

Є. БІЛОЦЬКИЙ, П. ТОМЧУК

Інститут фізики НАН України
(Просп. Науки, 46, Київ 03028; e-mail: yevgen.bilotsky@gmail.com)**НОВИЙ МЕХАНІЗМ ФОКУСУВАННЯ
ТА ПІДСИЛЕННЯ АКУСТИЧНИХ ХВИЛЬ,
ЩО ГЕНЕРУЮТЬСЯ МЕТАЛЕВИМИ
НАНОЧАСТИНКАМИ В КРИСТАЛІЧНІЙ ҐРАТЦІ**

УДК 539

Ми обговорюємо можливий механізм фокусування та підсилення акустичних хвиль, які генеруються металевими наночастинками, вбудованими у кристалічну ґратку, під дією ультракороткого лазерного збудження. На відміну від моделей неперервного середовища, дискретна ґраткова структура зумовлює появу осциляційних хвостів хвиль, які виникають позаду фронту поширення внаслідок порушення принципу Гюйгенса у просторах парної розмірності. Атомна динаміка може розглядатися як еволюція у шестивимірному просторі конфігурацій, де неперервна компонента фізичного простору описує внутрішньокміркові зміщення, а дискретні індекси визначають положення елементарних комірок. Цей ефект може приводити до локального підсилення амплітуди подовжених акустичних хвиль у вибраних вузлах кристалічної ґратки без збільшення інтенсивності збуджувального лазерного імпульсу.

Ключові слова: наночастинки, генерування та фокусування акустичних хвиль, принцип Гюйгенса.

1. Вступ

Металеві наночастинки, що знаходяться в діелектричних кристалах та збуджуються ультракороткими лазерними імпульсами, привернули значну увагу як потенційні локалізовані джерела когерентних акустичних хвиль. Взаємодія таких хвиль з ґраткою матриці становить інтерес для нанорозмірної локалізації енергії, надшвидкої обробки сигналів та проектування функціональних акустичних метаматеріалів.

У суцільних середовищах поширення хвиль у непарновимірних просторах як правило пов'язане з принципом Гюйгенса, згідно з яким збурення залишаються обмеженими фронтом поширення за відсутності інерційних коливань. Однак експериментальні та теоретичні дані свідчать про те, що в ре-

альних кристалах з дискретними атомними структурами довговічні коливальні хвилі можуть зберігатися позаду основного імпульсу. Це вказує на фундаментальну відмінність від прогнозів, що дають континуальні моделі, та свідчить про необхідність уточненого теоретичного опису.

Одне з можливих пояснень полягає в гібридній дискретно-неперервній природі кристалічних ґраток. Рух атомів можна розглядати як такий, що відбувається в конфігураційному просторі $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{Z}^3$, де неперервна частина представляє внутрішньокміркові зміщення, а дискретні індекси відповідають положенням елементарних комірок. Таке розширене описання змінює характеристики поширення хвиль та може допомогти пояснити спостережані відхилення від принципу Гюйгенса. У цій концепції залишкові інерційні хвилі відкривають можливість для фокусування акустичної енергії за допомогою фазового керування кількома джерелами наночастинок, потенційно без збільшення інтенсивності лазерного імпульсу.

У наступних розділах описано математичну модель динаміки дискретної ґратки, обговорено, як може виникнути цей ефект фокусування, та розглянуто наслідки для керування енергією на на-

Цитування: Білоцький Є., Томчук П. Новий механізм фокусування та підсилення акустичних хвиль, що генеруються металевими наночастинками в кристалічній ґратці. *Укр. фіз. журн.* **70**, №9, 681 (2025).

© Видавець ВД "Академперіодика" НАН України, 2025. Стаття опублікована за умовами відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

норівні. Також відмічено зв'язки з попередніми підходами до рівнянь дискретних хвиль, гібридними конфігураційними просторами та формалізмом Бейтмена для коливальних розв'язків.

Розглянемо сферичну металеву наночастинку (НЧ), занурену в довкілну речовину (ДР). Лазерний імпульс, що діє на НЧ, може підвищити температуру її електронної підсистеми, і підсистема може різко розширитися, генеруючи звукові хвилі в ДР. Механізм генерації поздовжніх акустичних хвиль через тиск гарячого електронного газу в металевих наночастинках був запропонований П. Томчуком [1],

$$\Delta p_e = p_0 \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T_e}{\varepsilon_F} \right)^2. \quad (1)$$

Граничною умовою для основного рівняння є рівність між додатковим тиском гарячого електронного газу та поверхневою енергією НЧ,

$$\Delta p_e(t) = \frac{2\rho_s}{a^2} \xi(t), \quad (2)$$

Густина поверхневої енергії НЧ позначається як ρ_s , a – це радіус частинки, а ξ – радіальне зміщення її поверхні. Час встановлення електронної температури становить

$$\tau_e \sim 10^{-12}. \quad (3)$$

Час, необхідний для вирівнювання електронної температури з температурою ґратки в об'ємі метала, становить

$$\tau_{e-ph} \sim 10^{-10}. \quad (4)$$

Часові пульсації електронної температури наночастинки викликають коливання тиску в навколишньому діелектрику, генеруючи акустичні хвилі. Поширення поздовжньої хвилі в континуальному наближенні описується рівнянням

$$\nabla^2 \mathbf{u} - \frac{1}{s_l^2} \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = 0, \quad (5)$$

де \mathbf{u} – це вектор зміщення. Для поздовжньої хвилі можна ввести скалярний потенціал ψ таким чином, що

$$\mathbf{u} \triangleq \nabla \psi, \quad (6)$$

де ψ – це розв'язок рівняння

$$\nabla^2 \psi - \frac{1}{s_l^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0, \quad (7)$$

задовольняє граничну умову

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial r} \right|_{r=a} = \frac{a^2}{2\rho_s} \Delta p_e(t). \quad (8)$$

У цій моделі збудження НЧ, у матриці генерується поздовжня акустична хвиля, яка коливається на характерній частоті НЧ. Розв'язок відповідної задачі Коші має вигляд

$$\psi = -\frac{s_l a}{r} \exp \left\{ -\frac{s_l}{a} \left[t - \frac{r-a}{s_l} \right] \right\} \times \int_{-\infty}^{t - \frac{r-a}{s_l}} \exp \left(s_l \frac{t_1}{a} \right) \xi(t_1) dt_1. \quad (9)$$

Припускається, що коливання починаються у заданий початковий момент часу.

Метою цього дослідження є визначення умов, за яких акустична хвиля, що генерується НЧ у твердій матриці під впливом лазерного опромінення, може бути сфокусована та посилена. Розв'язок (9) не відповідає цій меті з двох причин. По-перше, аналіз поширення акустичної хвилі вимагає відходу від наближення континууму. По-друге, режим збудження потрібно переглянути з альтернативної точки зору, зокрема, такої, в якій збудження здійснюється точно синхронізованими фемтосекундними лазерними імпульсами. Обґрунтування цих умов буде надано в наступних розділах.

Генерація акустичних хвиль ультракороткими лазерними імпульсами передбачає швидке розширення фермі-газу в НЧ з піко-фемтосекундних часових масштабах. Це розширення чинить тиск на навколишні атоми матриці; отже, сумарний різкий імпульс тиску, що походить від НЧ, можна розглядати як додаткову силу, що діє на вільний атом.

Принцип Гюйгенса стверджує, що початковий стан з чітко визначеною просторовою локалізацією пізніше проявляється в іншому місці як ефект, однаково обмежений у просторі та часі. Примітно, що цей принцип діє лише в просторах непарної розмірності. Як буде показано, дотримання принципу Гюйгенса виключає побудову запропонованої тут схеми фокусування акустичних хвиль.

Це обмеження принципово змінюється, коли ми відмовляємося від континуального наближення для руху атомів матриці. Іншими словами, замість використання хвильового рівняння (7), яке ігнорує дискретну природу руху атомів, необхідно повернутися до рівняння, що описує динаміку на дискретній ґратці.

2. Генерація акустичних хвиль ультракороткими лазерними імпульсами та порушення принципу Гюйгенса в ґраткових системах

Генерація акустичних хвиль ультракороткими лазерними імпульсами передбачає швидке розширення фермі-електронного газу всередині НЧ, що відбувається в часових масштабах від фемто- до піко-секунд. Це розширення генерує перехідні електричні поля, які чинять тиск на навколишні атоми матриці. Результируючий різкий імпульс тиску можна розглядати як додаткову силу, що діє на вільний атом, ініціюючи коливання ґратки та поширення акустичних хвиль.

Щоб точно описати цей процес, ми повинні розглянути структуру та динаміку кристала на атомному рівні. Система атомів у кристалі, враховуючи як їх дискретні положення в ґратці, так і їх тривимірні зміщення, природним чином описується в просторі

$$\mathcal{L} = \{(a, b, c) \in \mathbb{Z}^3, \mathbf{u}_{a,b,c} \in \mathbb{R}^3\}, \quad (10)$$

де комбінація (a, b, c) позначає дискретні атомні позиції, а $\mathbf{u}_{a,b,c}$ – це вектори фізичних зміщень цих атомів у звичайному евклідовому просторі \mathbb{R}^3 . Простір \mathcal{L} не є шестивимірним у жодному фізичному сенсі; радше, це структуроване представлення, яке відокремлює дискретну геометрію кристалічної ґратки від тривимірної кінематики руху атомів.

Введення простору ґратка-зміщення є не наближенням, а уточненням фізичного опису. На відміну від рівняння континуальної хвилі в \mathbb{R}^3 , яке згладжує атомну дискретність і тим самим забезпечує принцип Гюйгенса (тобто поширення різких хвильових фронтів), дискретне формулювання по суті вводить ефекти дисперсії та розсіювання, порушуючи цей принцип. Це порушення уможливорює такі режими поширення хвиль, які не можуть

виникнути в чисто континуальній моделі, наприклад, кероване фокусування хвиль ґратки.

У континуальному середовищі локалізоване спочатку збурення поширюється лише по поверхні світлового (або звукового) конуса без внутрішніх коливань, тоді і тільки тоді, коли розмірність простору непарна. Навпаки, в дискретній ґратці кожен атомний вузол підпорядковується ньютонівським рівнянням руху, пов'язаним з сусідами цього вузла, створюючи групові швидкості та внутрішні відбиття, що залежать від частоти. Ця дисперсія усуває точну причину різкості фронту, передбачену рівнянням континуальної хвилі, тим самим спростовуючи принцип Гюйгенса на масштабі ґратки.

Таким чином, простір ґратка-зміщення не вводить штучних вимірів, а натомість зберігає справжню мікроскопічну динаміку, яку континуальне наближення обов'язково порушує. Як буде показано, ця дискретна структура дає змогу використовувати стратегії маніпулювання хвилями, такі як акустичне фокусування, які недоступні за обмежень, що накладаються принципом Гюйгенса в моделі континууму.

3. Рівняння руху атома в тривимірній кристалічній ґратці

Розглянемо класичне рівняння руху атома в тривимірній кристалічній ґратці, враховуючи взаємодію з найближчими атомами в гармонічному наближенні [2]. Для простоти ми припускаємо нескінченну просту кубічну, ізотропну ґратку з гармонічною взаємодією між найближчими сусідами. Тоді рівняння руху має вигляд

$$\frac{d^2 \mathbf{u}(t)_{a,b,c}}{dt^2} = k^2 \cdot \left\{ \mathbf{u}(t)_{a+1,b,c} + \mathbf{u}(t)_{a-1,b,c} + \mathbf{u}(t)_{a,b+1,c} + \mathbf{u}(t)_{a,b-1,c} + \mathbf{u}(t)_{a,b,c+1} + \mathbf{u}(t)_{a,b,c-1} \right\} - k^2 \cdot \{6 \cdot \mathbf{u}(t)_{a,b,c}\}, \quad (11)$$

де $k^2 = \frac{1}{m} \frac{d^2 U(x)}{dx^2} \Big|_{x=d}$, m – це маса атома, а $\frac{d^2 U(x)}{dx^2} \Big|_{x=d}$ – це друга похідна міжатомного потенціалу, обчисленого на рівноважній відстані d . Для руху атома без вихрив ми вводимо скалярний потенціал такий, що

$$\mathbf{u} = \nabla \varphi. \quad (12)$$

Підставляючи це в рівняння (11), ми бачимо, що φ задовольняє точно таку саму форму дискретного лапласіана,

$$\frac{d^2\varphi(t)_{a,b,c}}{dt^2} = k^2 \left\{ \varphi(t)_{a+1,b,c} + \varphi(t)_{a-1,b,c} + \varphi(t)_{a,b+1,c} + \varphi(t)_{a,b-1,c} + \varphi(t)_{a,b,c+1} + \varphi(t)_{a,b,c-1} \right\} - k^2 \{6\varphi(t)_{a,b,c}\}. \quad (13)$$

4. Роздільні моди та розв'язок Коші

Рівняння (13) допускає сепарабельні розв'язки вигляду

$$\varphi_{p,q,r}(t) = X_{p-l}(t) \cdot Y_{q-m}(t) \cdot Z_{r-n}(t), \quad (14)$$

Вони являють собою нормальні моди, що коливаються незалежно вздовж кожної осі ґратки. Це відповідає взаємодіям виключно вздовж осей у кристалічному базисі. Повна задача Коші з довільними початковими зміщеннями та швидкостями була розв'язана у замкнутому вигляді Бейтменом [3]. Розв'язок вбудовує тривимірну ґратку у каркас із більшою розмірністю, створюючи явний вираз

$$\varphi_{l,m,n}(t) = F(l, m, n, t; \varphi(0), \varphi'(0)), \quad (15)$$

де F визначається цим формалізмом. Фізично це означає, що дискретна структура ґратки порушує принцип Гюйгенса, генеруючи стійкі "інерційні хвилі".

Розв'язок задачі Коші для рівняння (12) з заданими початковими даними $\varphi_{l,m,n}(0)$ та $\varphi'_{l,m,n}(0)$ можна записати у вигляді

$$\varphi(t)_{p,q,r} = \sum I_{p,q,r;l,m,n}(t) \varphi(0)_{l,m,n} + \sum_0^t \int_0^\pi I_{p,q,r;l,m,n}(t_1) \varphi'(0)_{l,m,n} dt_1, \quad (16)$$

де підсумовування проводиться за всіма вузлами ґратки $(l, m, n) \in \mathbb{Z}^3$. Ядро $I_{p,q,r;l,m,n}(t)$ допускає явне факторизоване представлення

$$I_{p,q,r;l,m,n}(t) = \frac{1}{4\pi} \frac{d}{dt} \times \left\{ t \int_0^{2\pi} \left[\int_0^\pi A(t, \theta, \alpha)_{p,q,r;l,m,n} \sin(\theta) d\theta \right] d\alpha \right\}, \quad (17)$$

де

$$A(t, \theta, \alpha)_{p,q,r;l,m,n} = J_{2(p-l)}(2kt \sin(\theta)) \times \cos(\alpha) J_{2(q-m)}(2kt \sin(\theta)) \times \sin(\alpha) J_{2(r-n)}(2kt \cos(\theta)), \quad (18)$$

а J_ν позначає функцію Бесселя першого роду, яка допускає інтегральне представлення

$$J_{2(p-l)}(2kt) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(2kt \sin(\phi) - 2(p-l)\phi) d\phi. \quad (19)$$

Таким чином, форма роздільного добутку $\varphi_{p,q,r}(t) = X_{p-l}(t)Y_{q-m}(t)Z_{r-n}(t)$ є окремим розв'язком рівняння (12), а вираз (13) з ядрами (14)–(16) представляє загальний розв'язок задачі Коші, дійсний для довільних початкових зміщень та швидкостей на нескінченній простій кубічній ізотропній ґратці з гармонічною взаємодією найближчих сусідів.

Динаміка ґратчастої структури найприродніше формулюється не у звичайному 3D-просторі, а в гібридному конфігураційному просторі $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{Z}^3$, де неперервна компонента \mathbb{R}^3 описує переміщення атомів всередині елементарної комірки, а дискретна компонента \mathbb{Z}^3 індексує комірки ґратчастої структури. Таке шестивимірне вбудовування робить явною сепарабельність вздовж кристалграфічних осей. Однак у парновимірних просторах принцип Гюйгенса не працює: за хвильовими фронтами завжди йде дисперсійний коливальний шлейф, навіть для початково локалізованих збуджень.

5. Фокусування акустичних хвиль

Наявність коливального хвоста за звуковим фронтом може бути використана для створення пристроїв, які генерують самофокусуєчу акустичну хвилю. Зокрема, генеруючи акустичні хвилі в такій послідовності, що їхні екстремуми сходяться в певній точці простору одночасно, амплітуду коливань у цій точці можна збільшити. Нехай хвильовий фронт рухається від точки його генерації до певної точки простору за час t_0 . Потім екстремуми від інших імпульсів слідують з підбраною затримкою Δt_i , так що вони досягають однієї й тієї ж

точки одночасно. Отже, потенціал хвиль у заданій точці простору, як визначено за формулою

$$\bar{\varphi}(t_0, N)_{p,q,r,m,r,n} \equiv \sum_{i=0}^N \varphi(t_0 - \Delta t_i)_{p,l,q,m,r,n}, \quad (20)$$

$$\Delta t_0 = 0$$

може значно перевищувати потенціал, що генерується одним імпульсом. Час затримки перед надсиланням наступного імпульсу залежить як від координат точки генерації імпульсу, так і від точки спостереження. Щоб уникнути зайвої складності формул, ми зберігаємо позначення часової затримки, як представлено у виразі (20), розуміючи, що Δt_i є функцією індексів p, l, q, m, r , та n . Наприклад, розглянемо результат дії послідовності імпульсів, згенерованих одним атомом матриці, припускаючи, що на атом діяло зовнішнє джерело енергії. Ця послідовність вибрана таким чином, що амплітуда коливань атома в полі акустичної хвилі збільшується з часом у вибраній точці спостереження. На рис. 1 порівнюються потенціали, створені однією згенерованою хвилею або чотирма послідовними хвилями, згенерованими за формулою (20).

Нарешті, користуючись потенціалами (20) можна розрахувати зміщення хвилі. Наприклад, якщо ми введемо компоненту зміщення вздовж одного з базисних векторів ґратки, як показано в рівнянні

$$v(t, a)_{p,l,q,m,r,n} = \frac{\varphi(t)_{p+a,l,q,p,l,q} - \varphi(t)_{p-a,l,q,p,l,q}}{2a} \approx$$

$$\approx \frac{1}{2a} \frac{\partial (\varphi(t)_{p+a,l,q,p,l,q} - \varphi(t)_{p-a,l,q,p,l,q})}{\partial a} +$$

$$+ \dots \xrightarrow{a \rightarrow 0} v(t, p, l, q)_c, \quad (21)$$

де a позначає сталу ґратки, а c означає неперервне наближення, застосоване в межах кристалічної ґратки. Таке уявлення про зміщення хвилі всередині ґратки узгоджується з виразом для зміщення хвилі в континуумі, як показано в цьому рівнянні, де змінну p можна вважати неперервною. Принципова відмінність у визначенні зміщення руху атома в ґратці за допомогою рівняння (13) порівняно з рівнянням (21) полягає в тому, що перше враховує зміщення окремого атома, а друге – різницю в зміщенні сусідніх атомів. Уявімо собі сценарій, де всі атоми рухаються з однаковим зміщенням. У

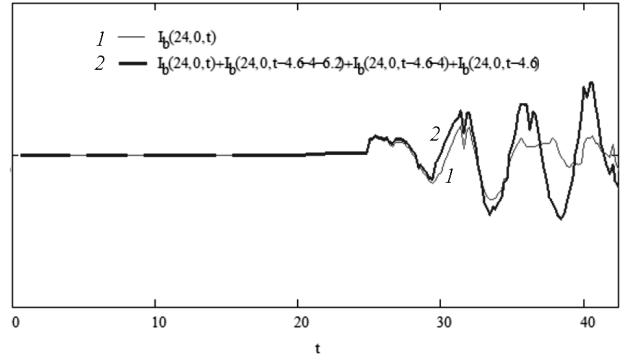


Рис. 1. Крива 1 ілюструє зміну хвильового потенціалу з часом для однієї згенерованої хвилі, а крива 2 – для чотирьох згенерованих хвиль, як описано у формулі (20)

цьому випадку хвилі не було б; натомість був би процес, еквівалентний переходу до системи координат, що рухається зі зміщенням u . В останньому випадку $v(t, a)_{p,l,q,m,r,n} = 0$, оскільки всі атоми мають однаковий потенціал і, отже, однакове зміщення.

6. Одновимірний випадок

Нехай хвиля поширюється вздовж кристалічної осі кубічного кристала з примітивним базисом, що складається з одного атома. Оскільки всі атомні площини зміщені синфазно, достатньо розглянути одновимірний ланцюжок атомів. Цю модель використовував Хейвлок [2] для вивчення поширення періодичної хвилі в кристалі та визначення дисперсійних співвідношень. Рівняння, що описують рух атома вздовж базового вектора в гармонічному наближенні з початковою умовою ненульового зміщення для цього атома, мають вигляд

$$\frac{d^2 u_p}{dt^2} = k^2 (u_{p-1} - 2u_p + u_{p+1}), \quad p \geq 2, \quad (22)$$

$$u_{p=0}(0) \neq 0, \quad u_{p>0}(0) = 0.$$

Розв'язком цієї задачі є відома функція [3]

$$u(t)_{p-l} = J_{2(p-l)}(2kt). \quad (23)$$

Подібно до тривимірного явища, можна збільшити амплітуду коливань у певній точці, генеруючи акустичні хвилі в такій послідовності, щоб їхні піки досягали однієї й тієї ж точки простору одночасно. Розглянемо таку послідовність імпульсів: перший імпульс сприяє руху фронту імпульсу,

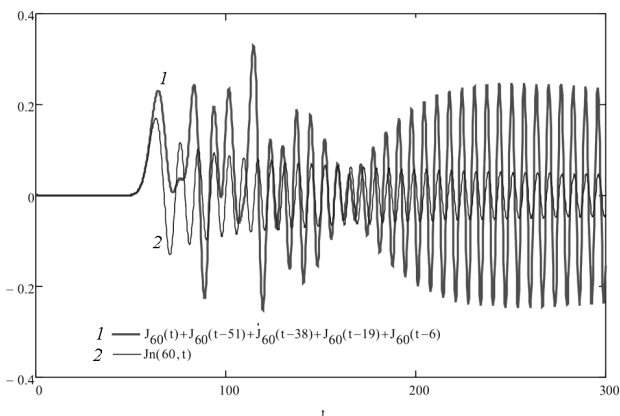


Рис. 2. Порівняння хвиль, згенерованих п'ятьма послідовними імпульсами однакової початкової амплітуди (крива 1) та одним імпульсом еквівалентної амплітуди (крива 2). Найменша відстань між атомами визначається як одиниця довжини, а час, необхідний для проходження хвильового фронту між двома найближчими атомами в діелектричній матриці, визначається як одиниця вимірювання часу

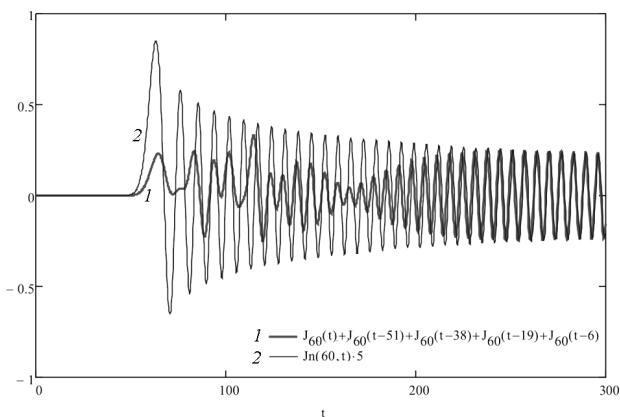


Рис. 3. Крива 2 зображує серію з п'яти імпульсів, а крива 1 – один імпульс з амплітудою, яка в п'ять разів більша за амплітуду кожного імпульсу в серії

ініційованому із затримкою $t_0 - \Delta t_N$, а наступні імпульси пов'язані з дією хвиль, що йдуть за фронтом. Важливо, щоб усі значення в даній точці досягали свого максимуму та мінімуму одночасно. Цей механізм за своєю суттю приводить до збільшення амплітуди коливань. Кумулятивна дія набору N імпульсів посилює сумарний сигнал майже в N разів,

$$\bar{J}(t_0, N)_{p-l} \equiv \sum_{i=0}^N J_{2(p-l)}(2k(t_0 - \Delta t_i)), \quad (24)$$

$$\Delta t_0 = 0.$$

На рис. 2 порівнюється послідовність із 5 імпульсів з однаковою початковою амплітудою та один імпульс із тією ж амплітудою. Рис. 3 відрізняється від попереднього тим, що початкова амплітуда одиничного імпульсу (крива 2) у п'ять разів більша за амплітуду кожного окремого імпульсу (крива 1) у серії з п'яти імпульсів.

7. Висновки

У статті показано, що система металевих наночастинок у діелектричній матриці може генерувати поздовжні акустичні хвилі в ґратці, амплітуду яких можна збільшити в певній точці матриці без збільшення інтенсивності лазерних імпульсів. Цей ефект виникає через два ключові фактори:

- (i) математичне порушення принципу Гюйгенса через дискретно-неперервний зв'язок та
- (ii) унікальні фізичні властивості металевих наночастинок.

Математичний фактор пов'язаний з порушенням принципу Гюйгенса в межах розшарованого простору, утвореного прямим добутком тривимірного фізичного простору та дискретного простору індексів ґратки. У цій розширеній структурі за хвильовим фронтом слідує коливальний хвіст внаслідок зв'язку між неперервними та дискретними координатами. Завдяки ретельному вибору часу генерації кожного акустичного імпульсу таким чином, щоб їхні екстремуми збігалися як просторово, так і часово у вибраній точці, конструктивна інтерференція може значно посилити загальну амплітуду цих коливань.

Інший фактор стосується унікальних властивостей металевих наночастинок. Збудження електронної підсистеми цих частинок може привести до таких ефектів, як емісія електронів за температур вище 8000 К, а також випромінювання світла гарячими електронами на частотах на порядок вищих, ніж частоти надхідного лазерного променя¹.

Як показано в публікаціях [2, 5–8], константи електрон-фононної взаємодії гарячих електронів у металевих наночастинках спричиняють зменшення цього явища на порядок порівняно з об'ємним металом. Як результат, електрон-фононна система може залишатися у стаціонарному, нерівнова-

¹ Це – новий механізм фокусування та підсилення акустичних хвиль, що генеруються металевими наночастинками в кристалічній ґратці.

жному стані протягом $10^3 - 10^4$ год без плавлення або руйнування наночастинок, за умови постійної зовнішньої підтримки нерівноважного стану. Без цієї підтримки термодинамічна рівновага електрон-фононої системи досягається протягом десятка фемтосекунд.

Нагадаємо, що температура електронного газу у наночастинках може досягати тисяч градусів. Така ситуація не спостерігається в об'ємному металі, де електрон-фононна система досягає рівноваги протягом 10^{-10} с. Тобто, можна досягти бажаної інтенсивності акустичної активності в заданій точці кристала, опромінюючи систему металевих наночастинок послідовністю ультракоротких лазерних імпульсів. Ці імпульси повинні мати достатню потужність для генерації наночастинок акустичних хвиль, але меншу за потужність, яка б зруйнувала ці наночастинок. Крім того, між імпульсами повинен бути інтервал, щоб забезпечити охолодження наночастинок. Це дає підстави розглядати систему металевих наночастинок як відповідний інструмент для генерації послідовності акустичних хвиль, що й обговорюється в цій статті.

Слід зазначити, що якщо час впливу імпульсу від гарячого електронного газу наночастинок на атоми діелектричної матриці значно менший за час, необхідний для зміщення атомів на інтервал інтегрування, то рівняння (16) можна записати таким чином:

$$\varphi(t)_{p,q,r} \cong \sum \varphi'(0)_{l,m,n} \int_0^t I_{p,q,r;l,m,n}(t_1) dt_1, \quad (25)$$

а для

$$\varphi'(t)_{p,q,r} \cong \sum \varphi'(0)_{l,m,n} I_{p,q,r;l,m,n}(t) \quad (26)$$

можна застосувати розрахунки, наведені вище для зміщення потенціалу.

Запропонований механізм фокусування та посилення акустичних хвиль забезпечує новий шлях до контролю локалізації енергії в структурованих середовищах. Одночасно концентруючи та посилюючи енергію хвиль, він дає змогу покращити маніпулювання поширенням хвиль як у фундаментальних дослідженнях, так і у прикладних технологіях.

Зауваження щодо додатків та позначень

Для підвищення фізичної прозорості та ширшого застосування нашої моделі ми включаємо три додатки. Вони забезпечують розширений контекст та

технічну глибину з тих питань, які не були повністю розглянуті в основному тексті. Зокрема, вони стосуються:

(i) обґрунтування моделювання акустичних хвиль за допомогою скалярних потенціалів у кубічних кристалах (Додаток А);

(ii) напівдискретного формулювання хвильового оператора на 3D-ґратці (Додаток В);

(iii) потенціала для розширення поточного лінійного аналізу на слабонелінійні режими за допомогою пертурбативних методів (Додаток С).

З фізичної точки зору, кристалічна ґратка має дискретну групу симетрії, відмінну від неперервної симетрії порожнього простору. Через цю дискретну трансляційну симетрію дозволені лише зсуви на відстані, кратні векторам базису ґратки, що відображає принципово іншу структуру, ніж у системах з неперервною симетрією. Перехід до розширеного простору, який поєднує тривимірні фізичні координати з дискретними індексами ґратки, тому не є евристичним наближенням, а математично послідовним та фізично мотивованим кроком. Отриманий шестивимірний простір слід розглядати не як розширення евклідового простору, а радше як гібридний конфігураційний простір. Це є прямою аналогією класичному фазовому простору, який об'єднує координати положення та імпульсу. Так само наш 6D-простір об'єднує просторові координати з індексами ґратки, щоб охопити повну динаміку хвилі в кристалі.

Цей підхід відображає ті ж принципи вбудовування та відтворює внутрішню природу хвильових явищ у кристалічних структурах, де взаємодія між неперервними та дискретними змінними принципово змінює динаміку поширення. До того ж, проходження хвильового фронту через вузол ґратки супроводжується фазовим стрибком: конфігурація силових взаємодій змінюється, коли нові атоми починають рухатися. Такий вид динаміки вимагає апарату узагальнених функцій, хоча ця тема виходить за рамки цієї роботи.

ДОДАТОК А

Незначний поперечний внесок у квазіпоздовжні хвилі

Визначення. Квазіпоздовжня хвиля – це власна акустична мода, в якій вектор поляризації \mathbf{u} переважно спрямований у напрямку поширення хвилі \mathbf{n} , хоча й не зовсім паралельний через пружну анізотропію.

Під час моделювання динаміки ґратки та поширення акустичних хвиль у кубічних кристалах ми наближено вважаємо, що поле зміщень \mathbf{u} можна отримати зі скалярного потенціалу ϕ через рівняння $\mathbf{u} = \nabla\phi$. Це означає, що рух хвилі є по суті поздовжнім, і це є добре підтвердженим наближенням, заснованим на експериментальних даних.

В анізотропних пружних середовищах, таких як кубічні кристали, власні моди рівняння Крістоффеля не є строго поздовжніми чи поперечними, за винятком напрямків з високою симетрією. Однак, для квазіпоздовжніх мод поперечна складова є постійно малою. На підтвердження цього маємо такі докази:

1. Дослідження розсіювання Бріллоена в кремнії та германії показують, що квазіпоздовжні моди містять менше ніж 5% від поперечної поляризації в більшості напрямків.

2. Фононна візуалізація в лужних металах (наприклад, Li, Na, K) вказує на те, що квазіпоздовжні хвилі залишаються переважно поздовжніми. Хоча квазіпоздовжні моди можуть мати до 15% поздовжньої домішки, протилежне співвідношення маловірогідне.

3. Теоретичний аналіз тензора Крістоффеля для кубічної симетрії підтверджує, що вектор поляризації квазіпоздовжніх мод залишається майже спрямованим вздовж \mathbf{k} по всій зоні Бріллоена, за винятком ізольованих вироджених напрямків [9]. Тому представлення поля акустичного зміщення в термінах скалярного потенціалу є дійсним та експериментально обґрунтованим спрощенням під час моделювання квазісферичних хвильових фронтів у кубічних ґратках.

ДОДАТОК В

Ми розрізняємо фізичний простір, де поширюються акустичні збурення, та математичний простір, в якому формулюється задача. Фізично хвилі еволюціонують у тривимірній евклідовій ґратці. Однак математично рівняння, що визначають дискретне поле атомних зміщень, природно приводять до розширеного конфігураційного простору – добутку фізичного континууму \mathbb{R}^3 та дискретного індексного простору \mathbb{Z}^3 , що позначає вузли ґратки. У цьому розширеному просторі поведінка хвиль формується не лише фізичною геометрією, але й додатковою дискретною структурою. Поява коливальних “хвостів” за хвильовим фронтом та порушення принципу Гюйгенса безпосередньо впливають з цього дискретно-неперервного зв’язку, а не лише з просторової геометрії. Наші розрахунки визначають умови фокусування акустичних хвиль як для сферичних, так і планарних хвильових форм.

Пряма експериментальна перевірка цих шестивимірних ефектів ще не доступна, але аналогічні явища з’являються у пов’язаних контекстах:

- пучки Бесселя (оптичні та акустичні), що керуються функціями Бесселя, демонструють характерні хвости та концентричні кільцеві структури; їх самовідновлювальна поведінка – регенерація пучка після перешкоди – надає чіткі фізичні докази основної хвильової структури;

- явища дифракції, що вивчаються з часів лорда Релея, також виявляють конфігурації, подібні до ґраток, які створюють подібні ефекти хвоста, навіть якщо вони не описані явно в термінах принципу Гюйгенса.

Таким чином, хоча прямих вимірювань у змодельованому шестивимірному середовищі немає, експериментальні дослідження хвильових систем із функцією Бесселя переконливо підтверджують існування таких особливостей. Розмежування між фізичним і розширеним просторами відповідає формальному підняттю, яке обговорюється нижче в розділі “Неперервна динаміка проти динаміки ґратки”, де обмеження допустимості та представлення поля зміщень на $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{Z}^3$ забезпечують математичну основу для коливальних хвостів та порушення принципу Гюйгенса як природних результатів гібридної моделі ґратки.

Вищезазначені роздуми спонукають до більш ретельного розгляду гібридної структури ґратка-континуум. У наступних розділах ми формалізуємо різницю між неперервною та дискретною динамікою, вводячи умову допустимості в дискретній динаміці ґратки, детально описуючи відповідні обмеження допустимості та аналізуючи поведінку узагальненого дискретного лапласіана. Ці інструменти дають змогу послідовно підвищити поле зміщення до індексованого конфігураційного простору $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{Z}^3$, встановлюючи математичну основу для хвостів, порушення принципу Гюйгенса та ефектів фокусування, обговорених вище.

Неперервна та ґраткова динаміка: формула Пуассона та обмеження допустимості

Визначення. Пуассонівський розв’язок тривимірного хвильового рівняння

Нехай $u : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ є розв’язком стандартного хвильового рівняння

$$\square u(x, t) := \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, t) - k^2 \Delta u(x, t) = 0, \quad (\text{B.1})$$

з початковими умовами

$$u(x, 0) = f(x), \quad \frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = g(x), \quad x \in \mathbb{R}^3, \quad (\text{B.2})$$

де $f \in C^2(\mathbb{R}^3)$ та $g \in C^1(\mathbb{R}^3)$. Розв’язок задається формулою Пуассона

$$u(x, t) = \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{4\pi ct} \int_{|y-x|=ct} f(y) dS_y \right] + \frac{1}{4\pi ct} \int_{|y-x|=ct} g(y) dS_y, \quad (\text{B.3})$$

де dS_y позначає поверхневу міру на сфері радіуса ct з центром у точці x .

Мінімальна регулярність

Формула Пуассона вимагає виконання лише таких умов:

$$1. f \in C^2(\mathbb{R}^3),$$

2. $g \in C^1(\mathbb{R}^3)$.

На відміну від цього, дискретні ґратчасті системи накладають більш строгі обмеження сумісності на початкові дані.

Умова допустимості в динаміці дискретної ґратки

Нехай $\varphi_{a,b,c}(t)$ позначає поле зміщень у вузлі ґратки $(a, b, c) \in \mathbb{Z}^3$ у момент часу $t \in \mathbb{R}$, що визначається дискретним хвильовим рівнянням на кубічній ґратці

$$\square_{\text{lattice}}^3 \varphi_{a,b,c}(t) = 0, \tag{B.4}$$

де \square_{lattice} – дискретний аналог оператора Даламбера, який зазвичай визначається через скінченні різниці як у просторі, так і в часі. Початкові умови задаються конфігурацією поля $\varphi_{a,b,c}(0)$ та його похідною за часом $\partial_t \varphi_{a,b,c}(0)$.

Для забезпечення узгодженості з дискретною еволюцією має бути виконана така умова допустимості:

$$\partial_t^2 \varphi_{a,b,c}(t)|_{t=0} = k^2 \cdot \Delta_{\mathbb{Z}^3} \varphi_{a,b,c}(0), \tag{B.5}$$

де k – константа зв'язку, що характеризує силу взаємодії між сусідніми вузлами ґратки, а $\Delta_{\mathbb{Z}^3}$ позначає дискретний лапласіан на тривимірній цілочисельній ґратці. Явно, цей лапласіан визначається формулою

$$\Delta_{\mathbb{Z}^3} \varphi_{a,b,c} = \sum_{\substack{(i,j,k) \in \mathbb{Z}^3 \\ \|(i,j,k) - (a,b,c)\|_1 = 1}} (\varphi_{i,j,k} - \varphi_{a,b,c}), \tag{B.6}$$

де підсумовування проводиться за шістьма найближчими сусідами вузла (a, b, c) . На відміну від неперервного рівняння хвилі, де амплітуди поля не обмежені, у дискретній ґратковій моделі існує природна межа для атомних зміщень: початкове зміщення в кожному вузлі не повинно перевищувати міжатомної відстані. Це обмеження відображає фізичні межі атомного руху та гарантує, що модель залишається в гармонійному режимі ґраткової динаміки.

Поведінка узагальненого дискретного лапласіана

У багатьох фізичних конфігураціях взаємодії в ґратках поширюються за межі шести найближчих сусідів або відрізняються вздовж кристалографічних осей. Це вимагає заміни оператора (B.6) узагальненим дискретним лапласіаном

$$\Delta_{\mathbb{Z}^3}^{(w)} \varphi_{l,m,n} := \sum_{(p,q,r) \in \mathcal{N}} w_{pqr} (\varphi_{l+p,m+q,n+r} - \varphi_{l,m,n}), \tag{B.7}$$

де $\mathcal{N} \subset \mathbb{Z}^3 \setminus \{(0,0,0)\}$ – скінченний окіл взаємодій, а w_{pqr} – дійсні симетричні ваги ($w_{pqr} = w_{-p,-q,-r}$). Дискретний стандартний лапласіан відповідає значенням $w_{\pm 1,0,0} = w_{0,\pm 1,0} = w_{0,0,\pm 1} = 1$, а всі інші ваги дорівнюють нулю.

Це узагальнення дозволяє моделювати:

- анізотропні ґратки,
- далекосязні сили,
- частотно-залежні поправки до дисперсійного співвідношення.

Зауваження. Фізична інтерпретація – Підняття до розширеного 6D-простору

Дискретні хвильові рівняння на ґратці природним чином піднімаються до шестивимірного розширеного простору, де кожен вузол ґратки наділений локальним неперервним полем зміщення. Такий підхід має подвійний характер: він одночасно охоплює локальну вібраційну динаміку та нелокальні взаємодії, зумовлені топологією ґратки. Важливо, що це підняття не є суто формальним – дискретна трансляційна симетрія породжує зв'язки, які неможливо адекватно відобразити у чисто тривимірних моделях. Включення задачі в цей вищий вимір зберігає фізичну достовірність і забезпечує зручність аналітичного опрацювання.

Класична формула Пуассона дає аналітичне розв'язання за мінімальних вимог до регулярності, природним чином уникаючи потреби у введенні додаткових умов допустимості.

Натомість дискретні ґратчасті системи – особливо ті, що моделюються чисельними схемами – потребують явного накладання таких умов для узгодженості з дискретним рівнянням еволюції. Аналітична схема, побудована за підходом Бейтмена, дає розв'язки, які за своєю конструкцією задовольняють ці умови.

Розширення формулювання до шестивимірного конфігураційного простору дозволяє вивести та розв'язати дискретно-неперервне гібридне рівняння, що точно відображає ґратчасті системи, пов'язані з неперервними полями зміщення. Це розширення природним чином формує розширену структуру над фізичним простором.

Важливим наслідком дискретно-неперервної взаємодії є порушення строгого принципу Г'юйгенса, що проявляється у вигляді коливальних хвильових шлейфів, які слідує за основним фронтом хвилі – явище, яке можна використати для просторово-часового фокусування хвиль шляхом конструктивної інтерференції.

Оператори зсуву в експоненціальній диференціальній формі

Введення оператора $T_\alpha = e^{\alpha \partial_x}$, де $\alpha \in \mathbb{R}$, визначає дробові ґраткові зсуви – узагальнення дискретних трансляцій на випадок не цілочисельних зміщень

$$(T_x f)(x) = f(x + 1) = (e^{\partial_x} f)(x), \tag{B.8}$$

де

$$e^{\partial_x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \partial_x^n \tag{B.9}$$

У випадку кількох змінних зсуви вздовж напрямків ґратки генеруються операторами

$$e^{\pm \partial_x}, \quad e^{\pm \partial_y}, \quad e^{\pm \partial_z}. \tag{B.10}$$

Дискретний лапласіан, що з'являється у виразі (13), можна компактно записати у вигляді

$$\Delta_d = (e^{\partial_x} + e^{-\partial_x} + e^{\partial_y} + e^{-\partial_y} + e^{\partial_z} + e^{-\partial_z} - 6), \tag{B.11}$$

що діє на функцію

$$\varphi_{a,b,c}(t) = \varphi(x = a, y = b, z = c, t), \quad (B12)$$

як у моделі ґратки найближчих сусідів.

Зауваження. Функціональне числення та узагальнена динаміка зсуву

Для гладкої функції f визначимо оператор $T_h := e^{h\partial_x}$, що дає:

$$(T_h f)(x) = f(x + h), \quad (B.13)$$

де $h \in \mathbb{R}$ для неперервного випадку та $h \in \mathbb{Z}$ для дискретних зсувів ґратки. Це дає змогу узагальнити динаміку за допомогою “функціонального числення” на генераторі ∂_x .

Розширення та застосування

1. Дробові зсуви

Приймаючи $T_\alpha = e^{\alpha\partial_x}$ з $\alpha \in \mathbb{R}$, ми визначаємо “дробові зсуви ґратки”.

Фізичний приклад:

У рамках моделей аномального транспорту атоми або збуджені стани можуть здійснювати переміщення на фракційні відстані, що не є цілими кратними вектору ґратки \mathbf{a} , тобто $\mathbf{r} = \alpha\mathbf{a}$, де $\alpha \in \mathbb{R}$, $0 < \alpha < 1$. Це дозволяє описати динаміку, яка інтерполює між балістичним перенесенням до найближчих сусідів і нелокальними стрибками типу Леві. Такий підхід охоплює проміжні режими транспорту, які не є суто локальними чи повністю нелокальними, і є особливо релевантним для систем із фрактальною структурою або масштабно-інваріантною поведінкою.

2. Дискретні дисперсійні співвідношення

Символ Фур’є для дискретного лапласіана має вигляд: в одновимірному випадку,

$$\widehat{\Delta}_d(\xi) = 2 \cos \xi - 2 \quad (B.14)$$

у тримірному випадку,

$$\widehat{\Delta}_d(\xi_x, \xi_y, \xi_z) = 2(\cos \xi_x + \cos \xi_y + \cos \xi_z) - 6. \quad (B.15)$$

Фізичний приклад:

Ці співвідношення характеризують дисперсію фононів у простій кубічній ґратці, де швидкості поширення однакові вздовж усіх кристалграфічних осей.

3. Анізотропні оператори

Можливі різні сили зв’язку:

$$\Delta_{d,\text{anis}} = \alpha_x(e^{\partial_x} + e^{-\partial_x} - 2) + \alpha_y(e^{\partial_y} + e^{-\partial_y} - 2) + \alpha_z(e^{\partial_z} + e^{-\partial_z} - 2), \quad (B.16)$$

де $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ відображають анізотропний зв’язок.

Фізичний приклад:

Шаруваті або волокнисті кристали, де атомні зв’язки сильніші в одному напрямку (наприклад, графітові площини або масиви оптичних хвильоводів).

4. Інтегральні перетворення через напівгрупи зсуву
 Більш загальні еволюції типу згортки:

$$(K^* f)(x) = \int_{\mathbb{R}} K(h)(T_h f)(x)dh, \quad (B.17)$$

де K кодує спектральну або часову модуляцію.

Фізичний приклад:

У моделях електронів із сильним зв’язком ядра описують ефективні амплітуди стрибків до не найближчих сусідів або залежну від часу модуляцію ґраткових зв’язків (інженерія Флоке).

Висновок із Додатка В

Підняття до розширеного 6D хвильового простору слід розуміти як математично обґрунтовану необхідність моделювання, а не як метафізичне твердження. Дискретна трансляційна симетрія ґратки індукує нелокальні зв’язки, які неможливо адекватно описати в рамках чисто 3D-формулювання. Вбудовуючи проблему в багатовимірний конфігураційний простір, ми зберігаємо фізичну точність, одночасно отримуючи аналітичну простежуваність.

Представленням дискретних операторів за допомогою експоненціального числення зсуву (розгляд зсувів як експонент диференціальних операторів) пропонується єдина структура для

- зв’язку дискретної динаміки ґратки з її неперервними диференціальними аналогами,
- розширення моделей найближчих сусідів до дробових, анізотропних або далекосяжних зв’язків,
- інтерпретації дисперсії ґратки та узагальнених пропагаторів у фізично змістовних термінах.

У цій структурі знайома факторизація функції Бесселя постає лише як один окремий випадок ширшого класу динаміки операторів, породженої зсувом.

ДОДАТОК С

Лінійне наближення та пертурбаційні розширення

Ця робота проводиться в рамках лінійної теорії пружності, де поширення хвиль визначається гармонічним відгуком, а поля зміщень задовольняють принципу суперпозиції. Цей підхід забезпечує широке застосування в широкому діапазоні матеріалів без необхідності знання констант пружності вищого порядку.

Однак нелінійні ефекти можуть стати актуальними в певних режимах, включно з такими, як

1. високоамплітудне збудження,
2. сильна фонон-фононна взаємодія,
3. температурне розм’якшення ґратки.

Для врахування таких явищ потрібна специфічна для матеріалу нелінійна модель пружності, що включає тензори напружень-деформацій вищого порядку. Природним підходом є застосування методів збурень, які розглядають нелінійні внески як малі корекції до лінійного розв’язку.

1. P.M. Tomchuk. Optoacoustic effect in the systems of island metal film on a dielectric, metal impurities in dielectric. *Ukr. Fiz. Zh.* **38**, 1174 (1993).
2. T.H. Havelock. On the instantaneous propagation of disturbance in a dispersive medium. *Philos. Mag.* **19**, 160 (1910).
3. H. Bateman. Some simple differential difference equations and the related functions. *Bull. Am. Math. Soc.* **49**, 494 (1943).
4. R.D. Fedorovich, A.G. Naumovets, P.M. Tomchuk. Electron and light emission from island metal films and generation of hot electrons in nanoparticles. *Phys. Rep.* **328**, 73 (2000).
5. P.M. Tomchuk. Light absorption by island metal films in the infrared range. *Surf. Sci.* **330**, 350 (1995).
6. Y.D. Bilotsky, P.M. Tomchuk. Size effect in electron–lattice energy exchange in small metal particles. *Surf. Sci.* **600**, 4702 (2006).
7. Y.D. Bilotsky, P.M. Tomchuk. Peculiarity of electron–phonon energy exchange in metal nanoparticles and thin films. *Surf. Sci.* **602**, 383 (2008).
8. P.M. Tomchuk, Y.D. Bilotsky. Electron-lattice energy exchange in metal nanoparticles. Quantum-kinetic and classical approaches. *arXiv:1401.2243 [cond-mat.mes-hall]* (2014).
9. B.A. Auld. *Acoustic Fields and Waves in Solids* (John Wiley & Sons, 1973).
Одержано 08.06.25
Переклад на українську мову О. Войтенка

Y. Bilotsky, P. Tomchuk

THE NEW MECHANISM
OF FOCUSING AND ENHANCING
ACOUSTIC WAVES GENERATED BY METAL
NANOPARTICLES WITHIN THE CRYSTAL LATTICE

We will discuss a possible mechanism for the focusing and enhancement of acoustic waves generated by metal nanoparticles embedded in a crystal lattice under ultrashort laser excitation. In contrast to continuous-medium models, the discrete lattice framework naturally gives rise to oscillatory wave tails appearing behind the propagating front. These tails arise from the breakdown of Huygens principle in even-dimensional spaces. The atomic dynamics can be interpreted as evolving within a six-dimensional configuration space, where the continuous subspace represents intra-cell displacements and the discrete indices correspond to the positions of unit cells. This effect can lead to a local enhancement of longitudinal acoustic wave amplitudes at specific lattice sites without any increase in the driving laser pulse intensity.

Keywords: nanoparticles, generating and focusing acoustic waves, Huygens principle.