Письма в ЖЭТФ, том 101, вып. 9, с. 677 – 682 © 2015 г. 10 мая

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

Д. Н. Макаров, В. И. Матвеев[1)]

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

Поступила в редакцию 10 марта 2015 г.

После переработки 2 апреля 2015 г.

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

DOI: 10.7868/S0370274X15090040

1. Введение. Трудно переоценить значимость рентгеноструктурного анализа, основанного на явлении дифракции рентгеновских лучей на различного рода объектах. При этом кристаллы и наноструктурированные мишени представляют собой естественные дифракционные решетки для рентгеновского излучения. Обычно явление дифракции рентгеновских лучей на различного рода периодических структурах описывается как рассеяние плоских волн бесконечной длительности по времени [1]. Процессы же рассеяния аттосекундных импульсов электромагнитного поля на такого рода структурах до настоящего времени исследованы мало. Вместе с тем подобные процессы могут дополнить рентгеноструктурный анализ возможностями спектроскопии с высоким временным разрешением, связанной в том числе с аттосекундной спектроскопией и аттосекундной метрологией [2–6]. Тем не менее до настоящего времени лишь незначительное количество работ посвящено исследованиям процессов интерференции при рассеянии аттосекундных импульсов различного рода регулярными мишенями. В работах [7–9] развита теория переизлучения аттосекундных импульсов электромагнитного поля произвольными многоатомными системами, составленными из изолированных сложных атомов. Получены угловые распределения спектров переизлучения для произвольного числа атомов в системе. Показано, что при выборе регулярных мишеней процессы интерференции амплитуд излучения фотона приводят к появлению характерных "дифракционных" максимумов. При использовании в качестве мишеней регулярных структур с большим количеством атомов в спектрах перерассеяния доминирующими становятся эффекты интерференции. При этом, подбирая пространственную структуру мишеней и их различные комбинации, можно добиться значительного разделения угловых распределений падающего и рассеянного излучений. В качестве примеров были рассмотрены одномерные, двумерные и трехмерные решетки, а также плоские и цилиндрические конструкции как модели плоских наносистем и нанотрубок. При этом атомы мишени считались жестко связанными и расположенными строго в равновесных положениях. Вместе с тем на явления дифракции аттосекундных импульсов оказывает влияние тепловое хаотическое движение не связанных жестко между собой атомов мишени. Поэтому хотя аттосекундный импульс "застает" атомы мишени в мгновенных положениях, хаотически смещенных от положений равновесия, необходимо учитывать импульсы отдачи при перерассеянии фотонов.

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

[1)]e-mail: mezon98@mail.ru

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

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

2. Влияние тепловых колебаний на спектр переизлучения. Пусть N одинаковых атомов, каждый из которых содержит N_e электронов, расположены на одной прямой линии так, что их равновесные положения (узлы решетки) находятся на равном расстоянии друг от друга. Если первый узел находится в начале системы координат, то каждый последующий смещен относительно предыдущего на расстояние $\mathbf{d}$ вдоль прямой линии. Положение произвольного атома с номером $a = 1, 2, \ldots, N$ относительно этой системы координат будем описывать вектором $\mathbf{R}_a = \mathbf{R}_a^0 + \mathbf{u}_a$, где $\mathbf{R}_a^0 = (a-1)\mathbf{d}$ – радиус-вектор равновесного положения, $\mathbf{u}_a$ – вектор, задающий смещение атома относительно его равновесного положения и направленный по вектору $\mathbf{d}$. Обозначим через $\mathbf{r}_{a,e}$ координаты электрона, принадлежащего атому с номером a, которые отсчитываются относительно ядра этого атома. Тогда $\mathbf{R}_{a,e} = \mathbf{R}_a + \mathbf{r}_{a,e}$ – координаты электрона атома a относительно начала системы координат. Потенциал взаимодействия электронов системы атомов с аттосекундным импульсом электромагнитного поля равен [7]

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

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

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

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

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

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

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

где $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$ – единичный вектор направления вылета фотона, $\mathbf{p} = \mathbf{k} - (\omega/\omega_0)\mathbf{k}_0 = (\omega/c)(\mathbf{n} - \mathbf{n}_0)$ имеет смысл изменения импульса фотона при перерассеянии. Эта формула описывает полный (просуммированный по поляризациям фотона и по всем возможным конечным состояниям электронов атомов системы) спектр излучения фотона частоты ω в телесный угол $d\Omega_{\mathbf{k}}$ (описанный вокруг направления импульса фотона $\mathbf{k}$) в течение времени действия внезапного возмущения $V(t)$. Отметим, что число атомов N в системе произвольно. В частности, при $N = 1$ формула (4) описывает спектр переизлучения одного атома, при $N = 2$ – системы из двух атомов и т.д. (ср. [7, 8]). Напомним, что при произвольных N необходимо следить за выполнением условий внезапности (3).

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

где $\mathbf{i} = \mathbf{d}/d$ – единичный вектор, направленный вдоль цепочки, т.е. по вектору $\mathbf{d}$, а $\langle n^k\rangle_T = (e^{\omega_k/T} - 1)^{-1}$ является средней степенью возбуждения осциллятора частоты ω_k (или средним числом фононов частоты ω_k при температуре T). Рассмотрим сумму в показателе экспоненты выражения (10). Пусть число атомов в цепочке велико. Тогда можно произвести замену $\frac{2}{N}\sum\limits_k \to \frac{1}{\pi}\int\limits_0^\pi dk$. Таким образом, при $N \gg 1$ выражение (10) упрощается:

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

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

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

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

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

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

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

Вернемся к общему выражению (11) для величины $\langle g_N(\mathbf{pd})\rangle$, справедливому для любых температур. Как следует из (11), входящая в показатель экспоненты проекция вектора изменения импульса фотона на направление цепочки ($\mathbf{pi}$) эффективно уменьшает максимальную величину дифракционных пиков, описываемых формулой (13). Именно поэтому величина $\mathbf{pi}$ может быть интерпретирована как импульс отдачи модам нормальных колебаний решетки (фононам) при переизлучении фотона. В качестве примера влияния хаотических тепловых колебаний решетки приведем расчет $\langle g_N(\mathbf{pd})\rangle$ по формуле (11) для линейной цепочки, состоящей из атомов углерода. Параметр γ для такой цепочки можно приближенно оценить, использовав результаты [14]. В этой работе где рассчитана скорость звука в графене и показано, что она зависит от направления распространения звука и от деформации графена. Поэтому мы выбрали несколько значений скорости. Известно, что скорость распространения акустических звуковых волн $v = d\sqrt{\gamma/M}$. Используя v из работы [14], можно найти γ. На рис. 1–3 приведены результаты расчетов $\langle g_N(\mathbf{pd})\rangle$ для линейной цепочки из 30 атомов углерода для трех значений v (5, 10 и 20 км/с) и трех T (0, 300 и 1000 K), для $d = 2.13$ ат.ед. Параметр $\mathbf{pd}$ связан с углом вылета фотона θ соотношением $\mathbf{pd} = (\omega d/c)(\cos\theta - \cos\theta_0)$, где θ_0 – угол падения аттосекундного импульса, отсчитанный от направления цепочки (аналогично отсчитывается и угол вылета θ). Поскольку согласно (11) функция $\langle g_N(\mathbf{pd})\rangle$ является четной, на рис. 1–3 приведены результаты только для $\mathbf{pd} \geq 0$. Видно, что учет колебаний линейной цепочки приводит к большим поправ-

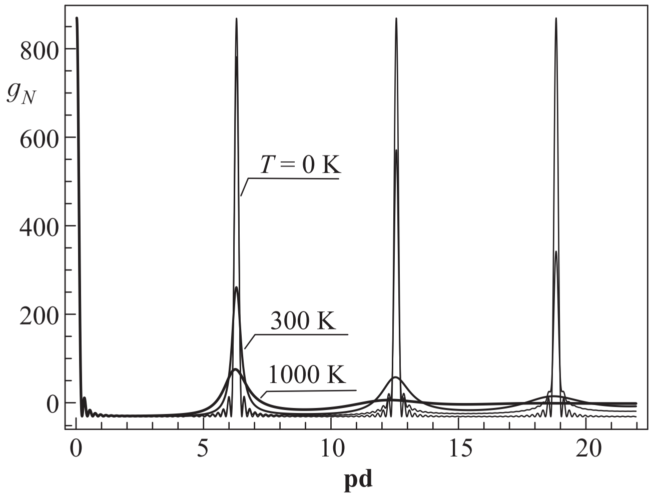

Рис. 1. Зависимости интерференционного фактора $\langle g_N(\mathbf{pd})\rangle$ из формулы (11) от безразмерного параметра $\mathbf{pd}$ при $v = 5$ км/с при трех значениях температуры. Тонкая сплошная линия – результаты расчета без учета тепловых колебаний по формуле (13). Три более толстые сплошные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

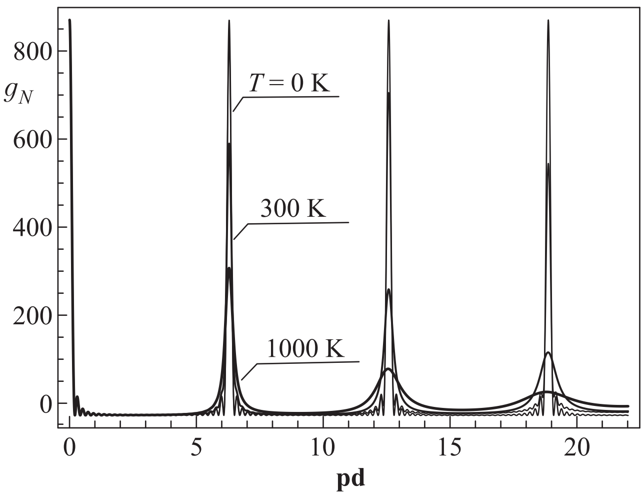

Рис. 2. То же, что на рис. 1, при $v = 10$ км/с

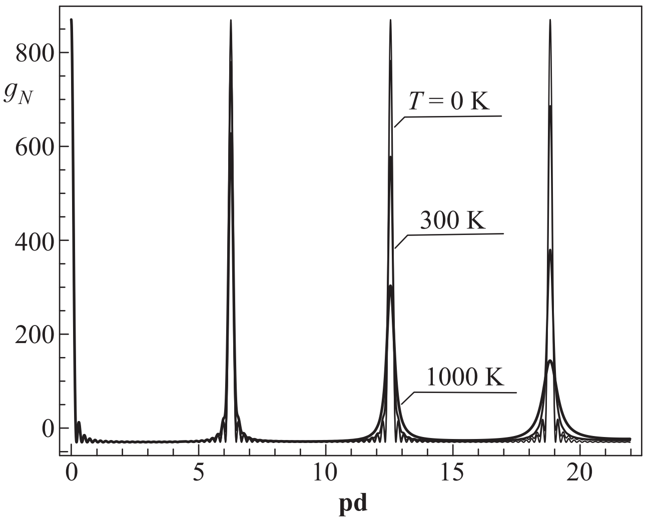

Рис. 3. То же, что на рис. 1, при $v = 20$ км/с

кам к угловым распределениям переизлучаемых фотонов при взаимодействии аттосекундного импульса с цепочкой. Рис. 1–3 приведены в порядке возрастания скорости распространения акустических звуковых волн, непосредственно связанной с жесткостью упругих связей в цепочке. Таким образом, бóльшим значениям v соответствуют бóльшие значения жесткости, а следовательно, меньшая чувствительность интерференционной картины к повышению температуры. Именно это видно из сравнения данных рисунков. На всех рисунках приведены главные пики, центры которых соответствуют значениям **pd**-кратным 2π. В случае цепочки с бесконечной жесткостью в окрестности каждого главного пика при всех температурах присутствует тонкая структура. Как уже отмечалось, в случае $\mathbf{pd} = 0$ при всех температурах отсутствует чувствительность максимального значения соответствующего главного пика к тепловым колебаниям. То же самое справедливо и для малой окрестности, в которой расположена тонкая структура этого пика. Для последующих же главных пиков характерно размытие тонкой структуры по мере роста температуры, обусловленное тепловыми колебаниями. Например, при $T = 300$ К у второго главного пика (при $\mathbf{pd} = 2\pi$) тонкая структура появляется при $v = 20$ км/с тогда как у последующих главных пиков ($\mathbf{pd} = 4\pi, 6\pi, \ldots$) тонкой структуры при этой температуре нет. Если же мы выберем $v = 25$ км/с, то (как показали дополнительные расчеты) тонкая структура будет присутствовать у второго и третьего главных пиков ($\mathbf{pd} = 2\pi, 4\pi$), а если $v = 30$ км/с, то у второго, третьего и четвертого пиков ($\mathbf{pd} = 2\pi, 4\pi, 6\pi$). Таким образом, расчеты по формуле (11) позволяют определить момент появления тонкой структуры. Здесь же мы иллюстрируем лишь характерные особенности.

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

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

где $\mathbf{R}_a^0$ – радиус-вектор равновесного положения атома с номером a в мишени, s – индекс моды нормальных колебаний, $\mathbf{e}_s$ – единичные векторы поляризации перпендикулярные волновому вектору $\mathbf{k}$. В модели одномерной упругой цепочки закон дисперсии фононов сравнительно прост, и нам удалось провести точные расчеты. Как известно, закон дисперсии даже для простейших двумерных и трехмерных систем достаточно сложен. Во многих случаях его можно найти только при численных расчетах конкретной задачи. Поэтому провести расчеты спектров переизлучения можно, лишь выполнив значительно более сложные расчеты, чем в одномерном случае. Отметим, что формула (14) имеет общий характер и может быть применена к произвольным двумерным и трехмерным мишеням. При этом она может быть стандартным образом упрощена. Действительно, частота ω_s находится в знаменателе показателя убывающей экспоненты в (14). Поэтому при суммировании по всем s в выражении (14) наибольший вклад в сумму вносят те слагаемые, в которых значения ω_s закон дисперсии линеен. Следовательно, можно воспользоваться моделью Дебая. Результатом будет широко известная формула [12], описывающая уменьшение высоты дифракционных пиков идеальной решетки с неповижными атомами посредством фактора Дебая–Валлера. При таком описании конечно же, исчезает продемонстрированное на рис. 1–3 уширение пиков, полученное в результате учета дисперсии фононов вплоть до границы зоны Бриллюэна. Однако в рамках модели Дебая в случае различного рода наноструктурированных мишеней можно непосредственно воспользоваться полученными в работе [9] результатами для ряда плоских и цилиндрических конструкций как моделей плоских наносистем и нанотрубок.

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

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

$$\langle g_N(\mathbf{pd})\rangle = \sum_{a,b(a\neq b)} \sum_m e^{-i\mathbf{pd}(a-b)} \times$$
$$\times \langle \phi_m \mid p_m \prod_{k,\alpha} e^{-iA_k^\alpha Q_k^\alpha} \mid \phi_m\rangle. \qquad (\Pi 1)$$

Здесь

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

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

$$\langle g_N(\mathbf{pd})\rangle = \sum_{a,b(a\neq b)} \sum_m e^{-i\mathbf{pd}(a-b)} p_m \times$$
$$\times \prod_{k,\alpha} L_{m_k^\alpha}\left(\frac{A_k^{\alpha 2}}{2\omega_k}\right) e^{-\frac{A_k^{\alpha 2}}{4\omega_k}}, \qquad (\Pi 3)$$

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

$$\sum_{m=0}^{\infty} q^m L_m(x) = \frac{1}{1-q}\exp\frac{xq}{q-1}. \qquad (\Pi 4)$$

В итоге получим

$$g_N(\mathbf{pd}) = \sum_{a,b(a\neq b)} e^{-i\mathbf{pd}(a-b)} \times$$
$$\times \prod_{k,\alpha} \exp\left[-\frac{A_k^{\alpha 2}}{4\omega_k}(2\langle n^k\rangle_T + 1)\right], \qquad (\Pi 5)$$

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

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