_s внешней домен имеет радиальную структуру (при $\lambda_s > 0$) или круговую (при $\lambda_s < 0$). Внутренний же домен имеет аксиальную структуру. Его размеры существенно больше размеров внешнего домена (до 99 %) [3]. Поэтому при произведении оценок будем считать, что радиус внутреннего домена совпадает с радиусом магнитной жилы R .

Модель

В электродинамике принято рассчитывать магнитное поле либо через векторный либо через скалярный потенциал. Мы будем использовать второй подход. Итак, введем скалярный потенциал

$$\vec{H} = -\vec{\nabla}\psi, \quad (1)$$

где \vec{H} – напряженность магнитного поля; $\vec{\nabla}$ – оператор набла; ψ – скалярный потенциал.

Тогда из уравнений Максвелла он выразится следующим образом:

$$\psi = \int_{V'} \frac{\vec{\nabla}' \vec{M}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dV' + \frac{1}{4\pi} \int_{S'} \frac{M_{n-} - M_{n+}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dS', \quad (2)$$

где V' – любой объем, содержащий магнитное вещество с намагниченностью \vec{M} ; $M_{n\mp}$ – нормальные компоненты вектора намагниченности, помеченные снаружи (+), а внутри (-), на поверхности магнитного поля S' .

Таким образом, напряженность магнитного поля \vec{H} , создаваемого намагниченным веществом, имеет две составляющие: поверхностную и объемную. В теории микромагнетизма поверхностную часть называют полем рассеяния. В рамках рассматриваемой задачи поле рассеяния существенно слабее объемной составляющей поля, поэтому мы не будем его рассматривать. Исследованию полей рассеяния будет посвящена отдельная работа.



Напряженность магнитного поля можно рассчитать следующим образом:

$$\begin{aligned}\vec{H} &= -\vec{\nabla}\psi = -\vec{\nabla}\int_{V'}\frac{\vec{\nabla}'\vec{M}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}dV' = -\int_{V'}\vec{\nabla}'(\vec{M})\vec{\nabla}\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}dV' = \\ &= 2\int_{V'}\vec{\nabla}'(\vec{M})\frac{(\vec{r}-\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|^3}dV'.\end{aligned}\quad (3)$$

Здесь и далее \vec{r}' описывают положения точек внутри нити, а \vec{r} — положение точки снаружи нити, в которой рассчитывается поле. Символы $\vec{\nabla}'$ и $\vec{\nabla}$ обозначают операторы набла координатам нити и по координатам пространства соответственно.

Магнитная индукция тогда находится следующим образом:

$$\vec{B} = \vec{H} + 4\pi\vec{M} = 4\pi\vec{M} + 2\int_{V'}\vec{\nabla}'(\vec{M})\frac{(\vec{r}-\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|^3}dV'.\quad (4)$$

Так как катушка перпендикулярна оси нити, магнитный поток через катушку зависит только от проекции магнитной индукции на ось нити

$$\Phi = \oint_S\vec{B}\cdot d\vec{S} = \oint_S B_z \cdot dS.\quad (5)$$

Учтем специфику распределения намагниченности внутри нити, а именно тот факт, что вне ДС намагниченность однородна, поэтому $\vec{\nabla}'\vec{M}$ равен нулю. Таким образом, будем считать интеграл по объему ДС.

В силу симметрии задачи перепишем выражение в цилиндрических координатах ρ', φ', z' , полагая, что ДС имеет радиус R , ширину h , расположена в точке z_{Dw} и ограничена функциями $f(\rho', \varphi')$ и $g(\rho', \varphi')$ слева и справа соответственно:

$$\begin{aligned}B_z &= 4\pi M_z + H_z = 4\pi M_z + 2\int_{V'}\vec{\nabla}'(\vec{M})\frac{(z-z')}{|\vec{r}-\vec{r}'|^3}dV' = \\ &= 4\pi M_z + 2\int_{V_{Dw}}\vec{\nabla}'(\vec{M})\frac{(z-z')}{|\vec{r}-\vec{r}'|^3}dV' = \\ &= 4\pi M_z + 2\int_{V_{Dw}}\vec{\nabla}'(\vec{M})\frac{(z-z')}{|\vec{r}-\vec{r}'|^3}dV' =\end{aligned}$$



$$= 4\pi M_z + 2M \int_0^R \int_{z_{DW}+f(\rho',\varphi')}^{R2\pi z_{DW}+g(\rho',\varphi')} \int \sigma(\rho',\varphi',z'-z_{DW}) \times \frac{\rho'(z-z')}{[\rho^2 + \rho'^2 - 2\rho\rho'\cos(\varphi-\varphi') + (z-z')^2]^{3/2}} d\rho' d\varphi' dz', \quad (6)$$

где $\vec{V}\vec{M}' = M\sigma(\rho',\varphi',z'-z_{DW})$. Соответственно, M – модуль намагниченности.

Геометрия задачи представлена на рисунке 1.

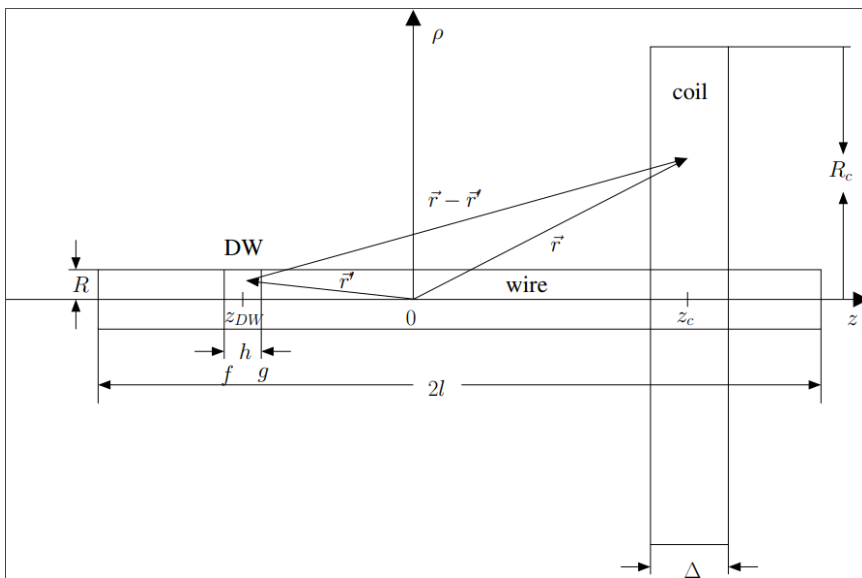


Рис. 1. Геометрия задачи

Теперь положим, что ДС распространяется, во время как ее «форма» не меняется. Это означает, что $z_{DW} = s(t)$, где $s(t)$ – закон движения стенки, а f и g остаются неизменными. (В частности, если ДС движется с постоянной скоростью v со стартового положения z_0 , тогда $s(t) = z_0 + vt$.) В этом случае выражение (4) принимает следующую форму:

$$B_z = 4\pi M_z + 2M \int_0^R \int_{s(t)+f(\rho',\varphi')}^{R2\pi s(t)+g(\rho',\varphi')} \int \sigma(\rho',\varphi',z'-s(t)) \times \frac{\rho'(z-z')}{[\rho^2 + \rho'^2 - 2\rho\rho'\cos(\varphi-\varphi') + (z-z')^2]^{3/2}} d\rho' d\varphi' dz'. \quad (7)$$

Далее найдем производную по времени от проекции магнитной индукции на ось нити:



$$\begin{aligned} \frac{\partial B_z}{\partial t} = & 4\pi \frac{\partial M_z}{\partial t} + 2M\dot{s} \int_0^R d\rho' \int_0^{2\pi} d\varphi' \left[\int_{s(t)+f(\rho',\varphi')}^{s(t)+g(\rho',\varphi')} \frac{\partial \sigma(\rho', \varphi', z' - s(t))}{\partial (z' - s(t))} \times \right. \\ & \times \frac{\rho'(z - z')}{[\rho^2 + \rho'^2 - 2\rho\rho' \cos(\varphi - \varphi') + (z - z')^2]^{3/2}} d\rho' d\varphi' dz' + \\ & + \frac{\sigma(\rho', \varphi', g(\rho', \varphi')) \rho'(z - s(t) - g(\rho', \varphi'))}{[\rho^2 + \rho'^2 - 2\rho\rho' \cos(\varphi - \varphi') + (z - s(t) - g(\rho', \varphi'))^2]^{3/2}} - \\ & \left. - \frac{\sigma(\rho', \varphi', f(\rho', \varphi')) \rho'(z - s(t) + f(\rho', \varphi'))}{[\rho^2 + \rho'^2 - 2\rho\rho' \cos(\varphi - \varphi') + (z - s(t) + f(\rho', \varphi'))^2]^{3/2}} \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

На следующем шаге возьмем внутренний интеграл частям, выбирая выражение под интегралом без производной по σ по времени u :

$$\begin{aligned} \frac{\partial B_z}{\partial t} = & 4\pi \frac{\partial M_z}{\partial t} + 2M\dot{s} \int_0^R d\rho' \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{s(t)+f(\rho',\varphi')}^{s(t)+g(\rho',\varphi')} \sigma(\rho', \varphi', z' - s(t)) \times \\ & \times \frac{\rho'[2(z - z')^2 - \rho^2 - \rho'^2 + 2\rho\rho' \cos(\varphi - \varphi')]}{[\rho^2 + \rho'^2 - 2\rho\rho' \cos(\varphi - \varphi') + (z - z')^2]^{5/2}} dz'. \end{aligned} \quad (9)$$

Для удобства введем новую переменную $z'' = z' - s(t)$, тогда

$$\begin{aligned} \frac{\partial B_z}{\partial t} = & 4\pi \frac{\partial M_z}{\partial t} + 2M\dot{s} \int_0^R d\rho' \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{f(\rho',\varphi')}^{g(\rho',\varphi')} \sigma(\rho', \varphi', z'') \times \\ & \times \frac{\rho'[2(z - z'' - s(t))^2 - \rho^2 - \rho'^2 + 2\rho\rho' \cos(\varphi - \varphi')]}{[\rho^2 + \rho'^2 - 2\rho\rho' \cos(\varphi - \varphi') + (z - z'' - s(t))^2]^{5/2}} dz''. \end{aligned} \quad (10)$$

Тогда ЭДС-сигнал, генерируемый в катушке, расположенной в точке z , можно рассчитать следующим образом:

$$\begin{aligned} \varepsilon = & -\frac{4\pi}{c} \int_0^{2\pi R_c} \int_0^{2\pi R_c} \frac{\partial M_z}{\partial t} \rho d\rho d\varphi - \frac{2M\dot{s}}{c} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{R_c} d\rho \int_0^R d\rho' \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{f(\rho',\varphi')}^{g(\rho',\varphi')} \sigma(\rho', \varphi', z'') \times \\ & \times \frac{\rho\rho'[2(z - z'' - s(t))^2 - \rho^2 - \rho'^2 + 2\rho\rho' \cos(\varphi - \varphi')]}{[\rho^2 + \rho'^2 - 2\rho\rho' \cos(\varphi - \varphi') + (z - z'' - s(t))^2]^{5/2}} dz''. \end{aligned} \quad (11)$$

Альтернативно можно вернуться к исходной переменной z'

$$\varepsilon = -\frac{4\pi}{c} \int_0^{2\pi R_c} \int_0^{2\pi R_c} \frac{\partial M_z}{\partial t} \rho d\rho d\varphi - \frac{2M\dot{s}}{c} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{R_c} d\rho \int_0^R d\rho' \int_{s(t)+f(\rho',\varphi')}^{s(t)+g(\rho',\varphi')} \sigma(\rho', \varphi', z' - s(t)) \times$$



$$\times \frac{\rho\rho'[2(z-z')^2 - \rho^2 - \rho'^2 + 2\rho\rho'\cos(\varphi - \varphi')]}{[\rho^2 + \rho'^2 - 2\rho\rho'\cos(\varphi - \varphi') + (z-z')^2]^{5/2}} dz'. \quad (12)$$

Эти две формулы должны использоваться в расчетах сигнала.

Сравнение результатов

Найдем условия, которые нужно наложить, чтобы получить из выведенных формул (11) и (12) используемую в литературе формулу из [18].

Нужно сделать следующие допущения:

- 1) ДС движется с постоянной скоростью, то есть $s(t) = z_0 + vt$;
- 2) σ не зависит от ρ' и φ' , то есть $\sigma(\rho', \varphi', z' - s(t)) = \sigma(z' - z_0 - vt)$;
- 3) границы ДС плоские, то есть $f = -h/2$ and $g = h/2$;
- 4) магнитное поле в каждой точке витка катушки одинаково и равно полю в центре катушки, то есть $\rho = 0$;
- 5) пренебрегаем вкладом намагниченности в точке, то есть первым слагаемым в формуле (12).

Тогда уравнение (12) принимает вид

$$\begin{aligned} \varepsilon &= -\frac{4\pi M\dot{s}}{c} \int_0^R \rho d\rho \int_0^R d\rho' \int_0^{2\pi} d\varphi' \times \\ &\times \int_{s(t)+h/2}^{s(t)+h/2} \sigma(z' - z_0 - vt) \frac{\rho'[2(z-z')^2 - \rho'^2]}{[\rho'^2 + (z-z')^2]^{5/2}} dz' = \\ &= -\frac{4\pi MvSR^2}{c} \int_{s(t)-h/2}^{s(t)+h/2} \frac{\sigma(z' - z_0 - vt)}{[R^2 + (z-z')^2]^{3/2}} dz', \end{aligned}$$

где S – площадь поперечного сечения катушки.

Предположение 4 мы находим некорректным и потому настаиваем на использовании новых формул (11) или (12) даже для относительно простых конфигураций.

Более того, как показано в работах [19; 20], наиболее вероятно, что ДС имеет наклонную структуру, а потому предположения 2 и 3 также выглядят сомнительно. Предположение 1 выполняется не для всех нитей, поскольку известно, что существуют нити, в которых ДС движется с ускорением [21]. Предположение 5 выглядит наиболее обоснованным.

Выводы

Предложена новая уточненная формула для расчета сигнала ЭДС, генерируемого на считывающей катушке при прохождении ДС вдоль микронити. Обосновано, почему формула, используемая в литературе ранее, некорректна.

Используя формулы, выведенные в рамках данной статьи, можно оценить геометрические размеры (ширину, длину, наклон) по полу-



ченному сигналу ЭДС, генерируемому на катушке, если имеется информация о форме ДС. Делается это подбором ширины ДС так, чтобы сигнал, регистрируемый на катушке, совпал с вычисляемым по формулам (11) и (12).

Благодарности. Авторы благодарят С.Б. Лебле за постановку задачи, консультации по содержанию статьи и обсуждение результатов.

Список литературы

1. Allwood D., PVthVV R. Cowburn. Magnetic Domain Wall Logic. Wiley, 2010.
2. Zhukov A., Zhukova V. Magnetic Properties and Applications of Ferromagnetic Microwires with Amorphous and Nanocrystalline Structure // Nanotechnology science and technology series. Nova Science Publishers, 2009. 18.
3. Vázquez M. Magnetic Nano- and Microwires: Design, Synthesis, Properties and Applications. Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials. Elsevier Science, 2015.
4. Hayashi M., Thomas L., Rettner C. et al. Dependence of current and field driven depinning of domain walls on their structure and chirality in permalloy nanowires // Phys. Rev. Lett. 2006. №97. 207205.
5. Zhukova V., Blanco J.M., Corte-Leon P. et al. Grading the magnetic anisotropy and engineering the domain wall dynamics in fe-rich microwires by stress-annealing // Acta Materialia. 2018. №155. P. 279–285.
6. Vázquez M., Basheed G., Infante G., Rafael P. Trapping and injecting single domain walls in magnetic wire by local fields // Physical review letters. 2012. №108. 037201.
7. Zhukov A. Domain wall propagation in a fe-rich glass-coated amorphous microwire // Applied Physics Letters. 2001. №78(20). P. 3106–3108.
8. Zhukov A., Ipatov M., Talaat A. et al. Engineering of magnetic properties of co- and fe-rich microwires // IEEE Transactions on Magnetics. 2018. №54(6). P. 1–7.
9. Chiriac H., Óvári T.A., Gh. Pop. Internal stress distribution in glass-covered amorphous magnetic wires // Phys. Rev. B. 1995. №52. P. 10104–10113.
10. Vázquez M., Zhukov A. Magnetic properties of glass-coated amorphous and nanocrystalline microwires // J. Magn. Magn. Mater. 1996. №160. P. 223–228.
11. Aragonese P., Blanco J.M., Dominguez L. et al. The stress dependence of the switching field in glass-coated amorphous microwires // Journal of Physics D: Applied Physics. 1998. №31 (21). 3040.
12. Varga R. Magnetization processes in glass-coated microwires with positive magnetostriction // Acta Physica Slovaca. 2012. №62. P. 411–518.
13. Chizhik A., Zhukov A., Gonzalez J., Stupakiewicz A. Basic study of magnetic microwires for sensor applications: Variety of magnetic structures // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2017. №422. P. 299–303.
14. Chizhik A., Garcia C., Zhukov A. et al. Investigation of helical magnetic structure in co-rich amorphous microwires // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2007. №316 (2). P. 332–336.
15. Stupakiewicz A., Chizhik A., Tekielak M. et al. Direct imaging of the magnetization reversal in microwires using all-moke microscopy // The Review of scientific instruments. 2014. №85.
16. Baraban I., Gorshenkov M., Andreev N. et al. The role of structural properties on magnetic characteristics of glass-coated microwires // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2018. Vol. 459. P. 61–65.



17. Klein P., Richter K., Varga R., Vázquez M. Frequency and temperature dependencies of the switching field in glass-coated fesi₂bcr microwire // Journal of Alloys and Compounds. 2013. №569. P. 9–12.

18. Gudoshnikov S. A., Grebenshchikov Yu. B., Ljubimov B. Ya. et al. Ground state magnetization distribution and characteristic width of head to head domain wall in Fe-rich amorphous microwire // Physica Status Solidi (A) Applications and Materials. 2009. №206 (4). P. 613–617.

19. Vereshchagin M. Structure of domain wall in cylindrical amorphous microwire // Physica B: Condensed Matter. 2018. Vol. 549. P. 91–93.

20. Vereshchagin M., Baraban I., Leble S., Rodionova V. Structure of head-to-head domain wall in cylindrical amorphous ferromagnetic microwire and a method of anisotropy coefficient estimation // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2020. Vol. 504. 166646. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2020.166646>.

Об авторах

Михаил Дмитриевич Верещагин — канд. физ.-мат. наук, доц., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: m.vereshchagin@gmail.com

Александр Викторович Кузыряцкий — магистрант, Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Россия.

E-mail: m.vereshchagin@gmail.com

The authors

Dr Michael D. Vereshchagin, Associate Professor, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: m.vereshchagin@gmail.com

Alexander V. Kuzyryatsky, Master's Student, Immanuel Kant Baltic Federal University, Russia.

E-mail: m.vereshchagin@gmail.com

ТРЕБОВАНИЯ И УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ В ВЕСТНИКЕ БФУ ИМ. И. КАНТА

Правила публикации статей в журнале

1. Представляемая для публикации статья должна быть актуальной, обладать новизной, содержать постановку задач (проблем), описание основных результатов исследования, полученных автором, выводы, а также соответствовать правилам оформления.

2. Материал, предлагаемый для публикации, должен быть оригинальным, не публиковавшимся ранее в других печатных изданиях. При отправке рукописи в редакцию журнала автор автоматически принимает на себя обязательство не публиковать ее ни полностью, ни частично без согласия редакции.

3. Рекомендованный объем статьи для докторантов и докторов наук — 20–30 тыс. знаков с пробелами, для доцентов, преподавателей и аспирантов — не более 20 тыс. знаков.

4. Список литературы должен составлять от 15 до 30 источников, не менее 50 % которых должны представлять современные (не старше 10 лет) публикации в изданиях, рецензируемых ВАК и (или) международных изданиях. Оптимальный уровень самоцитирования автора — не выше 10 % от списка использованных источников.

5. Все присланные в редакцию работы проходят *внутреннее и внешнее рецензирование*, а также проверку системой «Антиплагиат», по результатам которых принимается решение о возможности включения статьи в журнал.

6. Статья на рассмотрение редакционной коллегией направляется ответственному редактору по e-mail. Контакты ответственных редакторов: http://journals.kantiana.ru/vestnik/contact_editorial/

7. Статьи на рассмотрение принимаются в режиме онлайн. Для этого авторам нужно зарегистрироваться на портале Единой редакции научных журналов БФУ им. И. Канта http://journals.kantiana.ru/submit_an_article и следовать подсказкам в разделе «Подать статью онлайн».

9. Решение о публикации (или отклонении) статьи принимается редакционной коллегией журнала после ее рецензирования и обсуждения.

10. Автор имеет право публиковаться в одном выпуске «Вестника Балтийского федерального университета им. И. Канта» один раз; второй раз в соавторстве — в исключительном случае, только по решению редакционной коллегии.

Комплектность и форма представления авторских материалов

1. Статья должна содержать следующие элементы:

1) индекс УДК — должен достаточно подробно отражать тематику статьи (основные правила индексирования по УДК см.: <http://www.naukapro.ru/metod.htm>);

2) название статьи строчными буквами на русском и английском языках (до 12 слов);

3) аннотацию на русском и английском языках (150–250 слов, то есть 500 печатных знаков). Располагается перед ключевыми словами после заглавия;

4) ключевые слова на русском и английском языках (4–8 слов). Располагаются перед текстом после аннотации;

5) список литературы (примерно 25 источников) оформляется в соответствии с ГОСТ Р 7.0.5. — 2008;

7) сведения об авторах на русском и английском языках (Ф. И. О. полностью, ученые степени, звания, должность, место работы, e-mail, контактный телефон);

8) сведения о языке текста, с которого переведен публикуемый материал.

2. Ссылки на литературу в тексте статей даются только в квадратных скобках с указанием номера источника из списка литературы, приведенного в конце статьи: первая цифра — номер источника, вторая — номер страницы (например: [12, с. 4]).

3. Рукописи, не отвечающие требованиям, изложенным в пункте 1, в печать не принимаются, не редактируются и не рецензируются.

Общие правила оформления текста

Авторские материалы должны быть подготовлены *в электронной форме* в формате листа А4 (210 × 297 мм).

Все текстовые авторские материалы принимаются исключительно в формате *doc* и *docx* (Microsoft Office).

Подробная информация о правилах оформления текста, в том числе таблиц, рисунков, ссылок и списка литературы, размещена на сайте Единой редакции научных журналов БФУ им. И. Канта: <http://journals.kantiana.ru/vestnik/monograph/>.

Рекомендуем авторам ознакомиться с информационно-методическим комплексом «Как написать научную статью»: <http://journals.kantiana.ru/authors/imk/>.

Порядок рецензирования рукописей статей

1. Все научные статьи, поступившие в редколлегию Вестника БФУ им. И. Канта, подлежат обязательному рецензированию. Отзыв научного руководителя или консультанта не может заменить рецензии.

2. Ответственный редактор серии определяет соответствие статьи профилю журнала, требованиям к оформлению и направляет ее на рецензирование специалисту, доктору или кандидату наук, имеющему наиболее близкую к теме статьи научную специализацию.

3. Сроки рецензирования в каждом отдельном случае определяются ответственным редактором серии с учетом создания условий для максимально оперативной публикации статьи.

4. В рецензии освещаются следующие вопросы:

а) соответствует ли содержание статьи заявленной в названии теме;

б) насколько статья соответствует современным достижениям научно-теоретической мысли;

в) доступна ли статья читателям, на которых она рассчитана, с точки зрения языка, стиля, расположения материала, наглядности таблиц, диаграмм, рисунков и формул;

г) целесообразна ли публикация статьи с учетом ранее выпущенной по данному вопросу литературы;

д) в чем конкретно заключаются положительные стороны, а также недостатки статьи, какие исправления и дополнения должны быть внесены автором;

е) рекомендуется (с учетом исправления отмеченных рецензентом недостатков) или не рекомендуется статья к публикации в журнале, входящем в Перечень ведущих периодических изданий ВАК.

5. Рецензирование проводится конфиденциально. Автор рецензируемой статьи может ознакомиться с текстом рецензии. Нарушение конфиденциальности допускается только в случае заявления рецензента о недостоверности или фальсификации материалов, изложенных в статье.

6. Если в рецензии содержатся рекомендации по исправлению и доработке статьи, ответственный редактор серии направляет автору текст рецензии с предложением учесть их при подготовке нового варианта статьи или аргументированно (частично или полностью) их опровергнуть. Доработанная (переработанная) автором статья повторно направляется на рецензирование.

7. Статья, не рекомендованная рецензентом к публикации, к повторному рассмотрению не принимается. Текст отрицательной рецензии направляется автору по электронной почте, факсом или обычной почтой.

8. Наличие положительной рецензии не является достаточным основанием для публикации статьи. Окончательное решение о целесообразности публикации принимается редколлегией серии.

9. После принятия редколлегией серии решения о допуске статьи к публикации ответственный секретарь серии информирует об этом автора и указывает сроки публикации.

Текст рецензии направляется автору по электронной почте, факсом или обычным почтовым отправлением.

10. Оригиналы рецензий хранятся в редколлегии серии и редакции «Вестника Балтийского федерального университета им. И. Канта» в течение пяти лет.

Научное издание

ВЕСТНИК
БАЛТИЙСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА
им. И. КАНТА

2020

Серия

Физико-математические и технические науки

№ 3

Редактор *Н. С. Шкутко*. Корректор *В. Н. Ковалев*
Компьютерная верстка *Г. И. Винокуровой*

Подписано в печать 24.12.2020 г.
Формат 70×108 ¹/₁₆. Усл. печ. л. 10,0
Тираж 1000 экз. (1-й завод 42 экз.). Цена свободная. **Заказ**
Подписной индекс 94112

Издательство Балтийского федерального университета им. Иммануила Канта
236022, г. Калининград, ул. Гайдара, 6