EDN: LBRZLR



Фото из архива ФИАН, предоставлено И. Г. Зубаревым

Н. Г. Басов (14. 12. 1922 – 01. 07. 2001)

14 декабря 2022 г. исполняется 100 лет со дня рождения выдающегося советского и российского физика, лауреата Нобелевской премии Николая Геннадьевича Басова.

Н. Г. Басов сыграл ключевую роль в создании и развитии лазерной промышленности и лазерных исследований в СССР. Ему принадлежат пионерские работы по применению лазеров для научных, технологических, информационных, медицинских исследований и систем специального назначения.

В 1950 г. Н. Г. Басов окончил инженерно-физический факультет Московского механического института боеприпасов (ММИБ с 1953 г. МИФИ) и поступил в аспирантуру этого института на кафедру теоретической физики, где его научным руководителем сначала был заведующий лабораторией Колебаний ФИАН академик М. А. Леонтович, а затем А. М. Прохоров. В 1952 г. Н.Г. Басов и А. М. Прохоров сформулировали идею использования индуцированного излучения молекулярных пучков для усиления и генерации электромагнитного излучения В 1954 г. в США и СССР на этом принципе был создан первый прибор квантовой электроники – молекулярный генератор на пучке молекул аммиака (МАЗЕР). За реализацию этой идеи в 1964 г. Н. Г. Басов и А.М. Прохоров совместно с Ч. Таунсом (США) были удостоены Нобелевской премии.

В 1961 г. Н. Г. Басовым, О. Н. Крохиным и Ю. М. Поповым был предложен инжекционный диодный лазер ,который и был создан в следующем году в ФИАН под руководством Н. Г. Басова. В настоящий момент это самый распространенный тип лазера и без него невозможно представить современное существование общества и, в частности, оптоволоконную связь.

В 1962 г. Н. Г. Басов совместно с О. Н. Крохиным предложил метод нагрева вещества до термоядерных температур лазерным излучением. В настоящее время исследования по лазерному термоядерному синтезу являются национальными программами во всех высокоразвитых странах мира.

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД М О С К В А ТОМ 162, ВЫПУСК 6 (12) ДЕКАБРЬ 2022 Р А Н

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

Балакин Д. А.,	
Агапов Д. П., Гостев П. П., Магницкий С. А., Фроловцев Д. Н., Чиркин А. С.	811
Поглощение излучения с частотой, близкой к границе прозрачности неоднородной плазмы, образо- ванной при многофотонной ионизации атомов инертного газа	823
злучение материальной частицы, находящейся в диэлектрической среде под воздействием элек тромагнитного поляБеляев Б. А., Тюрнев В. В., Шабанов Д. А	830
Генерация центров окраски и лазерной плазмы в LiF при многоимпульсной филаментации Кузнецов А. В., Компанец В. О., Дормидонов А. Е., Чекадин С. В., Кандидов В. П.	835
Светоиндуцированные дифракционные решетки на метаповерхностях на основе жидкого метаматериала	844
ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА	
Модели динамического равновесия астрофизических объектов Журавлев В. М.	850
Тени черных дыр как источник ограничений на расширенные теории гравитации 2: Sgr A* 	878

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

© Редколлегия журнала ЖЭТФ (составитель), 2022

[©] Российская академия наук, 2022

Молекулярно-пучковая эпитаксия тонких пленок h -GaTe/ m -GaTe на подложках GaAs (001): струк- турные и фотолюминесцентные свойства	
Сорокин С.В., Седова И.В., Авдиен- ко П.С., Фирсов Д.Д., Комков О.С., Галимов А.И., Яговкина М.А., Рахлин М.В.	892
ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ	
Фазовая диаграмма и основное состояние декорированной модели Изинга на треугольной решетке с ферромагнитным взаимодействием первых соседей и антиферромагнитным взаимодействием вторых Муртазаев А. К.	899
Моделирование четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке методом Ванга– Ландау с контролируемой точностью Φ адеева М. А., Щур Л. Н.	909
Уравнения двухскоростной гидродинамики для полярной фазы сверхтекучего ³ Не в нематическом аэрогеле	917
Термомагнитная конвекция феррожидкости в вертикальном гидродинамическом контуре: интенси- фикация теплообмена в магнитном поле Косков М. А., Пшеничников А. Ф.	926
ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ	
Генерация вихрей в бислое сверхпроводник / ферромагнетик с неоднородным обменным полем 	941
Ab initio-исследование влияния Al на энтальпию растворения примеси углерода в парамагнитном ГЦК-сплаве Fe-MnПономарева А. В., Смирнова Е. А.	957
Моделирование энергетического спектра углеродной сферы в пределе сплошной средыЦиберкин К. Б.	968
О резонансных вкладах в осцилляционные явления в условиях магнитного пробоя при перестройках электронной динамики на поверхности Ферми	975
СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ	
Гидродинамика турбулентного слоя смешенияВоротилин В.П.	985
Исследование спектральных свойств пространственно-неоднородной системы частиц Юкавы в пара- болическом конфайнменте Воронов И. В., Николаев В. С., Тимофеев А. В.	991
Формирование пучков ионов титана субмиллисекундной длительности с высокой импульсной плот- ностью мощности Рябчиков А. И., Тараканов В. П., Корнева О. С., Сивин Д. О.	1004
ОБЗОРЫ	
Пикосекундная модуляция фундаментального поглощения света — отображение осцилляций и обед- нения населенности электронов в поле собственного интенсивного стимулированного излучения в гетероструктуре $Al_xGa_{1-x}As$ -GaAs- $Al_xGa_{1-x}As$ (Экспериментальное исследование) 	1018
Алфавитный указатель тома 162 за 2022 г.	1049
Предметный указатель тома 162 за 2022 г.	1057

ФОРМИРОВАНИЕ ИЗОБРАЖЕНИЙ В ФАНТОМНОЙ ВОЛОКОННОЙ ЭНДОСКОПИИ МЕТОДОМ РЕДУКЦИИ ИЗМЕРЕНИЙ

\mathcal{A} . А. Балакин^{*}, \mathcal{A} . П. Aranos^{**}, П. П. Гостев^{***}, С. А. Магницкий^{****}, \mathcal{A} . Н. Фроловцев[†],

A. C. $Чиркин^{\ddagger}$

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет 119991, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 15 июня 2022 г., после переработки 3 августа 2022 г. Принята к публикации 7 августа 2022 г.

Для формирования фантомных изображений (ФИ) в волоконно-оптических системах применен метод редукции измерений. ФИ восстанавливались путем численного моделирования полного цикла получения ФИ в базовой схеме волоконного многомодового эндоскопа, начиная с распространения случайно модулированного света по многомодовому волокну и заканчивая расчетом ФИ с помощью численных методов однопиксельной визуализации. Для получения высококачественных восстановленных ФИ привлекалась априорная информация об исследуемом объекте. Показано, что при числе используемых шаблонов освещения объекта, существенно меньшем числа пикселей восстанавливаемого изображения, погрешность восстановления объекта может быть уменьшена, несмотря на ограничение числа мод, распространяющихся по оптическому волокну и формирующих некогерентное излучение. Для сравнения для формирования ФИ были использованы несколько вариантов метода сжатых измерений и традиционный корреляционный метод. Продемонстрировано, что предложенный вариант метода редукции измерения в применении к многомодовым волокнам показывает сравнимые, а часто лучшие результаты, чем традиционный корреляционный метод и метод сжатых измерений.

DOI: 10.31857/S004445102212001X **EDN:** LBWCFT

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние несколько лет наблюдается повышенный интерес к новому направлению оптики волоконной фантомной оптике (ВФО), которая находится на стыке волоконной, квантовой, статистической оптики, оптики фантомных изображений и интеллектуальных систем формирования и обработки изображений. Ключевым моментом в ВФО является приготовление пространственно структурированного света и формирование изображений на основе получаемой косвенной информации об объекте с использованием фантомного принципа синтеза изображений. Это требует не только разработки специальных физических методов управления свойствами света, но и разработки специальных математических алгоритмов.

Перспективным направлением может стать применение методов ВФО для получения изображений в эндоскопических системах, где наблюдение за объектом происходит через оптическое волокно или жгут волокон. Интерес прежде всего связан с возможностью поместить основные оптические элементы вне зонда, что позволяет уменьшить его размеры и тем самым улучшить качество инвазивной диагностики. Отметим также, что принцип фантомных изображений (ФИ) позволяет исключить влияние флуктуаций и различных неоднородностей среды на трассе распространения излучения на восстановленное изображение.

^{*} E-mail: balakin_d_a@physics.msu.ru

^{**} E-mail: dimaagapov@mail.ru

^{***} E-mail: fongostev@gmail.com

^{****} E-mail: sergeymagnitskiy@gmail.com

[†] E-mail: dfrolovtsev@gmail.com

[‡] E-mail: aschirkin@physics.msu.ru

Изначально, в отличие от формирования обычных изображений, при детектировании фантомного изображения [1-3] для получения информации об объекте использовалась корреляция фотонов двух пучков, один из которых (в объектном канале) освещает объект, после чего регистрируется пространственно неразрешающим (однопиксельным) датчиком, а второй (в восстанавливающем канале) регистрируется многопиксельной камерой. В этом варианте ФИ, который будем в дальнейшем называть традиционным, для формирования изображений предлагалось вычислять корреляционную функцию второго порядка сигнала однопиксельного датчика в объектном канале и сигнала, соответствующего каждому отдельному пикселю в восстанавливающем канале. Позднее появился вычислительный вариант ФИ, в котором объект освещается случайными шаблонами [4], формируемыми пространственным модулятором света (см. [5] и цитируемую там литературу), или цифровым микрозеркальным устройством, а регистрация фотонов в восстанавливающем канале заменяется ее численным моделированием, что позволяет обойтись без многопиксельной камеры. Позднее такой вариант ФИ и производные от него алгоритмы начали называть однопиксельной визуализацией. Если формирование шаблонов освещения воспроизводимо, вместо численного моделирования можно предварительно зарегистрировать освещение в плоскости объекта, временно заменив его камерой (на этапе формирования изображения объекта многопиксельная камера попрежнему не используется) [6]. Такой алгоритм плохо подходит для систем реального времени, предназначенных для генерации изображений объекта с частотой 10 Гц и более, так как для построения одного изображения объекта требуется накопить большое количество данных для расчета корреляционной функции.

На рис. 1 приведена схема формирования фантомных изображений при облучении объекта светом, прошедшим через оптическое волокно. Лазерное излучение проходит через фазовый/амплитудный пространственный модулятор света, в дальней зоне которого профиль интенсивности пучка представляет из себя спекл-картину. С помощью микрообъектива излучение заводится в многомодовое волокно. После распространения в волокне свет облучает объект исследования. Излучение, прошедшее через объект, собирается однопиксельным датчиком, сигнал с которого поступает на персональный компьютер (ПК на рис. 1) для вычисления пространственной корреляционной функции.

Типичная модель измерения при обработке изображений имеет вид

$$\boldsymbol{\xi} = A\mathbf{f} + \boldsymbol{\nu},\tag{1}$$

где вектор $\boldsymbol{\xi} \in \mathcal{X}$ — результат измерения (последовательность показаний однопиксельного датчика), неизвестный вектор $\mathbf{f} \in \mathcal{F}$ характеризует степень прозрачности объекта исследования, оператор A моделирует измерительный преобразователь (в рассматриваемой схеме оператор A определен развернутыми в строки шаблонами освещения), $\boldsymbol{\nu} \in \mathcal{X}$ — погрешность измерений, \mathcal{F}, \mathcal{X} — конечномерные евклидовы пространства. В этих обозначениях традиционный алгоритм восстановления фантомных изображений описывается формулой

$$\sum_{j=1}^{\dim \mathcal{X}} \left(\xi_j - \frac{1}{\dim \mathcal{X}} \sum_{k=1}^{\dim \mathcal{X}} \xi_k \right) \left(\mathbf{a}_j - \frac{1}{\dim \mathcal{X}} \sum_{l=1}^{\dim \mathcal{X}} \mathbf{a}_l \right),$$
(2)

где $\mathbf{a}_j - j$ -я строка матрицы оператора A, т. е. развернутый в строку j-й шаблон освещения, ξ_j — показания однопиксельного датчика при освещении объекта j-м шаблоном.

В современных системах ФИ с применением оптических волокон используется несколько основных подходов. Так, в работе [7] обсуждается идея использования жгута одиночных волокон. В [8,9] для облучения объекта применяется одиночное многомодовое волокно, на входном торце которого располагается жгут одиночных волокон. Еще один тип систем в ВФО включает в себя многопиксельные модуляторы света и одиночные многомодовые волокна. Этот подход экспериментально реализован в работах [6,10,11]. В таких системах формирование изображения может быть осуществлено с помощью различных математических алгоритмов (см., например, [12]). Результаты последних исследований показывают, что наиболее перспективными для создания волоконно-оптических фантомных эндоскопов являются системы, использующие одиночные многомодовые волокна. Такие системы позволяют создать миниатюрные эндоскопы, обладающие минимальной степенью инвазивности, т.е. позволяют проводить вмешательства с минимальной травматизацией окружающих тканей.

В принципе, ФИ могут быть синтезированы с применением различных структур света, освещающих объект (шаблонов освещения). На сегодняшний день предпочтение отдается статистически независимым шаблонам со случайной структурой. В дан-



Рис. 1. Схема для реализации фантомной визуализации с помощью многомодового волокна

ной работе мы ограничимся рассмотрением формирования ФИ только таким светом.

На рис. 1 представлена базовая схема формирования фантомных изображений при облучении объекта светом со случайной пространственной структурой, прошедшим через многомодовое оптическое волокно. В такой схеме с теоретической точки зрения учитываются практически все аспекты формирования ФИ в волоконно-оптических схемах, основой которых являются многомодовые волокна. Лазерное излучение проходит через фазовый/амплитудный пространственный модулятор света, в дальней зоне которого профиль интенсивности пучка представляет из себя спекл-картину. С помощью микрообъектива излучение заводится в многомодовое волокно. После распространения в волокне свет облучает объект исследования. Излучение, прошедшее через объект, собирается однопиксельным датчиком, сигнал с которого поступает на ПК. Для получения ФИ используются специальные математические алгоритмы, входными данными которых являются пространственное распределение интенсивности света в плоскости объекта и интегральная интенсивность прошедшего через объект света, собранная однопиксельным детектором. Заметим, что исторически первый традиционный алгоритм, основанный на вычислении ковариационной функции, и все последующие, включая разрабатываемые в настоящее время, алгоритмы являются статистическими в том смысле, что требуют довольно значительного числа измерений, полученных при различных пространственных профилях освещения объекта (шаблонов освещения).

В ВФО проблема конечного числа шаблонов освещения обостряется из-за того, что в оптическом волокне от модулятора до объекта распространяется ограниченное число мод. Поэтому даже увеличение числа шаблонов освещения выше определенного предела позволяет лишь более точно оценить составляющие изображения, информация о которых уже была получена из предшествующих измерений, так как новые строки матрицы оператора A оказываются линейно зависимыми от старых. Число мод определяет верхний предел ранга оператора A. В связи с этим заметим, что хотя волоконные фантомные изображения (ВФИ) могут быть получены в схемах с различными конфигурациями волокон [8–10], наиболее перспективными являются одиночные многомодовые волокна. Это связано с тем, что соотношение размера волокна и количества пространственных мод в многомодовых волокнах лучше, чем в жгутах одномодовых и многомодовых волокон.

Для повышения качества восстановления вектора **f** требуется привлечь дополнительную информацию о нем. Эта информация, как правило, ограничивает класс объектов, изображения которых могут быть точно восстановлены. Иными словами, погрешность обработки уменьшается при восстановлении изображений «более правдоподобных» объектов в ущерб восстановлению изображений «менее правдоподобных». Например,

• кусочно-постоянный вид оптических характеристик объекта, если он состоит из оптически однородных материалов;

• близость оптических характеристик объекта в близких его точках.

В данной работе рассмотрен ряд математических методов, позволяющих сформировать ФИ на основе данных, получаемых в схеме, изображенной на рис. 1, а именно, традиционный метод, несколько вариантов метода сжатых измерений и предложенный в работе вариант метода редукции измерения, в котором используется дополнительная информация о равенстве нулю многих компонент восстанавливаемого изображения в собственном базисе модели интерпретации измерения. Показано, что использование дополнительной информации об объекте исследования позволяет значительно уменьшить число шаблонов освещения, которыми требуется осветить объект для формирования фантомного изображения, и, следовательно, ускорить регистрацию.

2. МЕТОД СЖАТЫХ ИЗМЕРЕНИЙ

2.1. Общая идея метода сжатых измерений

Как правило, для уменьшения числа шаблонов освещения, которыми требуется осветить объект для формирования фантомного изображения, используется метод сжатых измерений [13–18]. В нем оценка вектора **f** определена решением задачи минимизации по **g** (здесь **g** — вектор, характеризующий степень прозрачности некоторого объекта, выступающего как пробный объект в смысле сравнения реального результата измерений и результата измерений, который был бы получен при измерении пробного объекта) функционала

$$\Delta(A\mathbf{g}, \boldsymbol{\xi}) + \alpha \Omega(\mathbf{g}) \sim \min_{\mathbf{g} \in \mathcal{F}},\tag{3}$$

где функционал Δ характеризует отклонение ожидаемого (при объекте, моделируемом вектором **g**) результата измерения A**g** и фактически полученного $\boldsymbol{\xi}$, а регуляризующий функционал Ω характеризует регулярность объекта (как правило — гладкость его изображения как функции координат).

Основные используемые варианты выбора функционала Δ :

• функционал наименьших квадратов [6, 17–21] $\Delta(A\mathbf{g}, \boldsymbol{\xi}) = \|A\mathbf{g} - \boldsymbol{\xi}\|^2;$

• логарифм функции правдоподобия [22]. При пуассоновской статистике фотоотсчетов

$$\Delta(A\mathbf{g}, \boldsymbol{\xi}) = \sum_{j=1}^{\dim \boldsymbol{\xi}} \left(\boldsymbol{\xi}_j \ln((A\mathbf{g})_j + \epsilon) - ((A\mathbf{g})_j + \epsilon) - \ln \boldsymbol{\xi}_j! \right),$$

где ϵ — среднее число фотоотсчетов, вызванных темновыми шумами, ! обозначает факториал.

Выбор функционала Δ , как правило, определяется доступной информацией о модели измерения (известна ли статистика фотоотсчетов и распределение темновых шумов, определяющие функцию правдоподобия).

2.2. Использование разреженности в базисе заданного преобразования

Коэффициенты пропускания реальных объектов в близких точках часто имеют схожие величины. Это утверждение может быть математически сформулировано как разреженность вектора \mathbf{f} в некотором (выбираемом априори, в том числе на основе информации о характерном виде объекта) базисе, заданном преобразованием T [6, 18–22]. В качестве этого базиса, как правило, применяется базис дискретного косинусного преобразования (DCT) [22], см. сравнение ряда преобразований (тождественного преобразования, дискретного вейвлет-преобразования, DCT) в работе [23]. Основное требование к преобразованию — как можно более быстрое убывание упорядоченных по невозрастанию модулей координат вектора f. На этом способе основаны следующие варианты выбора функционала Ω в формуле (3):

• норма L^1 в заданном базисе,

$$\Omega(\mathbf{g}) = \|T\mathbf{g}\|_1 \tag{4}$$

(основной используемый вариант), см. [6,24];

• отношение квадратов норм L^1 и L^2 , $\Omega(\mathbf{g}) = ||T\mathbf{g}||_1^2 / ||T\mathbf{g}||^2$, см. [22].

2.3. Характеристики регулярности, основанные на конечных разностях

Существуют также варианты метода сжатых измерений, в которых в формуле (3) используются другие характеристики регулярности изображения:

• полная кривизна [18,25]

$$\Omega(\mathbf{g}) = \sum_{i=1}^{\dim \mathbf{g}} \left(\left| (D_x^2 \mathbf{g})_i \right| + \left| (D_y^2 \mathbf{g})_i \right| \right);$$

• квадратичная кривизна [25]

$$\Omega(\mathbf{g}) = \sum_{i=1}^{\dim \mathbf{g}} \left(\left| (D_x^2 \mathbf{g})_i \right|^2 + \left| (D_y^2 \mathbf{g})_i \right|^2 \right); \quad (5)$$

• сглаженная (при $\beta \neq 0$) изотропная (в смысле чувствительности к ориентации координатных осей в плоскости изображения) полная вариация [26]

$$\Omega(\mathbf{g}) = \sum_{i=1}^{\dim \mathbf{g}} \sqrt{\beta^2 + |D_x^1 \mathbf{g}|_i^2 + |D_y^1 \mathbf{g}|_i^2}; \qquad (6)$$

• анизотропная полная вариация [18]

$$\Omega(\mathbf{g}) = \sum_{i=1}^{\dim \mathbf{g}} \left(|D_x^1 \mathbf{g}|_i + |D_y^1 \mathbf{g}|_i \right) =$$

= $||D_x^1 \mathbf{g}||_1 + ||D_y^1 \mathbf{g}||_1;$ (7)

• альтернативный вариант анизотропной полной вариации

$$\Omega(\mathbf{g}) = \|D_x^1 \mathbf{g}\| + \|D_y^1 \mathbf{g}\|.$$
 (8)

Здесь $(D_{x,y}^k \mathbf{g})_i$ — конечная разность *k*-го порядка изображения **g** в направлении оси x(y) в позиции *i*-го пикселя.

2.4. Свойства метода сжатых измерений. Выбор параметра регуляризации

Если восстанавливаемое изображение содержит компоненты, не влияющие на полученное изображение и восстанавливаемые за счет информации о разреженности, для обработки применяется вариант регуляризованного метода наименьших квадратов с поиском минимума регуляризующего функционала при требовании воспроизведения полученных изображений [27], формально получающийся как предел решения задачи (3) при $\alpha \to +0$. Для этого случая доказана [14] оптимальность выбора нормы L^1 в выбранном базисе как регуляризующего функционала при отсутствии шума и определенных ограничениях, накладываемых на модель измерения. Требуется, чтобы матрица оператора АТ обладала ограниченной изометрией, а именно, если для любого натурального $s \leq \dim \mathcal{F}$ существует такая константа изометрии δ_s , что $(1 - \delta_s) \|z\|^2 \le \|Az\|^2 \le (1 + \delta_s) \|z\|^2$ для любого вектора $z \in \mathcal{F}$, имеющего не более s ненулевых компонент, и $\delta_s + \delta_{2s} + \delta_{3s} \leq 1$, то точно восстановим любой вектор, имеющий не более s ненулевых компонент. Смысл этого условия применительно к схеме на рис. 1 — объекты, распределения прозрачностей которых представимы с помощью малого числа векторов из выбранного базиса, при измерении дают достаточно сильно различающиеся результаты.

Кроме указанной причины, выбор функционала Ω часто определяется вычислительными соображениями. Приведенные выше функционалы, в которых используется не норма L^1 изображения в некотором базисе, а конечные разности изображения, позволяют решать задачу (3) локальными методами (в частности, стохастической оптимизацией), поскольку изменение пикселя восстанавливаемого изображения изменяет лишь ограниченное число слагаемых в регуляризующем функционале, соответствующих этому пикселю и его соседям [18, 25]. Использование сглаженной изотропной полной вариации (6) вместо несглаженной упрощает вычисления, поскольку сглаженная изотропная полная вариация дифференцируема, а несглаженная — нет.

Выбор в качестве функционала Δ логарифма функции правдоподобия приводит к формальной эквивалентности соответствующего варианта метода сжатых измерений и метода апостериорного максимума, использованного, например, в [28], в котором оценивание выполняется максимизацией вычисленного по правилу Байеса апостериорного распределения прозрачности, где априорное распределение случайной прозрачности объекта исследования, например, пропорционально экспоненте отрицательной полной вариации изображения [28]. Соответствующее заданному регуляризующему функционалу априорное распределение при этом может не быть распределением вероятностей ввиду ненормируемости.

В дополнение к таким широко известным способам выбора значения параметра регуляризации α , как принцип невязки [29] (к которому близка рекомендация [18] использовать значение α , при котором для полученной оценки $\hat{\mathbf{f}}$ отличие прогнозируемого результата от наблюденного $\|A\hat{\mathbf{f}} - \boldsymbol{\xi}\|^2 \approx \dim \mathcal{X}$), метод *L*-кривой [30, 31], метод обобщенной кроссвалидации [32], в [25] предложен способ, в котором несколько раз моделируется получение изображения объекта, описываемого гауссово размытой оценкой максимального правдоподобия, вычисляется среднее уменьшение значения логарифма функции правдоподобия при переходе от размытой оценки к результату моделирования и ищется значение α , при котором результат обработки настолько же уменьшает значение логарифма функции правдоподобия по сравнению с оценкой максимального правдоподобия.

В силу его схожести с рассматриваемым далее вариантом метода редукции измерения также отметим метод восстановления изображения при помощи усеченного сингулярного разложения [8, 33], обычно не относимый к методам сжатых измерений, но формально получающийся по формуле (3) при $\Omega(\mathbf{g}) = \max\{0 \le k \le \operatorname{rk} A | (I - P_k)\mathbf{g} \neq 0\},$ где P_k — проектор на линейную оболочку первых kупорядоченных по невозрастанию соответствующих им сингулярных чисел правых сингулярных векторов оператора A, rk — ранг оператора или матрицы. В нем восстановленное изображение формируется действием на $\boldsymbol{\xi}$ оператора, псевдообратного к Aпосле усечения до нуля k наименьших сингулярных чисел оператора A.

В заключение раздела отметим возможность комбинирования различных регуляризующих функционалов, как это сделано, например, в работе [34], где использована линейная комбинация нормы L^2 , нормы L^1 и полной вариации. В этом случае требуются более сложные (из-за необходимости минимизации или нахождения корня функции нескольких параметров, а не одного) способы выбора значений регуляризующих параметров, обобщающие принцип невязки [35,36], метод *L*-кривой [37], метод обобщенной кроссвалидации [38], или основанные на использовании тестовых измерений [39]. Также применение этих методов затрудняется тем, что, как правило, их свойства проанализированы для регуляризующего функционала — суммы слагаемых вида $\|Q\mathbf{g}\|^2$ для заданного набора операторов Q, в то время как в методе сжатых измерений обычно используются более сложные регуляризующие функционалы, указанные выше (исключение — функционал (8)).



Рис. 2. Компьютерное моделирование восстановления фантомного изображения объекта исследования (a), 109.375 × 109.375 мкм, 128 × 128 пикселей, по результатам освещения объекта 1024 бинарными (на входе оптоволокна) шаблонами освещения: (б) традиционным методом (2), методами сжатых измерений при выборе в качестве регуляризующего функционала нормы L¹ в базисе (в) DCT и (r) преобразования Хаара, см. формулу (4) в разд. 2.2, (д) квадратичной кривизны, см. формулу (5) в разд. 2.3, (е) анизотропной полной вариации (7) и (ж) ее альтернативного определения (8), см. разд. 2.3, (з) линейной редукции измерения, см. разд. 3.1, и (и) нового алгоритма редукции измерения, см. разд. 3.2

3. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ МЕТОД РЕДУКЦИИ ИЗМЕРЕНИЯ

Другой вариант восстановления фантомного изображения дает математический метод редукции измерений [40], в котором ищется преобразование из некоторого класса (например, линейных преобразований), минимизирующее погрешность использования результата преобразования как оценки изображения объекта исследования.

3.1. Линейная несмещенная редукция измерения

Пусть в модели измерения (1) **f** — априори произвольный вектор, погрешность $\boldsymbol{\nu}$ — случайный вектор, $\mathbb{E}\boldsymbol{\nu} = 0$ и известен невырожденный корреляционный оператор шума $\Sigma_{\boldsymbol{\nu}} : \forall x \in \mathcal{X} \ \Sigma_{\boldsymbol{\nu}} x = \mathbb{E}\boldsymbol{\nu}(x, \boldsymbol{\nu})$, а измерение на идеальном измерительном преобразователе, результат которого интересует исследователя, моделируется линейным оператором $U: \mathcal{F} \to \mathcal{U}$.



Рис. 3. Компьютерное моделирование восстановления фантомного изображения объекта исследования (a),109.375×109.375 мкм, 128×128 пикселей, по результатам освещения объекта 1024 бинарными (на входе оптоволокна) шаблонами освещения: (б) традиционным методом (2), методами сжатых измерений при выборе в качестве регуляризующего функционала нормы L^1 в базисе (в) DCT и (г) преобразования Хаара, см. формулу (4) в разд. 2.2, (д) квадратичной кривизны, см. формулу (5) в разд. 2.3, (е) анизотропной полной вариации (7) и (ж) ее альтернативного определения (8), см. разд. 2.3, (з) линейной редукции измерения, см. разд. 3.1, и (и) нового алгоритма редукции измерения, см. разд. 3.2

В рассматриваемом случае, когда процесс измерения не возмущает объект и восстанавливается именно изображение объекта, U = I. Примером ситуации, когда это не так, служит восстановление изображения отдельного слоя трехмерного объекта. Если погрешность оценивания h(R, U), обусловленная линейным преобразованием результата измерения оператором R, определена как среднеквадратичная максимальная по всем значениям \mathbf{f} $h(R, U) = \sup_{\mathbf{f} \in \mathcal{F}} \mathbb{E} \| R \boldsymbol{\xi} - U \mathbf{f} \|^2$, то [40, §5.1] минимизирующий ее оператор линейной редукции, если выполнено условие

$$U(I - A^{-}A) = 0, (9)$$

равен

$$R_* = U(\Sigma_{\nu}^{-1/2}A)^{-}\Sigma_{\nu}^{-1/2}, \qquad (10)$$

где [–] обозначает псевдообращение. Линейной редукции соответствует минимальная погрешность

$$h(R_*, U) = \operatorname{tr} \left(U(A^* \Sigma_{\nu}^{-1} A)^- U^* \right).$$
(11)



Рис. 4. Компьютерное моделирование восстановления фантомного изображения объекта исследования (a), 109.375 × 109.375 мкм, 128 × 128 пикселей, по результатам освещения объекта 1024 бинарными (на входе оптоволокна) шаблонами освещения: (б) традиционным методом (2), методами сжатых измерений при выборе в качестве регуляризующего функционала нормы L^1 в базисе (в) DCT и (г) преобразования Хаара, см. формулу (4) в разд. 2.2, (д) квадратичной кривизны, см. формулу (5) в разд. 2.3, (е) анизотропной полной вариации (7) и (ж) ее альтернативного определения (8), см. разд. 2.3, (з) линейной редукции измерения, см. разд. 3.1, и (и) нового алгоритма редукции измерения, см. разд. 3.2

Если же условие (9) не выполнено, то априори допускает оценивание с конечной погрешностью (равной (11)) лишь составляющая $UA^{-}Af$. Условие (9) означает, что изменения объекта, не отражающиеся на результатах измерений, не должны влиять на восстанавливаемое изображение.

3.2. Использование дополнительной информации об объекте исследования

Пусть задача редукции измерения разрешима при заданном U и требуется, чтобы среднеквадратичная (с.к.) погрешность $h(R_*, U)$ оценивания $U\mathbf{f}$ не превосходила заданную величину. Для ответа на этот вопрос в [41, гл. 2, §3] введено понятие собственного базиса модели интерпретации измерения. Например, в рассмотренном выше случае её ортонормированный собственный базис \mathbf{e}_j , $j = 1, 2, \ldots$, определяется путем решения задачи [40, гл. 8, введение и §8.1] на собственные значения оператора $U(A^*\Sigma_{\nu}^{-1}A)^{-1}U^*\mathbf{e}_j = \sigma_j^2\mathbf{e}_j, \sigma_1^2 \leqslant \sigma_2^2 \leqslant \ldots$, т.е.



Рис. 5. Компьютерное моделирование восстановления фантомного изображения объекта исследования (a), 109.375 × 109.375 мкм, 128 × 128 пикселей, по результатам освещения объекта 1024 бинарными (на входе оптоволокна) шаблонами освещения: (б) традиционным методом (2), методами сжатых измерений при выборе в качестве регуляризующего функционала нормы L^1 в базисе (в) DCT и (г) преобразования Хаара, см. формулу (4) в разд. 2.2, (д) квадратичной кривизны, см. формулу (5) в разд. 2.3, (е) анизотропной полной вариации (7) и (ж) ее альтернативного определения (8), см. разд. 2.3, (з) линейной редукции измерения, см. разд. 3.1, и (и) нового алгоритма редукции измерения, см. разд. 3.2

как собственный базис этого оператора. Собственный базис обладает экстремальным свойством, согласно которому с. к. погрешность

$$h(\Pi_s R_*, \Pi_s U) = \sum_{j=1}^s \sigma_j^2 =$$

= $\inf\{h(\Pi R_*, \Pi U) | \operatorname{rk} \Pi \ge s\}, \quad (12)$
 $s = 1, \dots, \dim \mathcal{U},$

где Π_s — ортогональный проектор на линейную оболочку $\mathcal{L}(\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_s)$ векторов $\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_s$, Π — ортогональный проектор. Согласно (12), с. к. погрешность, сопутствующая оцениванию ортогональной проекции сигнала идеального измерительного преобразователя на линейное подпространство размерности *s* или более, минимальна, если это подпространство есть линейная оболочка первых *s* базисных векторов, упорядоченных по неубыванию соответствующих собственных значений. Таким образом, собственный базис оптимально (в указанном смысле)





Рис. 6. Компьютерное моделирования восстановления фантомного изображения объекта исследования (*a*), 109.375×109.375 мкм, 128×128 пикселей, по результатам освещения объекта 1024 шаблонами освещения, соответствующими случайной модуляции фазы в каждом пикселе: (*б*) традиционным методом (2), методами сжатых измерений при выборе в качестве регуляризующего функционала нормы L^1 в базисе (*в*) DCT и (*r*) преобразования Хаара, см. формулу (4) в разд. 2.2, (*д*) квадратичной кривизны, см. формулу (5) в разд. 2.3, (*е*) анизотропной полной вариации (7) и (*ж*) ее альтернативного определения (8), см. разд. 2.3, (*э*) линейной редукции измерения, см. разд. 3.1, и (*и*) нового алгоритма редукции измерения, см. разд. 3.2

отделяет наиболее зашумленные компоненты формируемой оценки от наименее зашумленных.

Ранее в [42] предложен алгоритм редукции измерений при априорной информации, аналогичной используемой в методе сжатых измерений, о близости оптических характеристик объекта в близких его точках и формализации этой информации разреженностью изображения как вектора в априори заданном базисе. Как и при линейной редукции, предполагалось выполнение условия (9). Алгоритм основан на проверке статистических гипотез о равенстве компонент восстанавливаемого изображения нулю при общем виде используемого для проверки гипотез критерия. Также в [42] показано его применение для критерия вида (13), см. ниже, но в заданном исследователем базисе, при этом внедиагональные компоненты матрицы корреляций формируемого изображения не учитывались. Позднее в теореме 1 в [43] определен оптимальный критерий, учитывающий корреляционные связи компонент формируемой оценки, в ситуации, когда погрешность измере-

Рис. 7. Компьютерное моделирования восстановления фантомного изображения объекта исследования (*a*), 109.375×109.375 мкм, 128×128 пикселей, по результатам освещения объекта 1024 шаблонами освещения, соответствующими случайной модуляции фазы в каждом пикселе: (*б*) традиционным методом (2), методами сжатых измерений при выборе в качестве регуляризующего функционала нормы L^1 в базисе (*в*) DCT и (*r*) преобразования Хаара, см. формулу (4) в разд. 2.2, (*д*) квадратичной кривизны, см. формулу (5) в разд. 2.3, (*е*) анизотропной полной вариации (7) и (*ж*) ее альтернативного определения (8), см. разд. 2.3, (*з*) линейной редукции измерения, см. разд. 3.1, и (*и*) нового алгоритма редукции измерения, см. разд. 3.2

ний характеризуется ее математическим ожиданием и ковариационным оператором. Построенный критерий существенно сложнее (13), поскольку требует найти максимальное $n \leq \dim \mathcal{U}$ и бинарную матрицу C ранга n, удовлетворяющую условию

$$((CT\Sigma_{R_*\boldsymbol{\xi}}T^*C^*)^{-1}CT\hat{u}, CT\hat{u}) < n\tau^2,$$

где $\Sigma_{R,\boldsymbol{\xi}} = U(A^*\Sigma_{\boldsymbol{\nu}}^{-1}A)^-U^*$ — ковариационный оператор оценки $R_*\boldsymbol{\xi}$. Наконец, в [44] предложено использование в качестве базиса, в котором проверяются гипотезы о компонентах, собственного базиса модели интерпретации измерения в силу его экстремального свойства (12) и показано, что оптимальный критерий, охарактеризованный в теореме 1 в [43], в этом базисе приобретает наиболее простой вид (13) благодаря диагональности матрицы ковариаций восстанавливаемого изображения в этом базисе.

С учетом сделанных замечаний алгоритм редукции приобретает следующий вид.



 (a)
 (б)
 (B)
 (Г)

 (а)
 (б)
 (В)
 (Г)

 (д)
 (е)
 (ж)
 (3)

 (д)
 (и)
 (и)

Рис. 8. Компьютерное моделирования восстановления фантомного изображения объекта исследования (a), 109.375×109.375 мкм, 128×128 пикселей, по результатам освещения объекта 1024 шаблонами освещения, соответствующими случайной модуляции фазы в каждом пикселе: (б) традиционным методом (2), методами сжатых измерений при выборе в качестве регуляризующего функционала нормы L^1 в базисе (в) DCT и (r) преобразования Хаара, см. формулу (4) в разд. 2.2, (д) квадратичной кривизны, см. формулу (5) в разд. 2.3, (е) анизотропной полной вариации (7) и (ж) ее альтернативного определения (8), см. разд. 2.3, (э) линейной редукции измерения, см. разд. 3.1, и (и) нового алгоритма редукции измерения, см. разд. 3.2

1. Вычисление оценки $\hat{u}=R_{*}\boldsymbol{\xi}$ (10) линейной несмещённой редукции.

2. Переход к собственному базису модели интерпретации измерения, в котором искомое значение $TU\mathbf{f}$ интересующей исследователя характеристики объекта исследования считается разреженным, т.е. содержит много нулевых компонент по сравнению с его размерностью. Обозначим соответствующее преобразование T, а его результат — $T\hat{u}$.

3. Формирование оценки $T\hat{u}_{thr}$ по правилу $(T\hat{u}_{thr})_i \stackrel{\text{def}}{=} 0$, если гипотеза « $(T\hat{u})_i = 0$ » принимается, а именно, если выполнено условие

$$(T\hat{u})_i^2 < \tau (T\Sigma_{R_*\boldsymbol{\xi}}T^*)_{ii}, \tag{13}$$

иначе $(T\hat{u}_{thr})_i \stackrel{\text{def}}{=} (T\hat{u})_i, i = 1, \dots, \dim \mathcal{U}$, где $\Sigma_{R_*\boldsymbol{\xi}} = U(A^*\Sigma_{\boldsymbol{\nu}}^{-1}A)^-U^* -$ ковариационный оператор оценки $R_*\boldsymbol{\xi}, \tau \geq 0$ – параметр критерия (13).

4. Возвращение к исходному базису: $\hat{u}_{thr} \stackrel{\text{def}}{=} T^{-1}T\hat{u}_{thr}.$

Рис. 9. Компьютерное моделирования восстановления фантомного изображения объекта исследования (*a*), 109.375×109.375 мкм, 128×128 пикселей, по результатам освещения объекта 1024 шаблонами освещения, соответствующими случайной модуляции фазы в каждом пикселе: (*б*) традиционным методом (2), методами сжатых измерений при выборе в качестве регуляризующего функционала нормы L^1 в базисе (*в*) DCT и (*r*) преобразования Хаара, см. формулу (4) в разд. 2.2, (*д*) квадратичной кривизны, см. формулу (5) в разд. 2.3, (*е*) анизотропной полной вариации (7) и (*ж*) ее альтернативного определения (8), см. разд. 2.3, (*з*) линейной редукции измерения, см. разд. 3.1, и (*и*) нового алгоритма редукции измерения, см. разд. 3.2

Если выполнено условие (9), шаги 1-4 решают задачу восстановления изображения. Но интерес представляет противоположный случай, так как именно он реализуется в случае $\dim \mathcal{X} < \dim \mathcal{U}$ (число шаблонов освещения меньше числа пикселей). Тогда по тем же причинам, что и при линейной редукции, после шага 4 восстанавливается лишь составляющая $UA^{-}A\mathbf{f}$, и для восстановления составляющей $U(I - A^{-}A)\mathbf{f}$ требуется, как и в методе сжатых измерений, привлечь дополнительную информацию. Воспользуемся в качестве такой информации используемым в методе сжатых измерений регуляризующим функционалом Ω , считая, что восстанавливаемое изображение тем более правдоподобно, чем меньше значение этого функционала. Таким образом, завершающие шаги алгоритма имеют следующий вид.

5. Вычисление наиболее соответствующей дополнительной информации версии составляющей $U(I - A^{-}A)\mathbf{f}$ (любым) решением задачи минимизации

$$\Omega(\hat{u}_{thr} + U(I - A^{-}A)g) \sim \min_{q \in \mathcal{F}}.$$
 (14)

Обозначим результат действия оператора $U(I - A^{-}A)$ на ее решение \hat{v}_{thr} .

6. Восстановление изображения как суммы $\hat{u}_{thr} + \hat{v}_{thr}$.

В непосредственно рассматриваемом случае U = I задача (14) упрощается до

$$\Omega(\hat{u}_{thr} + v) \sim \min_{v \in \mathcal{F}: Av = 0}.$$
 (15)

Величина $\tau \geq 0$ есть параметр алгоритма. Он отражает приемлемый для исследователя компромисс между подавлением шума (чем больше τ , тем больше подавляется шум) и искажением изображений, компоненты которых близки к нулю. Для выбора значения τ исследователь может смоделировать регистрацию тестового изображения, содержащего требуемые интересующие исследователя «тонкие» детали, и использовать максимальное значение параметра, при котором эти детали сохраняются, или, аналогично [39], минимизировать среднюю погрешность восстановления по набору тестовых данных. Шаг 3 можно также интерпретировать как замену исходного оператора U на такой, ядру которого принадлежат наиболее поражённые шумом компоненты оценки.

4. СРАВНЕНИЕ МЕТОДОВ

Сравнение описанных выше алгоритмов было проведено при моделировании схемы, изображенной на рис. 1. Возможны различные способы выбора шаблонов освещения, от детерминированных (например, шаблонов Адамара) до (псевдо)случайных. В настоящей работе использованы два варианта последних.

В первом варианте использована псевдослучайная бинарная амплитудная модуляция, т.е. на вход оптического волокна подается псевдослучайное изображение, яркость каждого пикселя которого с одинаковой вероятностью принимает либо нулевое, либо единичное значение. Такая модуляция может быть реализована с помощью микрозеркального модулятора. Во втором варианте использована псевдослучайная фазовая модуляция, т.е. на вход оптического волокна подается псевдослучайное изображение, каждый пиксель которого имеет единичную яркость, но вносится псевдослучайная фазовая задержка от 0 до 2π . Обычно фазовая модуляция осуществляется с помощью жидкокристаллического модулятора света.

Изменение пространственного профиля интенсивности при распространении света в многомодовом волокне рассчитывалось с помощью библиотеки руММF (https://github.com/vongostev/pyMMF). При моделировании использованы следующие значения параметров: диаметр оптического волокна 31.25 мкм, длина волокна 50 см, отсутствие изгиба, аппроксимация пространственного распределения показателя преломления параболическим профилем с $n_1 = 1.4613$ и a = 31.25 мкм, численная апертура 0.275, длина волны 632.8 нм.

На рис. 2–5 показаны результаты применения методов восстановления изображения, рассмотренных в предыдущих разделах, при случайной погрешности измерений с дисперсией 0.1 и бинарной амплитудной модуляции. Использованные в вариантах метода сжатых измерений значения параметра регуляризации выбраны методом *L*-кривой (см. разд. 2.4). В случае метода редукции измерения при использовании дополнительной информации об объекте в качестве функционала Ω в (14) и (15) использована анизотропная полная вариация (7), поскольку именно этот функционал показал лучшие результаты по сравнению с другими вариантами метода сжатых измерений. На рис. 3, 4 видно, как ограниченность диаметра оптоволокна приводит к ухудшению качества восстановленного изображения в целом и в особенности у его краев.

Видно, что предлагаемый вариант метода редукции измерения показывает сравнимые и часто лучшие результаты, чем варианты метода сжатых измерений. Примечательно, что несмотря на теоретическое преимущество варианта полной вариации (7), вариант (8) на рис. 3–5 показал близкие результаты к результатам варианта (7), а в ряде случаев результаты использования функционала (8) оказались лучше (7). Представляется, что это связано с бо́льшим числом перепадов яркости на объектах, изображенных на рис. 3–5 по сравнению с рис. 2, в связи с чем «более мягкая» регуляризация функционалом (8) приводит к меньшей погрешности благодаря меньшему сглаживанию этих перепадов.

На рис. 6–9 показаны результаты компьютерного моделирования при получении шаблонов освещения случайной фазовой модуляцией. Сравнение с рис. 2– 5 показывает, что сделанные выводы верны и в этом случае.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложен и применен новый метод редукции измерений для формирования изображений с помощью одиночных многомодовых волокон. Показано, что конечное число мод в волокне не является принципиальным препятствием для получения изображений в ВФО. Проведенный в работе анализ ряда вариантов метода сжатых измерений и варианта метода редукции измерения для формирования изображений в ВФО показал осуществимость этой задачи при числе шаблонов освещения, существенно меньшем числа пикселей восстанавливаемого изображения, несмотря на ограниченное число мод, способных распространяться по оптическому волокну от модулятора до объекта. Выбор алгоритма восстановления $B\Phi O$ оказывает значительное влияние на погрешность результата, в связи с чем приведен пример ситуации, когда в методе сжатых измерений использование в качестве регуляризующего функционала полной вариации с нормой L^2 приволит к лучшим результатам, чем использование функционала полной вариации с нормой L^1 . Продемонстрировано, что предлагаемый вариант метода редукции измерения показывает сравнимые результаты с вариантами метода сжатых измерений. Кроме того, применение метода редукции приводит к менее ярко выраженным артефактам в области, где оптическое волокно слабо передает освещение. Ср., например, рис. 5е и 5и, где метод сжатых измерений восстанавливает удаленные от центра участки как две области постоянной яркости, а метод редукции не восстанавливает резкую границу областей. При этом для получения рис. 5и для формулирования дополнительной информации использован такой же регуляризующий функционал, как и в варианте метода сжатых измерений, использованном для получения рис. 5е. Необходимость использования такой дополнительной информации, отличающая предложенный вариант метода редукции измерений от его непосредственных предшественников, как указано в разд. 3.2, обусловлена тем, что без нее в результате редукции была бы восстановлена лишь составляющая изображения, непосредственно влияющая на результат измерений.

Полученные результаты будут полезны при разработке эндоскопических систем реального времени на основе технологии ВФИ.

Финансирование. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-12-00155).

ЛИТЕРАТУРА

- А. В. Белинский, Д. Н. Клышко, ЖЭТФ 105, 487 (1994) [A. V. Belinskii and D. N. Klyshko, JETP 78, 259 (1994)].
- T. B. Pittman, Y. H. Shih, D. V. Strekalov, and A. V. Sergienko, Phys. Rev. A 52, R3429 (1995).
- А. Гатти, Э. Брамбилла, М. Баке и др., в Квантовое изображение, под ред. М. И. Колобова, А. С. Чиркина, Физматлит, Москва (2009), с. 96 [A. Gatti, E. Brambilla, M. Bache et al., in *Quantum Imaging*, ed. by M. I. Kolobov, Springer (2007), p. 79].
- 4. J. H. Shapiro, Phys. Rev. A 78, 061802 (2008).
- Д. П. Агапов, И. А. Беловолов, П. П. Гостев и др., ЖЭТФ 162, 215 (2022) [D. P. Agapov, I. A. Belovolov, P. P. Gostev et al., JETP 135, 188 (2022)].
- L. V. Amitonova and J. F. de Boer, Opt. Lett. 43, 5427 (2018).
- C. Liu, J. Chen, J. Liu et al., Opt. Exp. 26, 10048 (2018).
- T. Fukui, Y. Kohno, R. Tang et al., J. Lightwave Technol. 39, 839 (2021).
- T. Fukui, Y. Nakano, and T. Tanemura, J. Opt. Soc. Amer. B 38, 379 (2021).
- A. M. Caravaca-Aguirre and R. Piestun, Opt. Exp. 25, 1656 (2017).
- L. M. Xiang, Y. Li, J. Gao et al., Opt. Exp. 28, 13662 (2020).
- D. Yang, M. Hao, G. Wu et al., Opt. Lasers Eng. 149, 106827 (2022).
- D. L. Donoho, IEEE Trans. Inf. Theory 52, 1289 (2006).
- 14. E. J. Candes and T. Tao, IEEE Trans. Inf. Theory 52, 5406 (2006).
- E. J. Candes and M. B. Wakin, IEEE Signal Processing Magazine 25, 21 (2008).
- M. F. Duarte, M. A. Davenport, D. Takhar et al., IEEE Signal Processing Magazine 25, 83 (2008).
- 17. S. Han, H. Yu, X. Shen et al., Appl. Sci. 8, 1379 (2018).
- 18. G. M. Gibson, S. D. Johnson, and M. J. Padgett, Opt. Exp. 28, 28190 (2020).
- 19. P. Zerom, K. W. C. Chan, J. C. Howell et al., Phys. Rev. A 84, 061804 (2011).

- 20. W. Gong and S. Han, Phys. Lett. A 376, 1519 (2012).
- 21. W. Gong and S. Han, Sci. Rep. 5, 9280 (2015).
- 22. P. A. Morris, R. S. Aspden, J. E. C. Bell et al., Nat. Commun. 6, 5913 (2015).
- 23. J. Du, W. Gong, and S. Han, Opt. Lett. 37, 1067 (2012).
- 24. X. Shi, X. Huang, S. Nan et al., Laser Phys. Lett. 15, 045204 (2018).
- L. Mertens, M. Sonnleitner, J. Leach et al., Sci. Rep. 7, 42164 (2017).
- 26. T. Jiang, W. Tan, X. Huang et al., J. Opt. 23, 075201 (2021).
- 27. O. Katz, Y. Bromberg, Y. Silberberg et al., Appl. Phys. Lett. 95, 131110 (2009).
- 28. S. H. Chan and Y. M. Lu, in IEEE Global Conference on Signal and Information Processing (GlobalSIP) Atlanta, GA (2014), p. 312.
- А. В. Гончарский, А. С. Леонов, А. Г. Ягола, Ж. вычислит. матем. и матем. физ. 13, 294 (1973)
 [A. V. Goncharskii, A. S. Leonov, and A. G. Yagola, USSR Comp. Math. Math. Phys. 13, 25 (1973)].
- 30. P. C. Hansen and D. P. O'Leary, SIAM J. Sci. Comp. 14, 1487 (1993).
- C. L. Lawson and R. J. Hanson, *Solving Least Squares Problems* SIAM, Philadelphia, PA (1995).

- 32. G. H. Golub, M. Heath, and G. Wahba, Technometrics 21, 215 (1979).
- 33. P. C. Hansen, BIT 27, 534 (1987).
- 34. M. Marquez, P. Meza, H. Arguello et al., Opt. Exp. 27, 17795 (2019).
- **35**. S. Lu and S. V. Pereverzev, Numerische Math. **118**, 1 (2010).
- 36. Z. Wang, J. Comp. Appl. Math. 236, 1815 (2012).
- 37. M. Belge, M. E. Kilmer, and E. L. Miller, Inverse Problems 18, 1161 (2002).
- C. Brezinski, M. Redivo-Zaglia, G. Rodriguez et al., Numerische Math. 94, 203 (2003).
- 39. J. Chung and M. I. Espanol, Inverse Problems 33, 074004 (2017).
- 40. Ю. П. Пытьев, Методы математического моделирования измерительно-вычислительных систем, Физматлит, Москва (2012).
- Ю. П. Пытьев, Математические методы интерпретации эксперимента, Высшая школа, Москва (1989).
- 42. D. A. Balakin, A. V. Belinsky, and A. S. Chirkin, Quantum Inf. Process. 18(3) (2019).
- 43. D. A. Balakin and A. V. Belinsky, Quant. Inf. Process. 19, 316 (2020).
- D. A. Balakin and Yu. P. Pyt'ev, Pattern Recognition and Image Analysis 31, 601 (2021).

ПОГЛОЩЕНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ С ЧАСТОТОЙ, БЛИЗКОЙ К ГРАНИЦЕ ПРОЗРАЧНОСТИ НЕОДНОРОДНОЙ ПЛАЗМЫ, ОБРАЗОВАННОЙ ПРИ МНОГОФОТОННОЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ ИНЕРТНОГО ГАЗА

К. Ю. Вагин^а, Т. В. Мамонтова^{а,b}, С. А. Урюпин^{а,b*}

^а Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук 119991, Москва, Россия

^b Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ 115409, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 21 июня 2022 г., после переработки 21 июня 2022 г. Принята к публикации 8 июля 2022 г.

Изучено поглощение излучения неоднородной плазмой, образованной при многофотонной ионизации атомов инертного газа. Рассмотрены условия, при которых частота воздействующего излучения близка к плазменной частоте в глубине плазмы, где плотность фотоэлектронов постоянна. В этих условиях из-за расширения области проникновения поля в плазму коэффициент поглощения значительно возрастает. Найдены зависимости коэффициента поглощения от эффективной частоты столкновений фотоэлектронов с нейтральными атомами и от толщины слоя, в котором плотность фотоэлектронов возрастает по линейному закону.

DOI: 10.31857/S0044451022120021 **EDN:** LBYWSG

1. ВВЕДЕНИЕ

При взаимодействии фемтосекундных импульсов лазерного излучения с газами в области фокусировки образуется неоднородная плазма (см., например, [1–6]). Степень ионизации газа зависит от величины плотности потока энергии, длительности импульса и частоты ионизующего излучения. Например, при воздействии на инертные газы излучения с длиной волны ~ 1мкм, плотностью потока энерги
и $10^{12} \text{--} 10^{14} \ \mathrm{Br/cm^2}$ и длительностью импульса не более 100 фс степень ионизации газа сравнительно невелика: ~ 10^{-4} - 10^{-6} [7-11]. При атмосферном давлении такой степени ионизации отвечает концентрация фотоэлектронов ~ 10^{13} - 10^{15} см⁻³. Ионизация газа происходит вследствие многофотонной ионизации атомов и сопровождается образованием сильно неравновесного распределения фотоэлектронов по скоростям [3, 7, 9, 12]. При многофотонной ионизации характерная энергия фотоэлектронов составляет несколько электрон-вольт [7,13–17]. В этих условиях частота столкновений фотоэлектронов с нейтральными атомами $\sim 10^{12}$ с⁻¹, а частота электрон-электронных столкновений менее $\sim 10^{10}~{\rm c}^{-1}.$ Вследствие частых столкновений фотоэлектронов с нейтральными атомами после воздействия лазерного импульса за время ~ 1 пс происходит релаксация по направлениям импульса и формируется изотропное распределение фотоэлектронов по скоростям. Релаксация распределения фотоэлектронов по энергии в основном происходит из-за электрон-электронных столкновений за время большее ~ 100 пс. Тем самым, в сравнительно широком временном интервале существует неоднородная фотоионизованная плазма с сильно неравновесным распределением фотоэлектронов по энергии. В этом временном интервале изменением профиля плотности из-за расширения фотоионизованной плазмы можно пренебречь. При плотности электронов $\sim 10^{15}~{\rm cm}^{-3}$ плазменная частота электронов ω_L составляет ~ 10^{12} с⁻¹ и взаимодействие с фо-

[•] E-mail: uryupin@sci.lebedev.ru

тоионизованной плазмой терагерцевого излучения с частотой $\omega \sim 10^{12} \text{ c}^{-1}$ происходит в условиях, когда $\omega \sim \omega_L$. Такой диапазон частот интересен тем, что в фотоионизованной плазме, образованной при ионизации инертного газа, существует возможность усиления терагерцевого излучения [9–11,18]. Также возможны условия, в которых значительно возрастает поглощение терагерцевого излучения [19]. При этом коэффициент поглощения сильно зависит от степени неоднородности фотоионизованной плазмы [20]. Отметим, что при рассмотрении воздействия излучения с частотой $\omega \sim \omega_L$ и частых столкновениях фотоэлектронов можно пренебречь влиянием развития апериодической неустойчивости (см., например, [21–23]). В работе [20] описано взаимодействие терагерцевого излучения с неоднородной фотоионизованной плазмой, в которой плотность фотоэлектронов возрастает линейно от нуля до постоянного значения. В [20] рассмотрены условия, когда частота терагерцевого излучения ω сильно отличается от плазменной частоты фотоэлектронов ω_L в области постоянной плотности. При этом остались не изученными условия, в которых $\Delta \omega = \omega_L - \omega \ll \omega_L$. Вместе с тем в этих условиях значительно увеличивается расстояние, на которое проникает терагерцевое излучение в глубь фотоионизованной плазмы, и наиболее ярко проявляются особенности взаимодействия неравновесной плазмы с воздействующим излучением. Рассмотрению проникновения излучения в неоднородную фотоионизованную плазму, образованную при многофотонной ионизации инертного газа, в условиях, когда $\Delta \omega \ll \omega_L$, посвящена настоящая работа. В предположении, что по мере удаления от границы плазмы плотность фотоэлектронов увеличивается линейно до постоянного значения на расстояниях больших L, получены общие выражения для поля в плазме и коэффициента поглощения. Основное внимание уделено рассмотрению условий, в которых ν_{α} — эффективная частота столкновений электронов с атомами инертного газа — меньше ω_L . Если L меньше электромагнитного масштаба c/ω_L , то распределение поля и коэффициент поглощения переходят в полученные ранее для плазмы, в которой плотность фотоэлектронов изменяется скачком (см. [19]). Если *L* больше c/ω_L , то структура поля и коэффициент поглощения А зависят как от величины L, так и от соотношения $\Delta \omega$ и ν_{α} . В частности, при $\Delta \omega \gg \nu_{\alpha}$ поле осциллирует до точки критической плотности $z_0 \sim L$, а амплитуда осцилляций возрастает по мере удаления от границы плазмы. Из-за увеличения амплитуды и глубины проникновения поля в плазму возрастает коэффициент поглощения. Если расстояние от точки z_0 до области постоянной плотности относительно мало, то A возрастает пропорционально $L^{1/3}$ и $\nu_{\alpha}(\Delta\omega\omega_L)^{-1/2}$. По мере увеличения $L - z_0$ сначала зависимость A от Lстановится линейной, $A \sim L\nu_{\alpha}/c$, а затем коэффициент поглощения A близок к единице. При $\Delta\omega \ll \nu_{\alpha}$ зависимость A от $\Delta\omega$ отсутствует. Границы применимости асимптотических формул для A определяются ν_{α} , а не $\Delta\omega$. При этом закономерности увеличения A с ростом L подобны установленным в случае $\Delta\omega \gg \nu_{\alpha}$. Существенное отличие возникает в области, где $A \sim L^{1/3}$, в этой области A слабее зависит от частоты столкновений: $A \sim (\nu_{\alpha}/\omega_L)^{1/2}$.

2. ФОТОИОНИЗОВАННАЯ ПЛАЗМА

Рассмотрим взаимодействие монохроматической электромагнитной волны с неоднородной плазмой, образованной при многофотонной ионизации инертных газов и занимающей область пространства z > 0 (см. рис.1). Примем, что в слое 0 < z < L плотность



Рис. 1. Взаимодействие электромагнитной волны с фотоионизованной плазмой

фотоэлектронов n(z) возрастает линейно с увеличением координаты от n = 0 при z = 0 до n_0 при z = L, а при z > L остается постоянной $n = n_0$. Степень ионизации инертного газа считаем малой настолько, что при описании взаимодействия фотоионизованной плазмы с пробной монохроматической волной достаточно учитывать столкновения фотоэлектронов с нейтральными атомами. При этом на временах, больших времени релаксации импульса, но меньших времени релаксации энергии фотоэлектронов, после образования плазмы при многофотонной ионизации инертного газа функцию распределения фотоэлектронов по скоростям аппроксимируем выражением вида

$$f(v, z) = \frac{n(z)}{4\pi v_0^2} \,\delta(v - v_0) \,.$$

Здесь $v_0 = \sqrt{2\epsilon_0/m}$, m — масса электрона, а ϵ_0 — энергия фотоэлектрона, полученная при многофотонной ионизации атома инертного газа.

Интересуясь взаимодействием электромагнитной волны с такой плазмой, считаем, что частота волны много больше, чем обратное время релаксации по энергии. Кроме того, примем, что частота волны удовлетворяет неравенству $\omega \gg \omega_L v_0/c$, где c — скорость света, $\omega_L = \sqrt{4\pi n_0 e^2/m}$, e — заряд электрона. Напряженность поля воздействующей электромагнитной волны представим в виде

$$\mathbf{E}(z,t) = (1/2) (E_0, 0, 0) \exp[-i\omega (t - z/c)] + \text{c.c.}$$

Электромагнитная волна порождает в плазме направленное вдоль оси x электрическое поле вида $(1/2) (E(z), 0, 0) \exp(-i\omega t) + \text{с.с.}$ и приводит к малому возмущению функции распределения фотоэлектронов по скоростям вида $(1/2) \delta f(\mathbf{v}, z) \exp(-i\omega t) + \text{с.с.}$ Для определения $\delta f(\mathbf{v}, z)$ воспользуемся линеаризованным кинетическим уравнением с интегралом столкновений, описывающим релаксацию по направлениям скорости фотоэлектронов без изменения их энергии,

$$-i\omega\delta f(\mathbf{v},z) + \frac{e}{m}E(z)\frac{\partial f(v,z)}{\partial v_x} =$$
$$= -\nu(v)\left[\delta f(\mathbf{v},z) - \int \frac{d\Omega}{4\pi}\delta f(\mathbf{v},z)\right], \quad (1)$$

где $d\Omega$ — элемент телесного угла. Частоту столкновений фотоэлектронов с атомами инертного газа представим в виде $\nu(v) = N\sigma_{tr}(v)v$, где N — концентрация нейтральных атомов, $\sigma_{tr}(v)$ транспортное сечение рассеяния электронов на нейтральных атомах, которое зависит от их скорости. Использование такого выражения для частоты столкновений оправдано тем, что при многофотонной ионизации типичная энергия ϵ_0 не превышает нескольких электронвольт, а порог неупругих столкновений электронов с атомами в одноатомных инертных газах заметно выше. Зависимостью концентрации нейтральных атомов от координаты z пренебрегаем, что возможно в слабо ионизованном газе. Решение уравнения (1) имеет вид $\delta f(\mathbf{v},z) = (e/m[i\omega - \nu(v)]) E(z) \partial f(v,z) / \partial v_x$. Itcпользуя это решение, находим плотность тока вдоль оси x: $j(z) = e \int d\mathbf{v} v_x \delta f(\mathbf{v}, z)$. Затем из уравнений Максвелла получаем уравнение для поля в плазме,

$$\frac{d^2 E(z)}{dz^2} + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega, z) E(z) = 0, \qquad (2)$$

где диэлектрическая проницаемость имеет вид

$$\varepsilon(\omega, z) = 1 - \frac{\omega_L^2(z)}{\omega(\omega + i\nu)} \left[1 - i\frac{\alpha}{3}\frac{\nu}{\omega + i\nu} \right].$$
(3)

Здесь

$$\omega_L(z) = \sqrt{4\pi n(z) e^2/m},$$

 $\nu \equiv \nu (v_0)$, а $\alpha = \partial \ln \nu / \partial \ln v_0$ — величина, определяющаяся средней энергией фотоэлектронов и видом зависимости транспортного сечения рассеяния от энергии. Заметим, что в инертных газах транспортное сечение рассеяния в области энергий, немного меньших 1 эВ, имеет минимум [24–26], а в точке, отвечающей средней энергии фотоэлектронов, производная частоты столкновений больше нуля. Поэтому обычно параметр α имеет положительные значения. Именно такие условия рассматриваются ниже.

3. ОБЩИЕ СООТНОШЕНИЯ

Вид решения уравнения (2) зависит от вида зависимости плотности фотоэлектронов от координаты. При z < 0, где n = 0, решение уравнения представляется в виде суммы падающей и отраженой волн. В области z > L, где $n = n_0$, решение ищется в виде волны, уходящей в глубь плазмы, если $\text{Re } \varepsilon > 0$, где $\varepsilon = \varepsilon(\omega, L)$, или в виде убывающего поля, если $\text{Re } \varepsilon < 0$. В области 0 < z < L, где $n = n_0 z/L$, после введения переменной ξ ,

$$\xi = \xi(z) = \left(\frac{\omega^2}{z_0 c^2}\right)^{1/3} (z - z_0), \qquad (4)$$

где $z_0 = L/(1-\varepsilon)$ — координата точки, в которой диэлектрическая проницаемость равна единице, $\varepsilon(\omega, z_0) = 1$, уравнение (2) приводится к уравнению Эйри, а его решение ищется в виде $C_1 \operatorname{Ai}(\xi) + C_2 \operatorname{Bi}(\xi)$, где $\operatorname{Ai}(\xi)$ и $\operatorname{Bi}(\xi)$ — функции Эйри. Неизвестные константы C_1 , C_2 и константы, определяющие поле при z = L и поле отраженной волны, находятся из условий непрерывности тангенциальных компонент электрического и магнитного полей при z = 0 и z = L. Учитывая сказанное выше, электрическое поле внутри слоя переменной плотности 0 < z < L можно представить в виде

$$E(\xi) = 2E_0 \frac{A_+(\xi_L)\operatorname{Bi}(\xi) - B_+(\xi_L)\operatorname{Ai}(\xi)}{B_-(\xi_0)A_+(\xi_L) - A_-(\xi_0)B_+(\xi_L)}.$$
 (5)

Здесь использованы обозначения $\xi_0 = \xi(0),$ $\xi_L = \xi(L),$

$$A_{\pm}(\xi) = \operatorname{Ai}(\xi) \pm \frac{i}{\sqrt{-\xi}} \operatorname{Ai}'(\xi),$$

$$B_{\pm}(\xi) = \operatorname{Bi}(\xi) \pm \frac{i}{\sqrt{-\xi}} \operatorname{Bi}'(\xi).$$
(6)

2 ЖЭТФ, вып. 6 (12)

В области z > L, где плотность фотоэлектронов постоянна, электрическое поле имеет вид

$$E(z) = E(\xi_L) \exp\left[i\frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon}(z-L)\right],$$
(7)

где ветвь комплексного корня $\sqrt{\varepsilon}$ выбирается таким образом, что $\mathrm{Im}\sqrt{\varepsilon} > 0$ и $\mathrm{Re}\sqrt{\varepsilon} > 0$. Коэффициент поглощения A, определяющий долю переданной плазме энергии падающей волны, находится из соотношения

$$A = 1 - \left|\frac{E(+0)}{E_0} - 1\right|^2 = 1 - \left|\frac{E(\xi_0)}{E_0} - 1\right|^2.$$
 (8)

В случае малых значений аргументов, воспользовавшись разложением функций Эйри Ai(ξ) = $a - b\xi$, Bi(ξ) = $\sqrt{3}(a + b\xi)$, где $a = 1/3^{2/3}\Gamma(2/3)$, $b = 1/3^{1/3}\Gamma(1/3)$, $\Gamma(x)$ — гамма-функция Эйлера (см. 10.4.2, 10.4.3 в [27]), из (5) и (6) приближенно имеем

$$E(\xi) \approx 2E_0 \frac{i/\sqrt{-\xi_L - \xi}}{i/\sqrt{-\xi_L} + i/\sqrt{-\xi_0}}.$$
 (9)

При этом коэффициент поглощения имеет вид

$$A = 1 - \left| \frac{1 - \sqrt{\varepsilon}}{1 + \sqrt{\varepsilon}} \right|^2.$$
 (10)

В случае, когда аргумент ξ_L мал, а для аргумента ξ_0 можно использовать асимптотические представления функций Эйри вида (см. 10.4.60, 10.4.62, 10.4.64, 10.4.67 в [27])

$$Ai (-\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\xi^{1/4}} \sin\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right),$$

$$Bi (-\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\xi^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right),$$
(11)

где $|\arg \xi| < 2\pi/3$, для электрического поля внутри слоя переменной плотности фотоэлектронов из (5) и (6) имеем

$$E(\xi) \approx E_0 \sqrt{\pi} (-\xi_0)^{1/4} \left[\left(a - \frac{ib}{\sqrt{-\xi_L}} \right) \operatorname{Bi}(\xi) - \sqrt{3} \left(a + \frac{ib}{\sqrt{-\xi_L}} \right) \operatorname{Ai}(\xi) \right] \times \\ \times \exp \left[i \frac{2}{3} \left(-\xi_0 \right)^{3/2} + i \frac{\pi}{4} \right] \times \\ \times \left[a \exp \left(-i \frac{\pi}{3} \right) - \frac{ib}{\sqrt{-\xi_L}} \exp \left(i \frac{\pi}{3} \right) \right]^{-1}.$$
(12)

При этом для коэффициента поглощения находим

$$A = 1 - \left| \exp\left[i\frac{4}{3} \left(-\xi_0 \right)^{3/2} \right] \left[1 - \frac{a}{b} \sqrt{-3\xi_L} \right] \right|^2.$$
(13)

Еще один случай имеет место, когда для аргумента ξ_0 можно использовать формулы (11), а для аргумента ξ_L применимы асимптотические формулы (см. 10.4.59, 10.4.63 в [27]):

$$Ai(\xi) = \frac{\xi^{-1/4}}{2\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right), \quad |\arg\xi| < \pi,$$

$$Bi(\xi) = \frac{\xi^{-1/4}}{\sqrt{\pi}} \exp\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right), \quad |\arg\xi| < \frac{\pi}{3}.$$
(14)

В этом случае для напряженности электрического поля (5) имеем

$$E(\xi) = 2E_0\sqrt{\pi} (-\xi_0)^{1/4} \exp\left[i\frac{2}{3} (-\xi_0)^{3/2} - i\frac{\pi}{4}\right] \operatorname{Ai}(\xi).$$
(15)

При этом коэффициент поглощения (8) имеет вид

$$A = 1 - \left| \exp\left[i\frac{4}{3} \left(-\xi_0 \right)^{3/2} \right] \right|^2.$$
 (16)

Приведенные в этом разделе выражения (9), (12), (15) и (10), (13), (16) позволяют дать анализ структуры поля и коэффициента поглощения в зависмости от параметров плазмы и частоты воздействующего излучения.

4. РЕЖИМЫ ПРОНИКНОВЕНИЯ ПОЛЯ

Воспользуемся полученными выше общими выражениями при анализе структуры поля и коэффициента поглощения в слабо ионизованной плазме с неоднородным распределением плотности фотоэлектронов. Рассмотрим условия, в которых частота воздействующего поля близка к плазменной частоте: $\omega = \omega_L - \Delta \omega$, где $\Delta \omega \ll \omega_L$. Кроме того, примем, что частота столкновений электронов с нейтральными атомами также меньше плазменной частоты: $\nu \ll \omega_L$. В этих условиях диэлектрическая проницаемость плазмы в области постоянной плотности мала,

$$\varepsilon = -\frac{2\Delta\omega}{\omega_L} + i\frac{\nu_\alpha}{\omega_L},\tag{17}$$

и $z_0 \approx L$, так как обычно частота $\nu_{\alpha} = \nu(1 + \alpha/3)$ численно близка к ν . При этом приближенно имеем $\xi_0 \approx -(L\omega_L/c)^{2/3}, \, \xi_L \approx \varepsilon \xi_0.$

4.1. Тонкий слой

Если толщина неоднородного слоя мала настолько, что $L \ll c/\omega_L$, то при рассмотрении поля и коэффициента поглощения можно использовать соотношения (9) и (10), применимые при малых значениях ξ_0 и ξ_L . Тогда, учтя явный вид ε (17) и величин ξ_0 , ξ_L , для поля и коэффицента поглощения имеем

$$E(z) = \frac{2E_0}{1+\sqrt{\varepsilon}} \left[1 + i\frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon}(z-z_0) \right], \qquad (18)$$

$$A = 4 \left[\sqrt{\left(\frac{\Delta\omega}{\omega_L}\right)^2 + \left(\frac{\nu_\alpha}{2\omega_L}\right)^2} - \frac{\Delta\omega}{\omega_L} \right]^{1/2}.$$
 (19)

Отметим, что в случае столь тонкого неоднородного слоя из выражения (19) следуют результаты работы [19]. Действительно, из (19) при $|\Delta \omega| \ll \nu_{\alpha}/2$ получаем формулу (26) из [19]. Если $\Delta \omega > 0$ и $\Delta \omega \gg \nu_{\alpha}/2$, то получаем формулу (21) из [19]. Если $\Delta \omega < 0$ и $|\Delta \omega| \gg \nu_{\alpha}/2$, то получаем формулу (30) из [19].

4.2. Слой средней толщины

Если толщина слоя неоднородной плотности фотоэлектронов удовлетворяет неравенствам

$$\frac{c}{\omega_L} \ll L \ll \frac{c}{\omega_L} \left[\left(\frac{2\Delta\omega}{\omega_L} \right)^2 + \left(\frac{\nu_\alpha}{\omega_L} \right)^2 \right]^{-3/4}, \quad (20)$$

то для анализа структуры поля и коэффициента поглощения воспользуемся соотношениями (12) и (13). Зависимость поля от координаты z описывается соотношением (12), если в него подставить $\xi(z)$ (4). Согласно (12) по мере удаления от границы плазмы амплитуда напряженности поля медленно возрастает от E_0 до $\approx E_0 (L\omega_L/c)^{1/6}$ при $z \approx z_0$ и далее почти не изменяется вплоть до $z \approx L$. При этом характерный пространственный масштаб осцилляций поля увеличивается от $c/\omega \approx c/\omega_L$ вблизи границы плазмы до $(Lc^2/\omega^2)^{1/3} \approx (Lc^2/\omega_L^2)^{1/3}$ в окрестности точки z_0 . Такое поведение поля иллюстрирует рис. 2, на котором приведена зависимость |E(z)| от z в слое с неоднородной плотностью фотоэлектронов.

Численные расчеты для рис. 2 выполнены в предположении, что при воздействии короткого импульса лазерного излучения на ксенон с плотностью атомов $N = 2.5 \cdot 10^{17}$ см⁻³ образовался слабоионизованный газ с $\epsilon_0 = 4$ эВ и степенью ионизации 10^{-3} . В этом случае $\omega_L = 0.9 \cdot 10^{12}$ с⁻¹, $\nu \approx 0.01 \omega_L$. Частоту падающего излучения считаем равной $\omega = 0.97 \omega_L$, а толщину неоднородного слоя $L = 20c/\omega_L$.

Изменение структуры поля сопровождается изменением коэффициента поглощения. Учтя явный вид ξ_0 , ξ_L и ε , представим коэффициент поглощения (13) в виде



Рис. 2. Зависимость абсолютной величины электрического поля от расстояния до границы плазмы в случае слоя средней толщины



Рис. 3. Зависимость абсолютной величины электрического поля от расстояния до границы плазмы в случае толстого слоя

$$A = 1 - \exp\left(-\frac{8}{3}\frac{\nu_{\alpha}L}{c}\right)\left(1 - 2\sqrt{3}\frac{a}{b}\left(\frac{L\omega_L}{c}\right)^{1/3} \times \left[\sqrt{\left(\frac{\Delta\omega}{\omega_L}\right)^2 + \left(\frac{\nu_{\alpha}}{2\omega_L}\right)^2} - \frac{\Delta\omega}{\omega_L}\right]^{1/2}\right).$$
 (21)

Рассмотрим выражение (21) в случаях редких и частых столкновений фотоэлектронов. Сначала примем, что $\Delta \omega \gg \nu_{\alpha}/2$. Тогда, если толщина слоя неоднородной плотности удовлетворяет неравенствам

$$c/\omega_L \ll L \ll (c/\omega_L) \left(\omega_L/\Delta\omega\right)^{3/4},$$
 (22)

то из (21) приближенно имеем

$$A = \frac{3^{1/6} \Gamma(1/3)}{\sqrt{2} \Gamma(2/3)} \left(\frac{L\omega_L}{c}\right)^{1/3} \frac{\nu_{\alpha}}{\sqrt{\Delta\omega\omega_L}} \approx \\ \approx 1.7 \left(\frac{L\omega_L}{c}\right)^{1/3} \frac{\nu_{\alpha}}{\sqrt{\Delta\omega\omega_L}}.$$
 (23)

При этом по-прежнему основное поглощение поля происходит в скин-слое плотной плазмы глубиной $\sim c/\sqrt{\Delta\omega\omega_L}$. Если же

$$(c/\omega_L) \left(\omega_L/\Delta\omega\right)^{3/4} \ll L \ll (c/\omega_L) \left(\omega_L/2\Delta\omega\right)^{3/2},$$
(24)

где правое неравенство обеспечивает малость ξ_L (см. (20)), то

$$A = 1 - \exp\left[-\frac{8}{3}\frac{\nu_{\alpha}L}{c}\right].$$
 (25)

Из сравнения (23) и (25) видно, что при $L \approx (c/\omega_L) (\omega_L/\Delta \omega)^{3/4}$ изменяется зависимость коэффициента поглощения от L. Если $(c/\omega_L) (\omega_L/\Delta \omega)^{3/4} \ll L \ll c/\nu_{\alpha}$, то $A \approx (8/3)\nu_{\alpha}L/c$, а при $L \gg c/\nu_{\alpha}$ коэффициент поглощения экспоненциально близок к единице. При толщинах L, удовлетворяющих неравенствам (24), а также при больших L поглощение поля происходит в слое неоднородной плотности.

В случае относительно частых столкновений, когда $\nu_{\alpha}/2\gg\Delta\omega,$ при L,удовлетворяющей неравенствам

$$c/\omega_L \ll L \ll (c/\omega_L) \left(\omega_L/\nu_\alpha\right)^{3/4},$$
 (26)

из (21) имеем

$$A = \sqrt{23^{1/6}} \frac{\Gamma(1/3)}{\Gamma(2/3)} \left(\frac{L\omega_L}{c}\right)^{1/3} \sqrt{\frac{\nu_\alpha}{\omega_L}} \approx \\ \approx 3.4 \left(\frac{L\omega_L}{c}\right)^{1/3} \sqrt{\frac{\nu_\alpha}{\omega_L}}.$$
 (27)

При еще большей толщине неоднородного слоя, когда

$$(c/\omega_L) \left(\omega_L/\nu_\alpha\right)^{3/4} \ll L \ll (c/\omega_L) \left(\omega_L/\nu_\alpha\right)^{3/2}, \quad (28)$$

коэффициент поглощения описывается соотношением (25).

4.3. Толстый слой

При большой толщине слоя, когда выполнено условие

$$L \gg \frac{c}{\omega_L} \left[\left(\frac{2\Delta\omega}{\omega_L} \right)^2 + \left(\frac{\nu_\alpha}{\omega_L} \right)^2 \right]^{-3/4}, \qquad (29)$$

при рассмотрении распределения поля и коэффициента поглощения можно воспользоваться соотношениями (15) и (16). Достаточно подставить в эти соотношения явные выражения переменной $\xi(z)$ (4) и ξ_0 — ее значение на границе плазмы. Распределение поля в толстом неоднородном слое представлено на рис. 3. Численные расчеты для рис. 3 выполнены при тех же параметрах плазмы, что и для рис. 2, однако толщина неоднородного слоя предполагалась равной $L = 120c/\omega_L$. Основное отличие рис. 3 от рис. 2, приведенного для более тонкого слоя, состоит в том, что, не доходя до области постоянной плотности, напряженность поля становится экспоненциально малой. При большой толщине неоднородного слоя коэффициент поглощения описывается соотношением (25).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Из соотношений (19), (23), (25) и (27) видно, что чем медленнее возрастает плотность фотоэлектронов, тем больше коэффициент поглощения. Увеличение поглощения обусловлено тем, что при медленном возрастании плотности фотоэлектронов расширяется область проникновения поля в плазму. Такая тенденция имеет место и при $\omega \ll \omega_L$ (см., например, [20]). Однако в случае $\omega \sim \omega_L$ есть дополнительное увеличение коэффициента поглощения, которое реализуется при $\Delta \omega \gg \nu_{\alpha}$ и промежуточной толщине неоднородного слоя. Увеличение проявляется в условиях, когда положение точки критической плотности z_0 близко к границе области постоянной плотности, т.е. $L - z_0$ мало по сравнению как с длиной волны, так и с глубиной скин-слоя. В этих условиях, с одной стороны, амплитуда поля возрастает по мере приближения к точке z_0 , а с другой стороны, его величина почти не изменяется на расстоянии $L-z_0$ и подросшее поле поглощается в относительно глубоком скин-слое в области постоянной плотности: $c/\sqrt{\Delta\omega\omega_L} \gg c/\omega_L$. К увеличению поглощения приводит и эффект Рамзауэра-Таунсенда, из-за которого эффективная частота столкновений фотоэлектронов с нейтральными атомами инертного газа увеличивается в $1 + \alpha/3$ раз.

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 20-32-90158, а также поддержано программой Приоритет 2030 НИЯУ МИФИ.

ЛИТЕРАТУРА

- **1**. Н.Б. Делоне, В.П. Крайнов, УФН **168**, 531 (1998).
- **2**. В.П. Крайнов, ЖЭТФ **138**, 196 (2010).

- A. Sharma, M. N. Slipchenko, M. N. Shneider et al., Sci. Reports 8, 2874 (2018).
- N. Lemos, L. Cardoso, J. Geada et al., Sci. Reports 8, 3165 (2018).
- Y. H. Tang, Z. Gong, J. Q. Yu et al., Phys. Rev. E 100, 063203 (2019).
- Wang Sheng, Fu Tang, Zhelin Zhang et al., Opt. Express 29, 8676 (2021).
- H.G. Muller, H.B. van Linden van den Heuvell, P. Agostini et al., Phys. Rev. Lett. 60, 565 (1988).
- N. B. Delone and V. P. Krainov, *Multiphoton Processes in Atoms*, Springer Verlag, Berlin (1994), p.1.
- А.В. Богацкая, А.М. Попов, Письма в ЖЭТФ 97, 453 (2013).
- А.В. Богацкая, Е.А. Волкова, А.М. Попов, КЭ 43, 1110 (2013).
- А.В. Богацкая, Е.А. Волкова, А.М. Попов, КЭ 44, 1091 (2014).
- T. Marchenko, H. G. Muller, K. J. Schafer et al., J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. 43, 185001 (2010).
- P. Agostini, F. Fabre, G. Mainfray et al., Phys. Rev. Lett. 42, 1127 (1979).
- 14. G. Petite, P. Agostini, and F. J. Yergeau, J. Opt. Soc. Amer. B 4, 765 (1987).

- Hui-Peng Kang, Chuan-Liang Wang, Zhi-Yang Lin et al., Chinese Phys. Lett. 28, 083201 (2011).
- 16. Min Li, Peng Zhang, Siqiang Luo et al., Phys. Rev. A 92, 063404 (2015).
- Linlin Zhang, Zhiming Miao, Wei Zheng et al., Chem. Phys. 523, 52 (2019).
- **18**. К.Ю. Вагин, С.А. Урюпин, ЖЭТФ **138**, 757 (2010).
- 19. K. Yu. Vagin, T. V. Mamontova, and S. A. Uryupin, Phys. Rev. A 102, 023105 (2020).
- 20. K. Yu. Vagin, T. V. Mamontova, and S. A. Uryupin, Phys. Rev. E 104, 045203(2021).
- **21**. В.П. Крайнов, ЖЭТФ **123**, 487 (2003).
- 22. V.P. Krainov, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. 36, 3187 (2003).
- 23. А.Ю. Романов, В.П. Силин, С.А. Урюпин, ЖЭТФ
 126, 843 (2004).
- 24. J.S. Townsend and V.A. Bailey, The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science 42, 873 (1921).
- 25. C. Ramsauer, Ann. Physik 369, 513 (1921).
- 26. R. B. Brode, Rev. Mod. Phys. 5, 257 (1933).
- 27. M. Abramowitz and I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables, New York, Dover (1964).

ИЗЛУЧЕНИЕ МАТЕРИАЛЬНОЙ ЧАСТИЦЫ, НАХОДЯЩЕЙСЯ В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СРЕДЕ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

Б. А. Беляев ^{а,b*}, В. В. Тюрнев ^а, Д. А. Шабанов ^{а,b}

^а Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ Сибирского отделения Российской академии наук 660036, Красноярск, Россия

> ^b Сибирский федеральный университет 660041, Красноярск, Россия

> Поступила в редакцию 15 июля 2022 г., после переработки 19 июля 2022 г. Принята к публикации 20 июля 2022 г.

Учет излучения материальной частицы с отрицательной относительной диэлектрической проницаемостью ε_p , находящейся под воздействием электромагнитного поля в среде с диэлектрической проницаемостью ε_m , исключает неограниченный рост электрического дипольного момента частицы и порождаемых им электрических полей при $2\varepsilon_m + \varepsilon_p \to 0$ в случае отсутствия потерь в среде и в частице. Рассчитанные потери на излучение описываются поправкой к диэлектрическим потерям реальной частицы. На примере полистирола с наночастицей серебра, имеющей отрицательную диэлектрическую проницаемость в оптическом диапазоне, исследовано поведение поправки в зависимости от размера частицы при изменении ее диэлектрической проницаемости в интервале $-16 < \varepsilon_p < 16$. Установлено, что даже при положительных значениях диэлектрической проницаемости наночастицы учет излучения существенно повышает точность квазистатического расчета.

DOI: 10.31857/S0044451022120033 **EDN:** LCBAMP

1. ВВЕДЕНИЕ

Композиты, состоящие из диэлектрической матрицы с металлическими частицами размером меньше длины свободного пробега электронов, обладают высокой добротностью в диапазоне ниже оптических частот и привлекают внимание исследователей возможностью значительного увеличения эффективной диэлектрической проницаемости среды с ростом концентрации частиц, что используется, в частности, при конструировании многослойных полосно-пропускающих фильтров терагерцевого диапазона [1]. Квазистатический расчет эффективной диэлектрической проницаемости композита, содержащего в диэлектрической матрице сферические частицы, был впервые предложен Максвеллом-Гарнеттом [2]. Однако точность этого расчета с увеличением концентрации частиц быстро уменьшается, так как в нем не учитывается электродипольное взаимодействие поляризованных частиц [3]. Это взаимодействие было учтено Бруггеманом [4] в приближении среднего поля (приближение эффективной среды), причем считалось, что размер частицы с учетом ее диэлектрической проницаемости много меньше длины волны.

В теории эффективной среды [5] решается квазистатическая задача о возбуждении дипольных колебаний в сферической частице радиусом *R*, находящейся во внешнем электроманитном поле. Решение этой задачи выражается формулами [6]

$$\varphi_{i} = -\frac{3\varepsilon_{m}}{2\varepsilon_{m} + \varepsilon_{p}} \mathbf{E}_{0} \cdot \mathbf{r},$$

$$\varphi_{s} = \frac{\varepsilon_{p} - \varepsilon_{m}}{2\varepsilon_{m} + \varepsilon_{p}} \frac{R^{3}}{r^{3}} \mathbf{E}_{0} \cdot \mathbf{r},$$
(1)

где \mathbf{E}_0 — заданный вектор напряженности внешнего электрического поля, φ_i и φ_s — искомые квазистатические потенциалы электрического поля \mathbf{E}_i внутри частицы ($r \leq R$) и поля рассеяния \mathbf{E}_s снаружи

^{*} E-mail: belyaev@iph.krasn.ru

частицы $(r \geq R)$, а ε_p и ε_m — комплексные относительные диэлектрические проницаемости материала частицы и окружающей ее среды. Сравним потенциал φ_s с потенциалом φ_p поля точечного дипольного момента **р**, выражаемого формулой

$$\varphi_p = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{4\pi\varepsilon_0 \varepsilon_m r^3},\tag{2}$$

где ε_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума. Формула (2) получается из кулоновского потенциала

$$\varphi_q = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_m r} \tag{3}$$

точечного заряда q и известного соотношения [7]

$$\varphi_p = -\frac{\mathbf{p}}{q} \operatorname{grad} \varphi_q, \tag{4}$$

выражающего потенциал точечного диполя через потенциал точечного заряда. Из выражений для потенциалов φ_s и φ_p получаем формулу

$$\mathbf{p} = 3V\varepsilon_0\varepsilon_m \frac{\varepsilon_p - \varepsilon_m}{2\varepsilon_m + \varepsilon_p} \mathbf{E}_0 \tag{5}$$

для дипольного момента частицы, где $V = 4\pi R^3/3$ — объем частицы. Этот дипольный момент, согласно формулам (1), порождает внутреннее поле

$$\mathbf{E}_{i} = \frac{3\varepsilon_{m}}{2\varepsilon_{m} + \varepsilon_{p}} \mathbf{E}_{0} \tag{6}$$

и поле рассеяния

$$\mathbf{E}_{s} = \frac{\varepsilon_{p} - \varepsilon_{m}}{2\varepsilon_{m} + \varepsilon_{p}} \frac{R^{3}}{r^{3}} [3\mathbf{r}R^{-2}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}_{0}) - \mathbf{E}_{0}].$$
(7)

Обобщение формулы (6), полученной в квазистатическом приближении, на случай частицы эллипсоидальной формы представляется в виде [6]

$$\mathbf{E}_{i} = \frac{\varepsilon_{m} \mathbf{E}_{0}}{\varepsilon_{m} + (\varepsilon_{p} - \varepsilon_{m}) \,\widehat{\mathbf{N}}},\tag{8}$$

где $\hat{\mathbf{N}}$ — тензор коэффициентов деполяризации. В случае сферической частицы этот тензор принимает одно значение $\hat{\mathbf{N}} = 1/3$.

2. ФОРМУЛИРОВКА ПРОБЛЕМЫ

Заметим, что в знаменателях формул (1), (5)–(7) стоит одинаковая сумма $2\varepsilon_m + \varepsilon_p$. В результате при отсутствии диэлектрических потерь в материалах, когда одна из сред имеет отрицательную диэлектрическую проницаемость, электрический дипольный момент частицы и порождаемые им электрические поля устремляются в бесконечность, если сумма $2\varepsilon_m + \varepsilon_p$ приближается к нулю, что, очевидно, противоречит основополагающим принципам физики. Это противоречие возникает из-за использования квазистатического приближения за пределами его применимости, при этом возможность его разрешения является целью работы. Отрицательными диэлектрическими проницаемостями, как известно, обладают некоторые сегнетоэлектрики [8], а в оптическом диапазоне — металлы и металлические частицы [9, 10]. Поэтому полученные формулы справедливы только при положительных значениях диэлектрических проницаемостей матрицы и частиц, а при различии знаков ε_m и ε_p эти формулы напрямую нельзя использовать в расчетах характеристик композитов.

Указанный недостаток присущ и некоторым другим широко известным уравнениям и формулам, полученным в квазистатическом приближении, в том числе соотношению Клаузиуса-Моссотти, формулам Рэлея, Максвелла-Гарнетта и Бруггемана. На такой недостаток формулы Рэлея было указано в работе [11]. Там же было отмечено, что возбужденная падающей электромагнитной волной частица должна излучать запасаемую энергию, однако это излучение мало, поэтому, как правило, не учитывается. Авторами [11] отмечено, что в случае металлической частицы возбуждаются плазменные колебания, амплитуда которых неограниченно растет при равенстве $2\varepsilon_m + \varepsilon_p = 0$, а значит, излучение частицы также должно увеличиваться, внося соответствующие потери, ограничивающие рост электрических полей, обеспечивая тем самым динамическое равновесие.

3. РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ

Для устранения указанного недостатка квазистатических расчетов необходимо рассчитать величину электромагнитного излучения возбужденной частицей, тем самым учесть связанные с ним ее потери электромагнитной энергии. В рассматриваемой задаче основной вклад в электромагнитное излучение дает излучение электрического диполя [12]. Усредненная по времени мощность его излучения в свободном пространстве на круговой частоте ω выражается формулой [13]

$$\bar{P}_0 = \frac{\omega^4 |\mathbf{p}|^2}{12\pi\varepsilon_0 c^3}.$$
(9)

Здесь c — скорость света в вакууме. Выясним, как изменится эта мощность в случае, когда дипольное излучение частицы происходит в материальной среде, которая может быть и композитом. Для этого запишем формулу, выражающую связь мгновенной мощности излучения P_s с интегралом вектора Пойнтинга [6],

$$P_s = \iint_S [\mathbf{E} \times \mathbf{H}] d\mathbf{s},\tag{10}$$

по всей замкнутой поверхности S, охватывающей этот источник. Выразим в этой формуле поля \mathbf{E} и \mathbf{H} диполя \mathbf{p} , расположенного в материальной среде, через поля \mathbf{E}_1 и \mathbf{H}_1 другого диполя той же величины \mathbf{p} , но расположенного в свободном пространстве. Из формулы (2) видно, что поле \mathbf{E} , порождаемое дипольным моментом \mathbf{p} в материальной среде, связано с полем \mathbf{E}_1 , порождаемым тем же дипольным моментом, но уже в свободном пространстве, соотношением

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_1 / \varepsilon_m. \tag{11}$$

Связь же между электрическим и магнитным полем в материальной среде и в свободном пространстве выражается формулами

$$\mathbf{E} = \sqrt{\frac{\mu_0 \mu_m}{\varepsilon_0 \varepsilon_m}} \mathbf{H}, \qquad \mathbf{E}_1 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} \mathbf{H}_1. \tag{12}$$

Здесь μ_m и μ_0 — соответственно относительная магнитная проницаемость среды и магнитная проницаемость вакуума. После подстановки формул (11) и (12) в формулу (10) получаем выражение для мгновенной мощности излучения:

$$P_s = \frac{1}{\varepsilon_m \sqrt{\varepsilon_m \mu_m}} \iint_S [\mathbf{E}_1 \times \mathbf{H}_1] d\mathbf{s} = \frac{1}{\varepsilon_m \sqrt{\varepsilon_m \mu_m}} P_0.$$
(13)

Отсюда с учетом формулы (9) находим усредненную по времени мощность электродипольного излучения частицы в материальной среде:

$$\bar{P}_s = \frac{\omega^4 |\mathbf{p}|^2}{12\pi c^3 \varepsilon_0 |\varepsilon_m \sqrt{\varepsilon_m \mu_m}|}.$$
(14)

Подставляя сюда (5), получаем искомую формулу

$$\bar{P}_s = \frac{3V^2 \omega^4 \varepsilon_0}{4\pi c^3} \sqrt{\left|\frac{\varepsilon_m}{\mu_m}\right|} \left|\frac{\varepsilon_p - \varepsilon_m}{2\varepsilon_m + \varepsilon_p}\right|^2 E_0^2 \qquad(15)$$

для усредненной по времени излучаемой мощности, выраженной через амплитуду внешнего поля ${f E}_0.$

В уравнениях квазистатики потери мощности, связанные с электромагнитным излучением частицы, не учитываются. Однако эти потери можно учесть, прибавив к мнимой части ее комплексной диэлектрической проницаемости ε_p поправку $\Delta \varepsilon''_p$. Усредненная по времени мощность диэлектрических потерь в частице выражается формулой [6]

$$\bar{P}_{\varepsilon} = \frac{1}{2} V \omega \varepsilon_0 \varepsilon_p'' |\mathbf{E}_i|^2.$$
(16)

ЖЭТФ, том 162, вып. 6 (12), 2022

Поэтому поправке $\Delta \varepsilon_p''$ будет отвечать приращение мощности потерь на излучение

$$\Delta \bar{P}_{\varepsilon} = \frac{1}{2} V \omega \varepsilon_0 \Delta \varepsilon_p'' |\mathbf{E}_i|^2.$$
(17)

Эта формула после подстановки в нее формулы (6) принимает вид

$$\Delta \bar{P}_{\varepsilon} = \frac{9}{2} V \omega \varepsilon_0 \Delta \varepsilon_p'' \left| \frac{\varepsilon_m}{2\varepsilon_m + \varepsilon_p} \right|^2 E_0^2.$$
(18)

Подставляя формулы (15) и (18) в равенство $\Delta \bar{P}_{\varepsilon} = \bar{P}_{s}$, находим искомую поправку

$$\Delta \varepsilon_p^{\prime\prime} = \frac{V\omega^3}{6\pi c^3} \sqrt{\left|\frac{\varepsilon_m}{\mu_m}\right| \left|\frac{\varepsilon_p - \varepsilon_m}{\varepsilon_m}\right|^2}.$$
 (19)

Эту формулу можно переписать в виде

$$\Delta \varepsilon_p^{\prime\prime} = \frac{2}{9} \theta^3 \sqrt{\left|\frac{\varepsilon_m}{\mu_m}\right|} \left|\frac{\varepsilon_p - \varepsilon_m}{\varepsilon_m}\right|^2, \tag{20}$$

если ввести обозначение $\theta = 2\pi R/\lambda$, где λ — длина волны в свободном пространстве.

В результате замена комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon_p = \varepsilon'_p + i \varepsilon''_p$ на

$$\hat{\varepsilon}_p = \varepsilon_p + i\Delta\varepsilon_p'' \tag{21}$$

позволяет в решениях задач квазистатики строго учесть электромагнитное излучение частицы в материальной среде под воздействием внешнего электромагнитного поля. В частности, подставляя (21) в (6), получаем уточненную формулу

$$\mathbf{E}_{i} = \frac{3\varepsilon_{m}}{2\varepsilon_{m} + \hat{\varepsilon}_{p}} \mathbf{E}_{0}$$
(22)

для поля внутри сферической частицы.

Введем относительную поправку δ для внутреннего поля \mathbf{E}_i , обусловленную потерями на излучение частицы, находящейся в среде с диэлектрической проницаемостью ε_m :

$$\delta = \frac{\Delta \varepsilon_p''}{\left|2\varepsilon_m + \varepsilon_p + i\Delta \varepsilon_p''\right|}.$$
(23)

Выясним, сколь она велика при расчете внутреннего поля \mathbf{E}_i по формуле (22) для конкретного случая, например, для частицы серебра, помещенной в полистирол. В оптическом диапазоне на длине волны $\lambda = 397$ нм эти материалы имеют диэлектрические проницаемости $\varepsilon_p = -4.3 + 0.2i$ и $\varepsilon_m = 2.65 + 3 \cdot 10^{-4}i$ [1, 14, 15]. Для заданных параметров на рис. 1 построена зависимость поправки δ от размера частицы. Видно, что по мере увеличения радиуса частицы R поправка δ неограниченно возрастает пропорционально объему частицы (см. формулу (19)), т.е. $\delta \sim R^3$.



Рис. 1. Зависимость относительной поправки δ от размера радиуса частицы



Рис. 2. Зависимости относительной поправки δ от действительной компоненты диэлектрической проницаемости частицы для трех значений диэлектрической проницаемости окружающей среды ε_m

Важно отметить, что отрицательная диэлектрическая проницаемость наночастиц серебра быстро возрастает по модулю с увеличением длины электромагнитной волны и при $\lambda = 1393$ нм достигает величины $\varepsilon_p = -102.0 + 2.6i$ [9, 14]. С учетом этого факта на рис. 2 в широком диапазоне изменения действительной части диэлектрической прони-

цаемости частицы ε'_p представлены зависимости относительной поправки $\delta(\varepsilon'_p)$ для трех значений диэлектрической проницаемости окружающей среды ε_m , но при фиксированных значениях радиуса частицы R = 40 нм и мнимой части ее диэлектрической проницаемости $\varepsilon''_p = 0.2$.

Видно, что зависимости $\delta(\varepsilon'_p)$ на рис. 2 имеют по одному ярко выраженному максимуму и по одному слабо выраженному минимуму. Максимумы располагаются в области отрицательных значений ε'_p вблизи точек, в которых выполняется условие $2\varepsilon_m + \varepsilon_p = 0$, что приводит к резкому увеличению излучения и соответствующему росту диэлектрических потерь частицы. Минимумы располагаются в области положительных значений ε'_p в точках $\varepsilon_m = \varepsilon_p$, в которых согласно формуле (19) излучение частицы отсутствует. Однако с дальнейшим ростом ε'_p излучение монотонно увеличивается, причем значительно медленнее для больших значений диэлектрической проницаемости среды ε_m , что также следует из формулы (19).

Как и ожидалось, при любых значениях диэлектрической проницаемости среды ε_m величина относительной поправки δ много больше для частиц с отрицательной диэлектрической проницаемостью при одинаковых по модулю значениях $|\varepsilon_p|$. В частности, при замене диэлектрической проницаемости частицы серебра на длине волны $\lambda = 397$ нм с $\varepsilon_p=-4.3+0.2i$ на $\varepsilon_p=+4.3+0.2i$ относительная поправка δ уменьшается больше, чем в 100 раз с 0.6 до 3.7 · 10⁻³ независимо от размера частицы. Поэтому поправка $\Delta \varepsilon_p''$, вычисляемая по формуле (19), очень важна, прежде всего, в задачах квазистатики, содержащих частицы с отрицательной диэлектрической проницаемостью. Важно отметить, что поправку на излучение можно не учитывать, если $\Delta \varepsilon_p'' \ll 2 \varepsilon_m'' + \varepsilon_p''$, что видно из формулы (23).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, учет излучения материальной частицы с отрицательной диэлектрической проницаемостью ε_p , находящейся под воздействием электромагнитного поля в диэлектрической среде с положительной диэлектрической проницаемостью ε_m , в случае отсутствия потерь позволяет устранить неограниченный рост электрического дипольного момента частицы и порождаемого им электрического поля при $2\varepsilon_m + \varepsilon_p = 0$. Потери на излучение учитываются поправкой $\Delta \varepsilon_p''$ к диэлектрическим потерям частицы, которая согласно формуле (19) определяется как электромагнитными характеристиками среды и частицы, так и частотой электромагнитного излучения и размерами частицы. Поправка $\Delta \varepsilon_{p}^{\prime\prime}$ пропорциональна кубу частоты (ω^{3}) и кубу радиуса (R³) для сферической частицы. На примере полистирола с частицей серебра, имеющей отрицательную диэлектрическую проницаемость в оптическом диапазоне, исследовано поведение относительной поправки с увеличением размера частицы до 40 нм, а также при изменении ее диэлектрической проницаемости в интервале $-16 \leq \varepsilon'_p \leq 16$. Установлено, что максимумы излучения располагаются в области отрицательных значений ε'_n вблизи точек, в которых выполняется условие $2\varepsilon'_m + \varepsilon'_p = 0$. Важно отметить, что даже при положительных значениях диэлектрических проницаемостей среды и наночастицы учет излучения заметно повышает точность квазистатического расчета.

Представленный расчет учета излучения материальной частицы, находящейся в диэлектрической среде, возможно, позволит решить проблему квазистатического расчета по Бруггеману [4] эффективной диэлектрической проницаемости ε_{eff} композита, содержащего металлические частицы в диэлектрической матрице, описанную в работе [14]. Проблема заключается в том, что с увеличением концентрации металлических частиц, имеющих отрицательную диэлектрическую проницаемость, существует область концентраций в композите, в которой ε_{eff} имеет мнимую компоненту в случае отсутствия потерь в частицах и в матрице. Это, как справедливо отмечено в [14], противоречит физике.

ЛИТЕРАТУРА

 Б.А. Беляев, Ан.А. Лексиков, В.В. Тюрнев и др., ДАН 497, 5 (2021).

- J.C. Maxwell Garnett, Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. A 203, 359 (1904).
- **3**. Б.А. Беляев, В.В. Тюрнев, ЖЭТФ **154**, 716 (2018).
- 4. D.A.G. Bruggeman, Ann. Phys. 24, 636 (1935).
- 5. T.C. Choy, *Effective Medium Theory*, Oxford Univ. Press, Oxford (2016), Ch. 1.
- Л.Д. Ландау, Е.М. Лифпиц, Теоретическая физика, т. 8, Электродинамика сплошных сред, Наука, Москва (1982), §8, §80.
- Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс, Фейнмановские лекции по физике, вып. 5, Электричество и магнетизм, Мир, Москва (1977), гл. 6, §4 (6.16); R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands, The Feynman Lectures on Physics. Mainly Electromagnetism and Matter, Reading (1964), Ch. 6-4 (6.16).
- D.J.R. Appleby, N.K. Ponon, K.S.K. Kwa et al., Nano Lett. 14, 3864 (2014).
- P. B. Johnson and R. W. Christy, Phys. Rev. B 6, 4370 (1972).
- Railing Changa, H.-P. Chianga, P.T. Leungb, D.P. Tsaid, and W.S. Tse, Sol. St. Com. 133, 315 (2005).
- М.И. Трибельский, А.Е. Мирошниченко, УФН 192, 45 (2022).
- B. A. Belyaev and V. V. Tyurnev, Microw. Opt. Technol. Lett. 58, 1883 (2016).
- Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Теоретическая физика, т. 2, Теория поля, Наука, Москва (1967), §67.
- 14. T. G. Mackay, J. Nanophoton. 1, 019501 (2007).
- 15. X. Zhang, J. Qio, X. Li, J. Zhao, and L. Liu, Appl. Opt. 59, 2337 (2020).

ГЕНЕРАЦИЯ ЦЕНТРОВ ОКРАСКИ И ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМЫ В LiF ПРИ МНОГОИМПУЛЬСНОЙ ФИЛАМЕНТАЦИИ

А. В. Кузнецов^{а*}, В. О. Компанец^b, А. Е. Дормидонов^b, С. В. Чекалин^b,

В. П. Кандидов ^{b,c}

^а Иркутский филиал Института лазерной физики Сибирского отделения Российской академии наук 664033, Иркутск, Россия

^b Институт спектроскопии Российской академии наук 108840, Троицк, Москва, Россия

^с Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Физический факультет 119991, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 23 июля 2022 г., после переработки 23 июля 2022 г. Принята к публикации 29 июля 2022 г.

Экспериментально и численно исследована динамика генерации плазмы и центров окраски в кристалле LiF при многоимпульсной филаментации фемтосекундного лазерного излучения среднего ИК-диапазона. Разработана модель, которая описывает динамическую конкуренцию экситонного и электронно-дырочного каналов в процессе насыщения концентрации центров окраски в LiF при многоимпульсном воздействии фемтосекундного излучения. Дана физическая интерпретация конкуренции экситонного и электронно-дырочного каналов генерации центров окраски.

DOI: 10.31857/S0044451022120045 **EDN:** LCBJUC

1. ВВЕДЕНИЕ

Особенности взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с прозрачными диэлектриками позволяют осуществлять неразрушающую управляемую запись микромодификации в объеме материалов для формирования элементов интегральной оптики, квантовой информатики и других приложений [1,2]. Особое место среди перспективных материалов для создания элементов микрооптики занимает кристалл фторида лития LiF [3]. Он обладает наиболее широкой областью прозрачности и запрещенной зоной (около 14 эВ) среди прозрачных диэлектриков, хорошо подвергается механической обработке. В результате филаментации фемтосекундных лазерных импульсов в LiF происходит образование долгоживущих центров окраски (ЦО) различных типов, среди которых наиболее удобны для на-

835

блюдения ЦО F₂ и F₃⁺ [4,5]. Данные ЦО способны люминесцировать в видимом диапазоне при возбуждении непрерывным лазерным излучением на длине волны 450 нм. Запись структур из ЦО при воздействии лазерного излучения и последующая их визуализация лежат в основе метода лазерной колорации, который позволяет исследовать процесс нелинейнооптического взаимодействия лазерного излучения с диэлектриком в одноимпульсном режиме, свободном от погрешностей, связанных с флуктуациями излучения [6–9]. Методом лазерной колорации впервые зарегистрированы периодические осцилляции параметров световых пуль — одноцикловых волновых пакетов, формируемых в объеме прозрачной среды при филаментации в условиях аномальной дисперсии групповой скорости [10], изучено влияние сдвига фазы между световым полем на несущей частоте и огибающей световой пули на период осцилляций параметров ее высокоинтенсивного керна [11, 12].

Образование ЦО в LiF инициируется фотоиндуцированной генерацией возбуждений электронной подсистемы кристалла двух видов — электронно-

[•] E-mail: a.v.kuznetsov@bk.ru

дырочных пар и экситонов. Последующий самопроизвольный распад обоих видов электронных возбуждений приводит к образованию ЦО. Для волновода из ЦО в работе [13] предложена бесплазменная модель, которая описывает процесс его формирования в условиях насыщения концентрации.

В настоящей работе исследовано формирование ЦО в LiF в процессе накопления их концентрации и генерации лазерной плазмы при многоимпульсной филаментации. Экспериментально зарегистрирован сигнал люминесценции лазерной плазмы в LiF и CaF₂, генерируемой при увеличении числа воздействующих фемтосекундных импульсов на длине волны более 3000 нм, что соответствует условиям аномальной дисперсии групповой скорости. Построена модель генерации ЦО и лазерной плазмы в LiF, которая описывает динамическую конкуренцию экситонного и электронно-дырочного каналов в процессе образования ЦО в LiF при многоимпульсной филаментации. Динамика сигнала люминесценции плазмы, рассчитанная в модели, хорошо согласуется с результатами эксперимента.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕНЕРАЦИИ ПЛАЗМЫ ПРИ МНОГОИМПУЛЬСНОЙ ФИЛАМЕНТАЦИИ В Lif

В эксперименте образцы кристаллов LiF и CaF₂ облучались фемтосекундными лазерными импульсами с центральными длинами волн 3100 и 3400 нм, длительностью 120 фс и энергией 30 мкДж. Для этого использовался фемтосекундный комплекс, состоящий из титан-сапфирового генератора и регенеративного усилителя (Tsunami и Spitfire HP), перестраиваемого параметрического усилителя ТОРАS-С и генератора разностной частоты. Излучение фокусировалось на входную поверхность образцов линзой из CaF₂ с фокусным расстоянием 10 см.

Лазер работал попеременно в двух режимах: в одноимпульсном режиме (импульс генерируется по нажатию кнопки) и в режиме генерации последовательности импульсов с частотой 10 Гц. Одноимпульсный режим использовался для фотосъемки плазменного канала отдельных импульсов при помощи синхронизированной с лазером ССD-камеры Thorlabs S805MU с микрообъективом. Многоимпульсный режим использовался для быстрого накопления числа импульсов, воздействовавших на образец. ССD-камера размещалась сбоку относительно филамента. Съемка совершалась в одноимпульс-



Рис. 1. (В цвете онлайн) Экспериментальные зависимости светосуммы свечения лазерной плазмы от номера импульса при многоимпульсной филаментации в LiF и CaF_2 излучения на длинах волн 3100 и 3400 нм, с длительностью импульсов 120 фс, энергией 30 мкДж и радиусом 60 мкм

ном режиме с экспозицией 1 мс. Свечение плазменного канала регистрировалось со всей площади изображения для получения светосуммы. Были получены зависимости светосуммы свечения плазмы, генерируемой филаментом импульса в LiF и CaF₂, от номера импульса (рис. 1).

Видно, что для LiF и CaF₂ полученные зависимости существенно различаются. В случае LiF наблюдается увеличение светосуммы более чем на один порядок при увеличении числа импульсов. При большом числе импульсов (порядка тысяч) рост светосуммы свечения замедляется. В случае CaF₂ светосумма в пределах погрешности измерений не меняется с увеличением числа импульсов. Сильное свечение плазмы в CaF₂ по сравнению с зарегистрированным в LiF при большом числе импульсов связано с тем, что ширина запрещенной зоны в CaF₂, равная 10 эВ, меньше, чем в LiF, в котором она составляет 13.5 эВ.

3. МОДЕЛЬ ГЕНЕРАЦИИ ЦЕНТРОВ ОКРАСКИ В Lif

Качественное различие CaF₂ и LiF в зависимостях светосуммы свечения лазерной плазмы от номера импульса объясняется тем, что CaF₂ является значительно более радиационно стойким материалом, чем LiF, и в условиях эксперимента в нем ЦО не формируются. Значит, рост энергии плазменного свечения в LiF физически связан с образованием ЦО. Следовательно, теоретическая модель, описывающая наблюдаемый рост свечения плазмы в LiF с увеличением номера импульса, должна включать взаимосвязь генерации плазмы и накопленной концентрации ЦО.

В развиваемой модели распределение концентрации ЦО в пространстве r описывается эффективной концентрацией $\rho_c^j(\mathbf{r})$ различных видов ЦО. Верхний индекс "j" здесь обозначает число импульсов, под действием которых сформировано данное распределение ЦО, т.е. *j* — номер последнего импульса. ЦО аккумулируются импульс за импульсом. Их концентрация достигает максимального (насыщенного) значения $\rho_{c\ max}$ при большом числе импульсов. При воздействии *j*-го лазерного импульса происходит образование экситонов с концентрацией $\rho_{er}^{j}(\mathbf{r},\tau)$ и электронно-дырочных пар с концентрацией $\rho_e^j(\mathbf{r},\tau)$, называемой в дальнейшем концентрацией электронов. Кинетические уравнения, описывающие изменение этих концентраций под действием лазерного импульса, имеют следующий вид в бегущем времени $\tau = t - z n_0/c$, где z — ось координат, совмещенная с осью лазерного пучка:

$$\frac{\partial \rho_e^j(\mathbf{r},\tau)}{\partial \tau} = (1 - \alpha^j(\mathbf{r})) W_e(|A^j(\mathbf{r},\tau)|) \times \\
\times \left(1 - \frac{\rho_e^j(\mathbf{r},\tau) + \rho_{ex}^j(\mathbf{r},\tau)}{\rho_0}\right), \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho_{ex}^j(\mathbf{r},\tau)}{\partial \tau} = \alpha^j(\mathbf{r}) W_{ex}(|A^j(\mathbf{r},\tau)|) \times \\
\times \left(1 - \frac{\rho_e^j(\mathbf{r},\tau) + \rho_{ex}^j(\mathbf{r},\tau)}{\rho_0}\right).$$

Здесь $A^{j}(\mathbf{r},\tau)$ — комплексная амплитуда огибающей лазерного импульса, $n_0 = 1.363$ — линейный показатель преломления, $\rho_0 = 6.1 \cdot 10^{22} \ {\rm cm}^{-3}$ концентрация анионов фтора в LiF. Величина ρ_0 определяет предельную суммарную концентрацию электронов и экситонов в пренебрежении ионизацией катионов лития, вероятность которой мала изза высокого потенциала. Скорость полевой ионизации We описывается формулой Келдыша [14]. Функция $W_{ex}(|A|)$ является скоростью прямой генерации экситонов в единице объема. В настоящее время неизвестны модели прямого канала генерации экситонов. При энергии экситонного поглощения $U_{ex} = 12.8$ эВ, близкой к ширине запрещенной зоны $U_e = 13.5 \ \text{эВ}$, можно принять, что функции, описывающие скорости генерации экситонов $W_{ex}(|A|)$ и полевой ионизации $W_e(|A|)$, совпадают. Уравнения (1) описывают уменьшение скорости полевой ионизации с образованием электронов и скорости прямой генерации экситонов при увеличении их суммарной плотности за счет убыли невозбужденных анионов в кристаллической решетке. Функция $\alpha^{j}(\mathbf{r})$ в уравнениях (1) определяет относительный вклад экситонного и электронно-дырочного (плазменного) каналов генерации ЦО для импульса с номером j в каждой точке трехмерного пространства \mathbf{r} . Функция $\alpha^{j}(\mathbf{r})$ принимает значения от нуля до единицы. При $\alpha^{j}(\mathbf{r}) = 0$ в точке \mathbf{r} при воздействии импульса с номером j формируются ЦО только по электроннодырочному каналу, а при максимальном значении $\alpha^{j}(\mathbf{r}) = 1$ — только по экситонному.

Введем относительную концентрацию ЦО $\hat{\rho}_c^j(\mathbf{r}) = \rho_c^j(\mathbf{r})/\rho_{c\ max}$, которая может принимать значения от нуля до единицы. Функция относительного вклада каналов $\alpha^j(\mathbf{r})$ в каждой точке пространства зависит от концентрации ЦО, наведенной предшествующими лазерными импульсами, таким образом, что чем больше концентрация ЦО, тем меньше $\alpha^j(\mathbf{r})$ и, соответственно, больше доля генерации электронов:

$$\alpha^{j}(\mathbf{r}) = 1 - \kappa \,\widehat{\rho}_{c}^{j-1}(\mathbf{r}). \tag{2}$$

Параметр κ введен для возможности ограничить в модели долю электронов в общем количестве электронов и экситонов при предельной концентрации ЦО $\hat{\rho}_{c\ max} = 1$. Свободный параметр κ может принимать значения от нуля до единицы, и его величина подбирается для достижения наилучшего соответствия зависимости светосуммы свечения плазмы от числа импульсов, получаемой в модели, с экспериментально измеренной.

Перед прохождением первого импульса концентрация ЦО в LiF равна нулю: $\hat{\rho}_c^0(\mathbf{r}) = 0$. Тогда, согласно (2), функция вклада для первого импульса $\alpha^{1}(\mathbf{r}) = 1$, что соответствует чисто экситонному механизму формирования ЦО. С ростом концентрации ЦО в каждой точке пространства значения функции $\alpha^{j}(\mathbf{r})$ уменьшаются. При предельной концентрации ЦО $\hat{\rho}_{c max} = 1$ функция $\alpha^{j}(\mathbf{r})$ оказывается равной предельному значению $\alpha_{max} = 1 - \kappa$, при котором доля электронов в общем числе генерируемых электронов и экситонов равна к. В модели мы полагаем $\kappa = 0.1$, так что при насыщении концентрации ЦО доля генерируемых электронов на порядок меньше общего числа электронных возбуждений. Физически это обосновано тем, что ЦО должны быть разделены областями регулярной кристаллической решетки для сохранения основных характеристик диэлектрика.

Приращение относительной концентрации ЦО,

$$\Delta \widehat{\rho}_c^j(\mathbf{r}) = \widehat{\rho}_c^j(\mathbf{r}) - \widehat{\rho}_c^{j-1}(\mathbf{r})$$

ЖЭТФ, том **162**, вып. 6 (12), 2022

после действия *j*-го импульса в условиях насыщения определяется уравнением

$$\Delta \widehat{\rho}_c^j(\mathbf{r}) = \delta \widehat{\rho}_c^j(\mathbf{r}) \left(1 - \widehat{\rho}_c^{j-1}(\mathbf{r}) \right).$$
(3)

Здесь $\delta \hat{\rho}_c^j(\mathbf{r})$ является приращением концентрации ЦО под действием одного импульса без учета эффекта насыщения. Согласно соотношению (3), рост концентрации ЦО замедляется при приближении к максимальному значению $\hat{\rho}_{c\ max} = 1$.

Приращение показателя преломления $\delta n_c^j(\mathbf{r})$, вызванное изменением концентрации ЦО $\delta \hat{\rho}_c^j(\mathbf{r})$, пропорционально концентрации электронных возбуждений $\rho_e^j(\mathbf{r}) + \rho_{ex}^j(\mathbf{r})$, образованных *j*-м импульсом:

$$\delta n_c^j = h \left(\rho_e^j + \rho_{ex}^j \right). \tag{4}$$

Здесь h — коэффициент трансформации концентрации возбуждений электронной подсистемы в приращение показателя преломления при увеличении концентрации ЦО. Коэффициент h определяет скорость нарастания показателя преломления при воздействии одного импульса и не влияет качественно на динамическую картину процесса. В расчетах величина h выбрана так, чтобы пиковый прирост показателя преломления после действия первого импульса составлял 5% от предельной величины $\Delta n_{c\ max}$, которая принята равной $\Delta n_{c\ max} = 0.025$ [13].

Комплексная амплитуда $A^{j}(\mathbf{r}, \tau)$ *j*-го импульса в системе координат, бегущей с групповой скоростью, имеет следующий вид в приближении медленно меняющейся амплитуды при аномальной дисперсии групповой скорости:

$$2i \frac{\partial A^{j}}{\partial z} = \left[\frac{\Delta_{\perp}}{k_{0}} + k_{2}\frac{\partial^{2}}{\partial\tau^{2}} + \frac{2k_{0}}{n_{0}}\left(n_{2}I^{j} + \Delta n_{p}^{j} + \Delta n_{c}^{j-1}\right) - i\frac{U}{I^{j}}\frac{\partial(\rho_{e}^{j} + \rho_{ex}^{j})}{\partial\tau}\right]A^{j}.$$
 (5)

Концентрации свободных электронов ρ_e^j и экситонов ρ_{ex}^j в (5) являются функциями координат **r** и бегущего времени τ , оператор Δ_{\perp} — лапласиан по поперечным координатам, $k_0 = \omega_0 n_0/c$ — волновое число на центральной частоте ω_0 , соответствующей длине волны в вакууме 3100 нм, $n_2 = 8.1 \cdot 10^{-17} \text{ см}^2/\text{BT}$ — коэффициент кубичной нелинейности, $k_2 = \left|\partial^2 k/\partial \omega^2\right|_{\omega=\omega_0} = 266 \text{ фc}^2/\text{мM}$ — модуль коэффициента дисперсии групповой скорости, $I^j(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{2}cn_0\varepsilon_0 \left|A^j(\mathbf{r}, \tau)\right|^2$ — интенсивность

j-го импульса, ε_0 — диэлектрическая постоянная, U = 12.8 эВ $\approx U_{ex} \approx U_e$ — энергия поглощения. Уравнение (5) описывает дифракцию, дисперсию во втором приближении, керровскую и плазменную нелинейности для текущего импульса и потери (последнее слагаемое в квадратных скобках в (5)), связанные с образованием электронов и экситонов. Приращение показателя преломления $\Delta n_c^{j-1}(\mathbf{r})$ в (5) после воздействия предыдущих j-1 импульсов равно

$$\Delta n_c^{j-1} = \Delta n_c^{j-2} + \delta n_c^{j-1} \left(1 - \frac{\Delta n_c^{j-2}}{\Delta n_c \max} \right). \quad (6)$$

Изменение показателя преломления лазерной плазмы $\Delta n_p^j(\mathbf{r}, \tau)$, которое наводится во время воздействия *j*-го импульса, определяется концентрацией свободных электронов $\rho_e^j(\mathbf{r}, \tau)$:

$$\Delta n_p^j(\mathbf{r},\tau) = -\frac{q_e^2 \rho_e^j(\mathbf{r},\tau)}{2n_0 \omega_0^2 m_e \varepsilon_0},\tag{7}$$

где q_e и m_e — заряд и масса электрона. Заметим, что экситоны, в отличие от электронов, не влияют на показатель преломления диэлектрика.

(1)-(7) c Система уравнений заданным пространственно-временным профилем воздействующего излучения описывает процесс многоимпульсной филаментации в LiF, который происходит в условиях изменения показателя преломления, вызванного накоплением ЦО при динамической конкуренции экситонного и электронно-дырочного каналов генерации ЦО в процессе насыщения их концентрации. Начальная концентрация ЦО $\hat{\rho}_{c}^{0}(\mathbf{r}) = 0$. Для моделирования серии импульсов система уравнений (1)-(7) решается итеративно, начиная с первого импульса. Перед действием каждого *j*-го импульса распределение показателя преломления $\Delta n_c^{j-1}(\mathbf{r})$ задается по результатам решения для предыдущего (j-1)-го импульса. Распределения электронов $\rho_e(\mathbf{r}, \tau)$ и экситонов $\rho_{ex}(\mathbf{r}, \tau)$ задаются нулевыми в начальный момент $\tau = 0$ перед действием каждого импульса, что соответствует полному распаду электронных возбуждений, наведенных предыдущим импульсом, за время между импульсами. Уравнения (1), (2) описывают нарастание концентраций $\rho_e(\mathbf{r},\tau)$ и $\rho_{ex}(\mathbf{r},\tau)$ во время прохождения каждого импульса. Совместно с (1), (2) решаются уравнения (5)-(7) для определения трансформации пространственно-временного распределения амплитуды $A^{j}(\mathbf{r}, \tau)$ импульса по мере его распространения. После завершения моделирования распространения каждого импульса при помощи уравнений (3), (4) определяется новое распределение концентрации ЦО $\hat{\rho}_c^j(\mathbf{r})$ и показателя преломления $\Delta n_c^j(\mathbf{r})$, исходя из наведенных распределений электронов и экситонов.

Распределения показателя преломления $\Delta n_c^{j-1}(\mathbf{r})$ и ЦО $\hat{\rho}_c^{j-1}(\mathbf{r})$, наведенные предыдущими i - 1 импульсами, создают условия для прохождения *j*-го импульса, отличные от условий для других импульсов. Поэтому каждый импульс распространяется уникальным образом. Различия в распределениях ЦО перед прохождением различных импульсов приводят к различному приращению концентрации электронов и экситонов в пространстве при воздействии импульсов в соответствии с уравнениями (1)-(7). Таким образом, в развиваемой модели среда обладает памятью наведенных изменений показателя преломления, вызванных аккумулированием ЦО. При этом память среды такова, что с увеличением плотности ЦО приращение электронов при воздействии импульса снижается.

4. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭКСИТОННОГО И ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНОГО КАНАЛОВ ГЕНЕРАЦИИ ЦО ПРИ ФИЛАМЕНТАЦИИ ФЕМТОСЕКУНДНОГО ИМПУЛЬСА В Lif

Численное решение системы уравнений (1)–(7) проводилось в осесимметричной цилиндрической системе координат $\mathbf{r} = (r, z)$, в которой ось z совмещена с осью пучка, а координата r представляет расстояние от оси z. Воздействующее излучение задавалось в виде гауссова волнового пакета:

$$A^{j}(r, z = 0, \tau) = A_{0} \exp\left(-\frac{r^{2}}{2r_{0}^{2}} - \frac{\tau^{2}}{2\tau_{0}^{2}}\right), \quad (8)$$

где A_0 — начальная пиковая амплитуда светового поля, r_0 и τ_0 — начальные радиус и длительность импульса, определяемые по уровню 1/e. Данные параметры задавались в соответствии с энергией и длительностью реальных импульсов, а также пириной пучка вблизи фокуса линзы: $r_0 = 72$ мкм, $\tau_0 = 75$ фс, энергия импульса составляла 30 мкДж, что соответствовало превышению критической мощности стационарной самофокусировки в 1.7 раз. Число импульсов j = 1, ..., 1024.

Для апробации построенной модели на экспериментально зарегистрированной зависимости люминесценции лазерной плазмы от числа импульсов вычислено изменение количества электронов с увеличением числа воздействующих импульсов (рис. 2).

Видно, что рост количества плазмы в филаменте замедляется при большом числе импульсов, подоб-



Рис. 2. (В цвете онлайн) Зависимости от номера импульса количества электронов в лазерной плазме, рассчитанного по модели (квадраты), и измеренной светосуммы (точки) при многоимпульсной филаментации в LiF излучения на длине волны 3100 нм, с длительностью импульсов 120 фс, энергией 30 мкДж и начальным радиусом 60 мкм

но тому, как это наблюдается в эксперименте. Рассчитанная по модели и измеренная в эксперименте (рис. 2) зависимости количества электронов имеют заметное различие лишь при малом числе импульсов. Такое расхождение связано, видимо, с конечным временем образования наблюдаемых ЦО F_2 и F_3^+ при распаде электронных возбуждений. Процесс формирования равновесной концентрации стабильных ЦО после создания первичных электронных возбуждений завершается за большее время, чем интервалы между отдельными импульсами при облучении в эксперименте. В модели предполагается, что все ЦО, появляющиеся в результате действия импульса, успевают формироваться за малый временной интервал до следующего импульса.

Динамическую конкуренцию экситонного и электронно-дырочного каналов в процессе накопления ЦО в LiF при многоимпульсной филаментации иллюстрирует трансформация в плоскости (r, z)пространственного распределения относительной концентрации ЦО $\hat{\rho}_{c}^{j}(r,z)$ и связанной с ней функции вклада каналов $\alpha^{j}(r, z)$ для импульсов с номерами j = 1, 32, 512, 1024 (рис. 3). С увеличением числа импульсов возрастают протяженность и ширина области наведенных ЦО $\hat{\rho}_{c}^{j}(r,z)$ и функции $\alpha^{j}(r,z)$. При большом числе импульсов (j = 1024)появляется насыщение ЦО, в которой относительная их концентрация максимальна, $\hat{\rho}_{c}^{j}(r,z) = 1$, а функция $\alpha^{j}(r, z) = 0.9.$



Рис. 3. (В цвете онлайн) Рассчитанные распределения относительной концентрации ЦО $\hat{\rho}_c^j(r,z)$ и функция относительного вклада каналов $\alpha_c^j(r,z)$ в плоскости (r,z) для импульсов с различными номерами: j = 1, 32, 512, 1024. Изолинии показаны для значений $\hat{\rho}_c = 0.03, 0.1, 0.4$ и 0.9



Рис. 4. (В цвете онлайн) Распределения в LiF относительной концентрации экситонов $\rho_{ex}^{j}(r=0,z)/\rho_{ex}$ max на оси (а) и в поперечном сечении $\rho_{ex}^{j}(r,z^{*})/\rho_{ex}$ max (б) филамента после воздействия *j*-го импульса. Положение поперечного сечения при $z^{*} = 8.93$ мм показано вертикальной штриховой линией на рис. а



Рис. 5. (В цвете онлайн) Распределения в LiF относительной концентрации электронов $\rho_e^j(r=0,z)/\rho_{e\max}$ на оси (а) и в поперечном сечении $\rho_e^j(r,z^*)/\rho_{e\max}$ (б) филамента после воздействия *j*-го импульса. Положение поперечного сечения при $z^* = 8.93$ мм показано вертикальной штриховой линией на рис. а



Рис. 6. (В цвете онлайн) Рассчитанные распределения флюенса $F^j(r,z)$ в плоскости (r,z) для импульсов с различными номерами: j = 1, 32, 512, 1024. Изолинии показаны для значений флюенса 1, 1.5, 2 и 2.5 Дж/см²

С увеличением числа импульсов концентрация ЦО $\hat{\rho}_{c}^{j}(r,z)$ возрастает, а функция $\alpha^{j}(r,z)$, согласно (1), уменьшается, что приводит к снижению скорости генерации экситонов и повышению скорости генерации электронов (рис. 4, 5). Относительная концентрация экситонов $\rho_{ex}^{j}(r=0,z)/\rho_{ex}$ max, которые генерируются отдельным *j*-м импульсом, монотонно снижается с увеличением его номера j (рис. 4a). Уширение области генерации экситонов в плоскости поперечного сечения $ho_{ex}^{j}(r,z^{*})/
ho_{ex\ max},$ представленное на характерном расстоянии $z^* = 8.93$ мм, связано с увеличением радиуса лазерного пучка изза плазменной дефокусировки при распространении в LiF. Об увеличении радиуса пучка можно судить по изменению распределений поверхностной плотности энергии (флюенса) $F^{j}(r,z) = \int I^{j}(r,z,\tau)d\tau$ в плоскости (r, z) с увеличением номера импульса (рис. 6). Видно, что пиковое значение в распределении флюенса после первого импульса, $F^{1}(r, z)$, заметно больше, чем при многоимпульсном воздействии. Это объясняется отсутствием плазмы при филаментации первого импульса, интенсивность в котором ограничивается не дефокусировкой в плазме, а потерями при возбуждении экситонов. С увеличением числа импульсов относительная концентрация электронов $\rho_e^j(r=0,z)/\rho_{e\ max}$ в филаменте увеличивается (рис. 5а) и дефокусировка в плазме возрастает, что проявляется в снижении пикового флюенса (рис. 6). Если при j = 1 максимум флюенса $\max\{F^1(r,z)\} = 2.63 \ Дж/см^2$, то при j = 512максимальная величина $\max\{F^{512}(r, z)\}$ снижается до $2.02 \ Дж/см^2$.

Вследствие проявления плазменной дефокусировки и эффекта рефокусировки импульса в ходе многоимпульсного облучения концентрация электронов на оси меняется немонотонно с расстоянием (рис. 5*a*), в распределении флюенса $F^{j}(r, z)$ формируются максимумы вдоль филамента, его протяженность возрастает (рис. 6). Радиальное распределение концентрации электронов $\rho_{e}^{j}(r, z^{*})/\rho_{e\ max}$ на характерном расстоянии $z^{*} = 8.93$ мм монотонно уширяется с увеличением числа импульсов (рис. 5*б*). Это объясняется тем, что на периферии пучка (4...6 мм), дефокусированного в лазерной плазме, концентрация экситонов мала и преобладает генерация электронов.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В проведенном исследовании установлено, что при многоимпульсной филаментации в кристалле LiF фемтосекундного лазерного излучения среднего ИК-диапазона происходит нарастание количества генерируемой в филаменте плазмы с увеличением номера импульса. Это связано с накоплением концентрации ЦО под действием лазерного излучения. Для теоретического описания результатов эксперимента разработана модель филаментации фемтосекундного импульса с образованием центров окраски в LiF, описывающая конкуренцию экситонного и электронно-дырочного каналов генерации ЦО, при которой вклад электронно-дырочного канала увеличивается по мере увеличения концентрации ЦО. В развиваемой модели среда обладает «памятью» наведенных ЦО, возрастание плотности которых при увеличении числа воздейстующих импульсов приводит к повышению скорости генерации электронов и изменению показателя преломления в LiF. Нарастание концентрации плазмы с увеличением числа импульсов вызывает возрастание плазменной дефокусировки и появление эффекта рефокусировки излучения. Формирование количества плазмы с увеличением числа импульсов, рассчитанное на основе построенной модели, согласуется результатами эксперимента.

Финансирование. Эксперименты выполнены на уникальной научной установке «Многоцелевой фемтосекундный лазерно-диагностический спектрометрический комплекс» Института спектроскопии РАН за счет гранта Российского научного фонда (проект №18-12-00422). Один из авторов (А.В.К.) благодарен проекту 0243-2021-0004 в рамках плана фундаментальных исследований Российской академии наук на период до 2025 г.

ЛИТЕРАТУРА

- Е. Ф. Мартынович, Центры окраски в лазерных кристаллах, ИГУ, Иркутск (2004).
- Si Gao, Yan-Zhao Duan, Zhen-Nan Tian et al., Optics & Laser Tech. 146, 107527 (2022).
- 3. G. Baldacchini, J. Lumin. 333, 107527 (2002).
- A. Lushchik, M. Kirm, Ch. Lushchik et al., Nucl. Instrum. Meth. B 166, 529 (2000).
- E. F. Martynovich, V. P. Dresvyansky, A. L. Rakevich et al., Appl. Phys. Lett. 114, 121901 (2019).
- А. В. Кузнецов, Е. Ф. Мартынович, Изв. вузов. Физика 52, 180 (2009).
- Е. Ф. Мартынович, А. В. Кузнецов, А. В. Кирпичников и др., КЭ 43, 463 (2013).
- С. В. Чекалин, В. О. Компанец, Опт. и спектр. 127, 94 (2019).
- С. В. Чекалин, В. О. Компанец, А. Е. Дормидонов и др., УФН 189, 299 (2019).
- **10**. А. В. Кузнецов, В. О. Компанец, А. Е. Дормидонов и др., КЭ **46**, 379 (2016).
- S. V. Chekalin, V. O. Kompanets, A. V. Kuznetsov et al., Laser Phys. Lett. 13, 065401 (2016).
- E. Zaloznaya, V. Kompanets, A. Savvin et al., Laser Phys. Lett. 19, 075402 (2022).
- **13**. А. В. Кузнецов, А. Е. Дормидонов, В. О. Компанец и др., КЭ **51**, 670 (2021).
- 14. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ 47, 1945 (1964).

СВЕТОИНДУЦИРОВАННЫЕ ДИФРАКЦИОННЫЕ РЕШЕТКИ НА МЕТАПОВЕРХНОСТЯХ НА ОСНОВЕ ЖИДКОГО МЕТАМАТЕРИАЛА

А. А. Жаров^а, Н. А. Жарова^{b*}

^а Институт физики микроструктур Российской академии наук 603950, Нижний Новгород, Россия

^b Институт прикладной физики Российской академии наук 603950, Нижний Новгород, Россия

> Поступила в редакцию 27 июля 2022 г., после переработки 27 июля 2022 г. Принята к публикации 15 августа 2022 г.

Метаповерхности, представляющие собой специальным образом структурированную границу раздела сред, являются одним из ключевых элементов современной «плоской» оптики, поскольку позволяют эффективно манипулировать падающим на них излучением. В настоящей работе предлагается использовать метаповерхность, представляющую собой слой жидкости со взвешенными в ней серебряными наночастицами. Концентрация наночастиц перераспределяется под действием пондеромоторных сил со стороны электромагнитного поля, образуя светоиндуцированную дифракционную решетку с параметрами, зависящими от интенсивности падающего излучения. В работе исследована устойчивость однородного по метаповерхности распределения наночастиц в поле нормально падающей плоской световой волны, найдены возможные нелинейные стационарные состояния.

DOI: 10.31857/S0044451022120057 **EDN:** LCDEGZ

1. Появившиеся за последние две декады метаматериалы, представляющие собой искусственные композитные среды, структурированные на субволновом уровне, значительно расширили возможности манипулирования электромагнитным излучением в широком диапазоне частот, от микроволнового до оптического. За счет специального дизайна элементарной ячейки (метаатома) метаматериала, такой среде могут быть приданы электромагнитные свойства, отсутствующие у природных материалов, такие как отрицательная рефракция [1–3], гиперболическая дисперсия [4-6], перестраиваемость, экстремально сильный нелинейный отклик и др. [7–9]. Все эти новые свойства могут оказаться востребоваными в широком круге приложений во многих областях нанофотоники, можно, в частности, упомянуть задачи локализации и контроля света на нанометровых масштабах [10, 11], создания наноисточников

Теоретические и экспериментальные исследования оптических метаматериалов дали толчок к идее планарной оптики, а именно, к использованию плоских метаповерхностей (структурированных границ раздела сред) для управления световыми потоками. Это, в свою очередь, привело к бурному развитию так называемой Ми-троники [19], изучающей взаимодействие света с массивами наночастиц в условиях возбуждения электрических и магнитных резонансов Ми. Как было показано в многочисленных работах, метаповерхности могут выполнять все те же функции, что и традиционные оптические элементы, обладают сильным нелинейным откликом благодаря высокой добротности резонансов Ми в диэлектрических структурах и возбуждению ква-

света для лазерной генерации [12], разработки наноантенн и нанорассеивателей с заранее заданной диаграммой направленности [13] и т.д. В этом контексте необходимо также обратить внимание на жидкие метаматериалы и метакристаллы, которые, не обладая сверхбыстрым откликом, легко перестраивают свои свойства под действием внешних управляющих полей [14–18].

E-mail: zhani@appl.sci-nnov.ru

зисвязанных состояний в континууме [20–22]. В результате планарная оптика на основе метаповерхностей позволяет расширить и технологически упростить использование метаматериалов для широкого круга потенциальных приложений, в частности таких, как разработка сенсоров нового поколения и субволновая микроскопия применительно, например, к задачам химии и медицины.

В данной работе мы предлагаем использовать жидкую метаповерхность в качестве инструмента для манипулирования световыми пучками. Речь идет о тонком в масштабе длины волны слое вязкой жидкости со взвешенными в ней плазмонными (металлическими) наночастицами. Идея состоит в том, что под действием пондеромоторных сил со стороны электромагнитного поля концентрация наночастиц в слое перераспределяется, что, в свою очередь, ведет к самосогласованному изменению структуры отраженной и прошедшей световых волн или, другими словами, к светоидуцированной дифракции, позволяющей управлять структурами прошедшего и отраженного полей. Несмотря на то, что от такой структуры нельзя ожидать сверхбыстрого отклика (соответствующие характерные времена определяются временем релаксации скорости наночастицы в жидкости), она может оказаться полезной с точки зрения контроля над рассеянием света, а в отдельных случая фокусировки или дефокусировки световых пучков с управляемым фокусным расстоянием.

2. Итак, рассмотрим тонкий в масштабе длины падающей волны слой жидкости (или геля) толщиной *d* со взвешенными в ней сферическими металлическими наночастицами (в дальнейшем в качестве материала наночастиц будет рассматриваться серебро). Эффективная диэлектрическая проницаемость такого композита может быть приближенно вычислена по формуле Максвелла-Гарнетта [23]

$$\varepsilon_{eff} = \varepsilon_l (1 + 3\eta(\varepsilon_p - \varepsilon_l) / (\varepsilon_p + 2\varepsilon_l)), \qquad (1)$$

где $\varepsilon_{p,l}$ — диэлектрические проницаемости частиц и жидкости, η — объемная доля частиц в среде. Будем полагать, что на этот слой, окруженный с обеих сторон диэлектриком с проницаемостью ε_d , по нормали падает плоская световая волна ТЕМ-поляризации (см. рис. 1).

Со стороны электромагнитного поля на частицы действует пондеромоторная сила, смещающая частицы в ту или иную сторону. Ниже частицы предполагаются достаточно малыми, так, чтобы при расчете сил, действующих на частицы, можно было бы



Рис. 1. Постановка задачи: на слой жидкости (диэлектрическая проницаемость ε_l) со взвешенными в ней металлическими наночастицами (проницаемость ε_p) падает плоская волна. Слой толщиной d заключен между диэлектрическими (проницаемость ε_d) обкладками. При достаточно большой амплитуде падающего излучения и подходящих параметрах среды однородное распределение частиц оказывается неустойчивым, их плотность модулируется в поперечном (x) направлении и падающая волна рассеивается на этих неоднородностях

ограничиться дипольным приближением. Усредненная по периоду поля пондеромоторная сила, действующая на дипольную частицу, имеет вид

$$F_i = 1/2(p_k \nabla_i E_k^* + \text{c.c.}),$$
 (2)

где $\mathbf{p} = \hat{\alpha} \mathbf{E}$ — наведенный внешним полем дипольный момент частицы, \mathbf{E} — напряженность электрического поля, $\hat{\alpha}$ — тензор поляризуемости, с.с. обозначает комплексное сопряжение и по повторяющимся индексам в (2) предполагается суммирование.

Поляризуемость сферической изотропной частицы является скалярной величиной и дается выражением

$$\alpha = 3V_p \varepsilon_l (\varepsilon_p - \varepsilon_l) / (\varepsilon_p + 2\varepsilon_l), \qquad (3)$$

где $V_p = (4/3)\pi a^3$ — объем и a — радиус частицы.

Выражение (2) содержит две компоненты силы: градиентную часть $\mathbf{F}_{\nabla} \sim \operatorname{Re}(\alpha) \nabla |\mathbf{E}|^2$ и силу «увлечения» (scattering force) $\mathbf{F} \sim \operatorname{Im}(\alpha) \mathbf{S}$, направленную вдоль средней по времени плотности потока энергии \mathbf{S} . В дальнейшем мы будем пренебрегать силой увлечения, поскольку для нормально падающей волны она компенсируется силой со стороны границ слоя, удерживающих жидкость. В латеральном направлении эта сила отсутствует, поскольку отсутствует поток энергии электромагнитного поля в этом направлении.



Рис. 2. Инкремент неустойчивости в зависимости от квадрата амплитуды падающей волны (поле нормировано на характерное поле нелинейности) и поперечного волнового числа k_x . Пунктир обозначает границу области неустойчивости, там, где $\delta \eta^{NL} = \delta \eta^L$. Значение диэлектрической постоянной жидкости бралось равным $\varepsilon_l = 6$ (a) и 8 (b). При расчетах использовались следующие значения параметров: $\varepsilon_d = 2$, $\tau = 1.6 \cdot 10^{-7}$ с⁻¹, d = 0.1 мкм, $\eta_0 = 0.3$, $V_T = 8.6$ см/с, длина волны падающего излучения в свободном пространстве $\lambda = 0.6$ мкм

Под влиянием пондеромоторной силы наночастицы в жидкости начинают двигаться, их плотность меняется, возникает градиент давления, и временная динамика концентрации частиц под действием обеих этих сил описывается уравнением диффузионного типа

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \tau V_T^2 \operatorname{div} \left(\eta \operatorname{Re}(\tilde{\alpha}) \nabla |\mathbf{E}|^2 - \nabla \eta \right) = 0.$$
 (4)

Здесь $\tau = 1/6\pi a\nu$, ν — кинематическая вязкость жидкости и мы ввели новый параметр

$$\tilde{\alpha} = \alpha / V_p \equiv 3\varepsilon_l (\varepsilon_p - \varepsilon_l) / (\varepsilon_p + 2\varepsilon_l)$$

и нормировали электрическое поле в слое на характерное поле нелинейности, которое равно $E_c = \sqrt{k_B T/V_p} (k_B$ — постоянная Больцмана, T температура). Для краткости будем в дальнейшем считать электрическое поле E такой безразмерной величиной. Уравнение (4) получено на основе



Рис. 3. Инкремент неустойчивости в зависимости от квадрата амплитуды падающей волны и диэлектрической проницаемости жидкости ε_l ; волновое число модуляции $k_x = 4k_0$. Показаны изолинии инкремента для значений G > 0; величина инкремента отображается цветом линий. Параметры, использованные в расчетах, см. в подписи к рис. 2. Все пространственные гармоники, возбуждаемые в слое, локализованы, так как для выбранного значения $k_x/k_0 = 4$ они являются нераспространяющимися в диэлектрике с $\varepsilon_d = 2$, длина волны падающего излучения в свободном пространстве $\lambda = 0.6$ мкм

гидродинамической модели, которая подробно обсуждается в работах [24–26], где изучались пространственные солитоны в суспензиях наночастиц.

В упомянутых выше работах формирование солитона из светового пучка происходит на некотором расстоянии от входа в среду, и нелинейный процесс требует для развития заметной дистанции. В нашей постановке слой тонкий, причем нельзя при рассмотрении задачи ограничиться однонаправленным распространением светового излучения, т.е. нельзя не учитывать отражение от границ слоя. Эта и другие особенности приводят к существенным различиям в результатах.

Из уравнения (4) видно, что в стационарном состоянии выполняется условие равенства пондеромоторного и теплового давлений:

$$\frac{\nabla \eta}{\eta} \approx \nabla \operatorname{Re}(\tilde{\alpha}) |\mathbf{E}|^2.$$
(5)

Соотношение (5) напоминает зависимость возмущения концентрации частиц от интенсивности поля в среде с керровской нелинейностью. Однако в нашем случае нелинейность нелокальная, поскольку в уравнение входят не сами величины, а их производные. Поэтому далее в задаче о развитии модуляционной неустойчивости плоской волны мы увидим, что не сами малые возмущения поля и плотности частиц будут пропорциональны друг другу, но лишь их отклонения от среднего.



Рис. 4. Стационарное распределение плотности (сплошная линия) и модуля электрического поля в слое (штриховая линия) в нелинейном режиме (а). Модуль спектра электрического поля $|E_k|$ в зависимости от номера пространственной гармоники (от первой до двадцатой) (b). При расчетах использовались следующие значения параметров: $\varepsilon_l = 6$, $k_x/k_0 = 4$, $\varepsilon_d = 2$, d = 0.1 мкм, $\eta_0 = 0.3$, квадрат амплитуды падающего излучения $|E_0|^2 = 1.5$,

длина волны в свободном пространстве $\lambda = 0.6$ мкм

Для исследования модуляционной неустойчивости плоской волны найдем сначала электрическое поле E_0 внутри слоя, т.е. решим линейную задачу об отражении-прохождении падающей плоской волны на слой с постоянной диэлектрической проницаемостью ε_{eff} (1), полагая в этой формуле постоянной плотность частиц $\eta = \eta_0$.

Следующий шаг состоит в том, что мы зададим малое относительно η_0 возмущение концентрации $\delta \eta^L = \mu \cos(k_x x)$ и решим линейную задачу о рассеянии плоской волны на таком модулированном слое с учетом граничных условий и условий излучения для рассеянного поля¹⁾. Электрическое поле Eв слое окажется также промодулированным с тем же характерным масштабом, причем из условия малости параметра $\mu/\eta_0 \ll 1$ и линейности задачи

$$E = E_0 + \delta E^L \equiv E_0 + \beta \mu \cos(k_x x)$$



C

Рис. 5. Стационарное распределение плотности (сплошная линия) и модуля электрического поля в слое (штриховая линия) в нелинейном режиме (а). Модуль спектра электрического поля $|E_k|$ в зависимости от номера пространственной гармоники (от первой до двадцатой) (b). При расчетах использовались следующие значения параметров: $\varepsilon_l = 8$, $k_x/k_0 = 4$, $\varepsilon_d = 2$, d = 0.1 мкм, $\eta_0 = 0.3$, квадрат амплитуды падающего излучения $|E_0|^2 = 1.5$,

длина волны в свободном пространстве $\lambda = 0.6$ мкм

(с некоторым, в общем случае комплексным, коэффициентом β , который находится из решения задачи рассеяния).

Изменение электрического поля в свою очередь влияет на концентрацию частиц, возмущение которой есть $\delta \eta^{NL} = \eta - \eta_0$, и второй шаг процедуры использует уравнение (5). Учитывая условие сохранения числа частиц на периоде структуры, $\langle \eta \rangle = \eta_0$ (угловые скобки обозначают усреднение по x), найдем из (5)

$$\delta \eta^{NL} / \eta_0 = \exp(\operatorname{Re}(\tilde{\alpha}) | E_0 + \delta E^L |^2) - - \langle \exp(\operatorname{Re}(\tilde{\alpha}) | E_0 + \delta E^L |^2) \rangle.$$

Учитывая малость $|\delta E^L/E_0|$, получаем окончательно

$$\delta \eta^{NL} / \eta_0 = 2\mu \cos(k_x x) e^{\operatorname{Re}(\tilde{\alpha}) |E_0|^2} \operatorname{Re}(\tilde{\alpha}) \operatorname{Re}(\beta^* E_0).$$

Если окажется, что $\delta \eta^{NL} > \delta \eta^L$, то возмущения концентрации будут неустойчивыми и начнут возрастать. Это условие совпадает с критерием возбуждения систем с положительной обратной связью, где

¹⁾ Следует отметить, что рассеяние поля на возмущениях концентрации наночастиц в жидкой метаповерхности происходит только в ТМ-поляризацию.

неустойчивость развивается, если коэффициент обратной связи (здесь $\delta\eta^{NL}/\delta\eta^L)$ больше единицы.

Описанная процедура использовалась для численного нахождения порога неустойчивости и ее инкремента. Однако для тонкого слоя оказывается возможно решить задачу дифракции на модулированном слое аналитически, т.е. найти функциональную зависимость β от параметров, результатом чего является соотношение

$$\beta = id\alpha \frac{\sqrt{\varepsilon_d - \kappa^2}}{\varepsilon_d^{3/2}} \left(1 - \frac{\varepsilon_{eff}}{2\kappa^2} \right) E_0, \tag{6}$$

где мы ввели $\kappa = k_x/k_0$. Таким образом, порог неустойчивости определяется условием

$$G \equiv e^{\operatorname{Re}(\tilde{\alpha})|E_0|^2} \operatorname{Re}(\tilde{\alpha})|E_0|^2 \operatorname{Re}(\beta) > 1.$$
 (7)

Зная надпороговость, т.е. величину

$$G-1 = \delta \eta^{NL} / \delta \eta^L - 1,$$

из уравнения (4) можно найти инкремент неустойчивости

$$\gamma \approx \tau V_T^2 k_x^2 (G-1).$$

Возможность развития модуляционной неустойчивости существенно зависит (при фиксированной частоте падающего излучения) от параметров ε_l и k_x .

Зависимость от k_x иллюстрируется рис. 2a,b, на котором приведены значения инкремента неустойчивости, рассчитанные для величин $\varepsilon_l = 6$ (*a*) и 8 (*b*). При фиксированной длине волны $\lambda = 0.6$ мкм (диэлектрическая проницаемость серебра $\varepsilon_p = -12.7 + 1.1i$) поляризуемость наночастиц оказывается положительной, $\operatorname{Re}(\alpha) = 8.4992$, в случае (*a*) и отрицательной, $\operatorname{Re}(\alpha) = -5.5385$, в случае (*b*); эффективная диэлектрическая проницаемость смеси (ее действительная часть) также является положительной для случая (*a*) и отрицательной для случая (*b*).

На рис. 3 приведены зависимости, аналогичные зависимостям на рис. 2. Отличие лишь в том, что инкремент неустойчивости рассчитан для постоянного $k_x = 4k_0$ и меняющегося значения ε_l . Интересно отметить, что область неустойчивости ограничена по интенсивности не только снизу, но и сверху (см. также рис. 2b). Очевидно, это связано с сильно нелинейной зависимостью ~ $\operatorname{Re}(\tilde{\alpha})|E_0|^2 \exp(\operatorname{Re}(\tilde{\alpha})|E_0|^2)$ при отрицательных $\tilde{\alpha}$ (см. аналитическую формулу для порога (7)).

3. Нелинейная стадия неустойчивости и формирование нелинейного стационарного профиля концентрации могут быть смоделированы описанной выше интерполяционной процедурой. Отличие от расчета линейной стадии неустойчивости состоит в том, что эволюция спектра поля учитывает 55 пространственных гармоник вместо трех, а интерполяция становится многошаговой с последовательным постепенным изменением концентрации частиц и расчетом дифракционной задачи на этом профиле концентрации.

На рис. 4 и 5 приведены результаты расчета стационарного нелинейного решения задачи.

Различие между вариантами, представленными на рис. 4 и 5 состоит в том, что в первом случае $\operatorname{Re} \varepsilon_{eff}$ — положительная величина, а во втором отрицательная. Однако и в том, и в другом случае частицы группируются в области слабого поля.

Следует отметить, что полученные в напих расчетах стационарные нелинейные структуры имеют фактически ступенчатый профиль показателя преломления. Таким образом можно формировать дифракционную решетку, контролируя ее период за счет небольшой затравки в спектре падающей плоской волны, и использовать эту решетку для дифракции пробных волн на других частотах.

4. В заключение, рассмотрено взаимодействие света с жидкой метаповерхностью, представляющей собой тонкий слой суспензии металлических наночастиц. Исследована устойчивость однородного распределения наночастиц на метаповерхности. Найдены условия возникновения неустойчивости, приводящей в конечном счете к образованию периодических структур (светоиндуцированных дифракционных решеток) в результате перераспределения концентрации наночастиц вдоль метаповерхности под действием пондеромоторных сил со стороны электромагнитного поля. Определены пороговые значения амплитуды падающего поля, приводящие к развитию неустойчивости, и характерные масштабы возникающих дифракционных решеток.

Финансироание. Работа выполнена при поддержке НЦМУ «Центр фотоники», при финансировании Министерством науки и высшего образования РФ, соглашение № 075-15-2022-316.

ЛИТЕРАТУРА

- D. R. Smith, W. J. Padilla, D. C. Vier et al., Phys. Rev. Lett. 84, 4184 (2000).
- S. Zhang, W. Fan, B. K. Minhas et al., Phys. Rev. Lett. 94, 037402 (2005).

- H. J. Lezec, J. A. Dionne, and H. A. Atwater, Science 316, 430 (2007).
- A. N. Poddubny, I. Iorsh, P. A. Belov et al., Nat. Photon. 7, 958 (2013).
- M. A. Noginov, Y. A. Barnakov, G. Zhu et al., Appl. Phys. Lett. 94, 151105 (2009).
- 6. N. A. Zharova, A. A. Zharov, and A. A. Zharov, Jr., Adv. Cond. Mat. Phys. 2018, 4578149 (2018); H. A. Жарова, A. A. Жаров, A. A. Жаров, мл., ЖЭТФ 156, 396 (2019).
- M. Lapine, I. V. Shadrivov, D. A. Powell et al., Nat. Mater. 11, 30 (2012).
- A. A. Zharov, I. V. Shadrivov, and Y. S. Kivshar, Phys. Rev. Lett. 91, 037401 (2003).
- A. P. Slobozhanyuk, M. Lapine, D. A. Powell et al., Adv. Mater. 25, 3409 (2013).
- A. R. Davoyan, I. V. Shadrivov, A. A. Zharov et al., Phys. Rev. Lett. 105, 116804 (2010).
- 11. M. I. Stockman, Phys. Rev. Lett. 93, 137404 (2004).
- L. Cao and M. L. Brongersma, Nat. Photon. 3, 12 (2009).
- 13. L. Novotny, Nature 455, 887 (2008).
- 14. Y. A. Urzhumov, G. Shvets, J. A. Fan et al., Opt. Express 15, 14129 (2007).

- M. Fruhnert, S. Muhlig, F. Lederer et al., Phys. Rev. B 89, 075408 (2014).
- A. A. Zharov, A. A. Zharov, Jr., and N. A. Zharova, J. Opt. Soc. Am. B 31, 559 (2014).
- 17. M. Liu, K. Fan, W. Padilla et al., Adv. Mater. 28, 1553 (2016).
- 18. A. Zharov, Z. Viskadourakis, G. Kenanakis et al., Nanomaterials 11, 346 (2021).
- 19. Y. S. Kivshar, Nano Lett. 22, 3513 (2022).
- 20. T. Pertsch and Y. Kivshar, Mater. Res. Soc. Bull. 45, 210 (2020).
- K. Koshelev, G. Favraud, A. Bogdanov et al., Nanophotonics 8, 725 (2019).
- 22. S. I. Azzam and A. V. Kidishev, Adv. Opt. Mater. 9, 2001469 (2021).
- J. C. M. Garnett, Philos. Trans. Roy. Soc. London 203, 385 (1904).
- 24. R. El-Ganainy, D. N. Christodoulides, C. Rotschild et al., Opt. Express 15, 10207 (2007).
- 25. R. Gordon and J. T. Blakely, Phys. Rev. A 75, 055801 (2007).
- 26. M. Matuszewski, W. Krolikowski, and Y. S. Kivshar, Opt. Express 16, 1371 (2008).

МОДЕЛИ ДИНАМИЧЕСКОГО РАВНОВЕСИЯ АСТРОФИЗИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

B. M. Журавлев $^{a,b^*}$

^а Ульяновский государственный университет 432017, Ульяновск, Россия

^b Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева 443086, Самара, Россия

> Поступила в редакцию 15 июня 2022 г., после переработки 16 августа 2022 г. Принята к публикации 17 августа 2022 г.

Выведены уравнения динамического равновесия адиабатически и политропно расширяющегося или сжимающегося газового потока с радиальной и зональной составляющей скорости, которые представляют собой глубокую автомодельную модификацию уравнений теории Лейна-Эмдена звездных политроп. Проведена классификация моделей по параметру динамического равновесия. Установлена важная роль зонального потока в установлении динамического равновесия, определяющего структуру и эволюцию звезд. На основе полученных уравнений развита новая нелинейная теория звездных пульсаций и для них построено соотношение период-светимость. Для Солнца теория дает объяснение 11-летнего цикла активности, как радиально-зональных пульсаций его структуры, находящейся в динамическом равновесии. Представлен численный анализ распределений температуры и плотности в звездах в сопоставлении с данными о Солнце. В рамках этих моделей предложено объяснение максимума температуры в короне Солнца как элемента динамически равновесной структуры звезды.

DOI: 10.31857/S0044451022120069 **EDN:** LCOXTG

1. ВВЕДЕНИЕ

Модели газовой динамики являются одними из основных в задачах астрофизики и космологии. К ним относятся модели эволюции звезд, расширения звездных атмосфер [1–3], модели спиральных и эллиптических галактик, а также космологические модели [4-6]. Модели динамики можно условно разделить на два класса. Это модели, которые описывают строение астрофизических объектов в некотором фиксированном состоянии, и модели, описывающие эволюцию объектов со временем. Структурные модели объектов, как правило, являются статическими и описывают объекты, исходя из условия гидростатического равновесия, возможно, с учетом вращения объектов [1–3]. Модели эволюции являются более сложными и, чаще всего, анализируются численно [7]. Это деление моделей на структурные и

эволюционные относится как к звездам, так и к галактикам. Кроме структурных и эволюционных моделей для описания осцилляций звезд на различных этапах их эволюции строят модели колебаний звездных оболочек, которые, как правило, представляют модели малых собственных колебаний звезд и галактик вблизи их статического равновесного состояния. Несмотря на большой прогресс в описании структур астрофизических объектов, их эволюции и осцилляций, тем не менее, остается множество проблем, которые не решены до настоящего времени.

В теории строения звезд к нерешенным проблемам можно, в первую очередь, отнести не вполне адекватные условия определения поверхности звезды как сферы, на которой плотность среды вместе с температурой обращаются одновременно в нуль. Проблема состоит в том, что для реальных звезд плотность среды и температура на любом расстоянии от ее центра не обращаются в нуль точно, хотя и имеют на некотором расстоянии глубокий минимум. Более того, температура среды в короне Солнца, начиная от фотосферы, растет и достигает максимума на некотором расстоянии от нее [8]. Эту проблему

^{*} E-mail: zhvictorm@gmail.com

следует дополнить тем, что в звездах наблюдаются конечные по амплитуде колебания их параметров, которые не находят достаточно адекватного объяснения с точки зрения теории малых возмущений, которая является основой теории звездных пульсаций [9–11]. К таким проблемам, например, относится проблема 11-летних колебаний солнечной активности и других звезд солнечного типа, а также незавершенность теории колебаний цефеид [9–11].

В работе [12] для сферически-симметричных астрофизических объектов была предложена модель динамического равновесия, которая включала в себя важный дополнительный элемент - поток Хаббла. Гидродинамический поток Хаббла определяется законом Хаббла: V = H(t)r, где V — скорость потока на расстоянии r от центра системы, а H(t) называется параметром Хаббла. Этот закон обычно связывают с моделями космологической динамики в Общей теории относительности (ОТО) [4,5]. Наиболее важным свойством моделей с потоком Хаббла является то, что в автомодельных переменных параметры среды и структуры не зависят от времени явно. Такое свойство в дальнейшем будет называться динамическим равновесием соответствующего астрофизического объекта. С физической точки зрения динамическое равновесие является следствием баланса сил Архимеда и тяготения вместе с локальной силой реакции среды, необходимой для поддержания потока Хаббла. Модели с такого типа равновесием исследовались в рамках теории взрыва или коллапса звезд [2, 5, 6, 13–17] в форме автомодельной эволюции расширяющейся или сжимающейся оболочки звезды.

Сферически-симметричные структуры, исследованные в [12], сводились к модифицированным уравнениям классической теории Лейна – Эмдена [18, 19] звездных политроп. В таких моделях решалась первая из указанных выше проблем строения звезд, связанная с поведением плотности и температуры вблизи условной поверхности звезды. Однако другие проблемы при этом не решались. В частности, в рамках таких моделей эволюция звезд происходит по сути по сценариям их взрыва или коллапса в течение короткого времени, что не дает оснований для использования таких моделей в задачах медленной эволюции звезд или их осцилляций.

В настоящей работе предлагается модификация общей идеологии динамического равновесия с потоком Хаббла, связанная с включением в теорию не сферически-симметричных структур с зональным потоком. Это позволяет найти более точные условия динамического равновесия астрофизических структур, которые приводят к возможности медленной их автомодельной эволюции и автомодельным осцилляциям. Основным инструментом предлагаемой теории динамического равновесия является метод гидродинамических маркеров. Метод гидродинамических маркеров [20,21] в форме метода гидродинамических подстановок был применен в [22, 23] для построения и анализа космологических моделей с потоком Хаббла в рамках классической теории гравитации для пылевой среды. В этих же работах было показано, что метод гидродинамических подстановок, опирающийся на методологию гидродинамических маркеров, позволяет рассматривать модели не только пылевой среды, но и газообразной. Такой подход естественным образом приводит к автомодельным уравнениям динамики газа и пыли с потоком Хаббла. В классических исследованиях газодинамики взрыва звезд [2,6] автомодельные переменные вводятся в результате специального подбора функциональной зависимости переменных среды от времени. Аналогичный подход, но основанный на гидродинамических маркерах, приводит к новым результатам в описании автомодельной структуры звезд и других астрофизических структур.

Основной целью работы является создание и исследование моделей самогравитирующего газа в рамках гидродинамической постановки задачи, в которых выполняется закон Хаббла для радиальной составляющей не сферически-симметричного пространственного распределения скорости потока газа. Как показывается в работе, такие модели оказываются полезными для многих задач эволюции астрофизических объектов, в том числе, таких как нормальные звезды. Для нормальных звезд с дифференциальным вращением в работе развит подход, позволяющий анализировать их строение и эволюцию в автомодельном режиме, а также и процессы взрывного характера [2,3].

В начале работы выводятся общие уравнения теории гидродинамических маркеров и автомодельное описание параметров газа с их помощью. Затем выводятся уравнения динамического равновесия в среде для автомодельных переменных состояния ускоренно расширяющегося или сжимающегося газа при условии квазиадиабатичности этих процессов. Эти уравнения представляют собой модифицированные уравнения теории Лейна – Эмдена звездных политроп [1, 3]. Следующим этапом является анализ автомодельной эволюции звезд и условий возникновения их осцилляций. На основе аналитического и численного анализа решений уравнений динамического равновесия проводится классификация моделей и анализируется их связь с реальными данными о Солнце. В частности обсуждается проблема наличия максимума температуры в короне Солнца и осцилляций его активности с точки зрения построенных моделей динамического равновесия газового потока.

2. ОБЩИЕ УРАВНЕНИЯ МОДЕЛИ

Динамика расширяющегося или сжимающегося самогравитирующего газа в рамках классической механики описывается в цилиндрической системе координат уравнениями Эйлера и Пуассона :

$$u_{t} + uu_{r} + wu_{z} - \frac{v^{2}}{r} = -\frac{1}{\rho}p_{r} - \phi_{r},$$

$$w_{t} + uw_{r} + ww_{z} = -\frac{1}{\rho}p_{z} - \phi_{z},$$
 (1)

$$v_t + uv_r + wv_z + \frac{uv}{r} = 0,$$

$$a_1 + \frac{1}{2} \partial \left(ru_0 \right) + \frac{\partial}{\partial} \left(ru_0 \right) = 0$$
(2)

$$\rho_t + \frac{1}{r} \frac{\partial r}{\partial r} (r u \rho) + \frac{\partial dz}{\partial z} (\rho w) = 0, \qquad (2)$$

$$1 \frac{\partial dz}{\partial r} (r u \rho) + \frac{\partial dz}{\partial z} (r u \rho) = 0, \qquad (2)$$

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\phi_r\right) + \frac{\partial}{\partial z}\phi_z = 4\pi G\rho. \tag{3}$$

В этих уравнениях p(r, z, t) — давление газа, u(r, z, t), v(r, z, t), w(r, z, t) — компоненты скорости гидродинамического потока, $\rho(r, z, t)$ — плотность газа, $\phi(r, z, t)$ — потенциал поля тяготения, G постоянная тяготения Ньютона, r и z — радиальная и вертикальная координаты, t — время. Для замкнутого описания газовой среды данную систему уравнений необходимо дополнить уравнением состояния газа $p = p(\rho, s)$, где s(r, z, t) — локальная энтропия газа. Наличие компоненты скорости v(r, z, t) потока в зональном направлении эквивалентно дифференциальному вращению структуры вокруг вертикальной оси z.

Исключая с помощью первых двух уравнений системы (1) компоненты градиента потенциала ϕ из уравнения Пуассона (3), получаем следующее уравнение:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r(u_t + uu_r + wu_z)\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(w_t + uw_r + ww_z\right) - \frac{1}{r}\frac{\partial v^2}{\partial r} + 4\pi G\rho + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{r}{\rho}p_r\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{\rho}p_z\right) = 0.$$
(4)

Это уравнение можно назвать обобщенным уравнением динамического равновесия среды, поскольку в случае политропного состояния газа и отсутствия гидродинамического потока u = w = 0 оно сводится к уравнению статического равновесного распределения плотности и температуры в теории Лейна – Эмдена [18,19] звездных политроп. Это уравнение и его упрощенные версии будут центральными объектами в дальнейшем исследовании.

3. ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЕ МАРКЕРЫ

Для анализа динамики самогравитирующего газа воспользуемся методом, который опирается на описание динамики среды с помощью гидродинамических маркеров. Для сферически-симметричных течений метод использования гидродинамического маркера описан в работах [21–23]. Вариант использования маркеров для описания трехмерных течений описан в [20, 21]. В работах [24–26] в более общем варианте такой подход использовался для построения топологической теории фундаментальных полей.

В теории гидродинамических маркеров газ представляется как множество материальных точек, наделенных некоторыми неизменными физическими свойствами. Эти свойства точек определяют значения маркерных полей, которые не меняются при произвольном перемещении точек газа. В случае цилиндрической симметрии для описания перемещения среды достаточно ввести два маркерных поля $e^a(r, z, t), a = 1, 2$, которые по определению удовлетворяют уравнениям переноса

$$\frac{de^a}{dt} = e^a_t + ue^a_r + we^a_z = 0, \quad a = 1, 2.$$
 (5)

Если функции $e^{a}(r, z, t)$ удовлетворяет этим уравнениям, то их дифференциальным следствием является закон сохранения (см. [20–23]):

$$\frac{\partial}{\partial t}|J| + \frac{\partial}{\partial r}\left(u|J|\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(w|J|\right) = 0, \qquad (6)$$

где функция |J| — якобиан преобразования от координат z, r в координаты e^1, e^2 пространства значений маркеров:

$$|J| = |\det \hat{J}|. \tag{7}$$

Здесь

$$\hat{J} = \begin{vmatrix} e_r^1 & e_z^1 \\ e_r^2 & e_z^2 \end{vmatrix}$$
(8)

Отсюда следует, что функция

$$\rho = M_0 |J|/r \tag{9}$$

может быть отождествлена с плотностью массы вещества, поскольку она автоматически удовлетворяет закону сохранения массы (2). Здесь M_0 — масштабный коэффициент, имеющий размерность массы.

4. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА С ПОМОЩЬЮ МАРКЕРОВ

Метод маркерных полей позволяет получить связь между напряженностью гравитационного поля и значениями маркерных полей. В чисто радиальном случае [12, 23] эта связь выглядит следующим образом: $g = -\phi_r = -4\pi Ge(r, t)$, где e(r, t) — маркерное поле для сферически-симметричного распределения вещества среды. В двумерном и трехмерном случаях связь между вектором напряженности гравитационного поля и маркерными полями e^1 , e^2 строится на основе общей идеи, изложенной в работах [24–26]. Рассмотрим формальное тождество следующего вида:

$$\sum_{a=1}^{2} \frac{\partial e^a}{\partial e^a} = \frac{\partial e^1}{\partial e^1} + \frac{\partial e^2}{\partial e^2} = 2, \quad a = 1, 2.$$
(10)

Переходя в этом тождестве к физическим координатам r, z, получаем следующую форму этого тождества:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(|J|K^1 \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(|J|K^2 \right) = 2|J|, \qquad (11)$$

где

$$K^{1} = \sum_{b=1}^{2} e^{b} \frac{\partial r}{\partial e^{b}}, \quad K^{2} = \sum_{b=1}^{2} e^{b} \frac{\partial z}{\partial e^{b}}.$$
 (12)

Соотношение (11) с учетом (9) можно переписать в виде

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{2\pi GM_0|J|}{r}K^1\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(2\pi GM_0\frac{|J|}{r}K^2\right) = \frac{4\pi GM_0|J|}{r} = 4\pi G\rho,$$
(13)

а уравнение Пуассона (3) — в виде

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r \phi_r \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(r \phi_z \right) = 4 \pi G M_0 |J|.$$
(14)

Сравнивая теперь (13) с (14), устанавливаем, что имеют место равенства

$$g_{1} = -\phi_{r} = -\frac{2\pi G M_{0}}{r} |J| K^{1} + \Phi_{r},$$

$$g_{2} = -\phi_{z} = -\frac{2\pi G M_{0}}{r} |J| K^{2} + \Phi_{z},$$
(15)

где g_a , a = 1, 2 — компоненты вектора ускорения свободного падения, а $\Phi(r, z, t)$ — некоторая гармоническая функция:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\Phi}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\Phi = 0.$$
 (16)

Учитывая, что производные $\partial x^{\alpha}/\partial e^{a}$ являются элементами матрицы, обратной матрице Якоби \hat{J} (8), находим

$$\begin{aligned} |J|\frac{\partial r}{\partial e^1} &= \frac{\partial e^2}{\partial z}, \quad |J|\frac{\partial r}{\partial e^2} &= -\frac{\partial e^2}{\partial r}, \\ |J|\frac{\partial z}{\partial e^1} &= -\frac{\partial e^1}{\partial z}, \quad |J|\frac{\partial z}{\partial e^2} &= \frac{\partial e^1}{\partial r}. \end{aligned}$$

Отсюда

$$|J|K^{1} = \frac{\partial e^{2}}{\partial z}e^{1} - \frac{\partial e^{1}}{\partial z}e^{2}, \quad |J|K^{2} = \frac{\partial e^{1}}{\partial r}e^{2} - \frac{\partial e^{2}}{\partial r}e^{1}.$$
(17)

Теперь первые два уравнения системы (1) можно переписать в обновленной форме:

$$u_t + uu_r + wu_z - \frac{v^2}{r} = -\frac{1}{\rho}p_r - \frac{2\pi GM_0}{r}|J|K^1 + \Phi_r,$$

$$w_t + uw_r + ww_z = -\frac{1}{\rho}p_z - \frac{2\pi GM_0}{r}|J|K^2 + \Phi_z.$$
 (18)

Третье уравнение системы (1) для компоненты скорости v(r, z, t) может быть представлено так:

$$\frac{d}{dt}(rv) = \left(\frac{\partial}{\partial t} + u\frac{\partial}{\partial r} + w\frac{\partial}{\partial z}\right)(rv) = 0.$$
(19)

Отсюда следует, что функция rv(r, z, t) является произвольной дифференцируемой функцией маркеров. В результате имеем

$$v = V(e^1, e^2)/r.$$
 (20)

5. ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЙ ПОТОК ХАББЛА И АВТОМОДЕЛЬНЫЕ ПЕРЕМЕННЫЕ

Для выделения главных особенностей эволюции газодинамических структур используется идея представления параметров среды в виде функций от автомодельных переменных [2,5,6,13–17]. В случае потока с цилиндрической симметрией введем две автомодельные переменные $\xi = r/a(t)$ и $\zeta = z/b(t)$. Функции a(t) и b(t) обычно называют масштабными факторами, которые являются аналогом масштабных факторов в задачах космологии [2,5,6]. В таком подходе предполагается, что эволюция структур, например, звезд, сводится к растяжению или сжатию их пространственной структуры при неизменной ее формы в автомодельных переменных. Такое предположение приводит к достаточно жестким ограничениям на общую форму гидродинамического потока, которые означают, что маркеры $e^{j}(r, z, t), j = 1, 2,$ можно записать в следующей общей форме:

$$e^{j} = \tau_{j}(t)\mathcal{E}^{j}(\xi,\zeta), \quad j = 1,2,$$
 (21)

где $\tau_j(t)$ — некоторые функции времени, а $\mathcal{E}^j(\xi,\zeta)$ — 3 функции автомодельных переменных. Аналогичное представление делается при анализе автомодельной динамики быстрой эволюции звезд (взрыве или кол-

лапсе [2, 5, 6, 13–17]). В этом случае находим

$$\rho = \frac{M_0 \tau_1(t) \tau_2(t)}{a(t)^2 b(t)} \mathcal{R}(\xi, \zeta), \qquad (22)$$

где

$$\mathcal{R} = \frac{|\mathcal{J}(\xi,\zeta)|}{\xi}, \quad \mathcal{J} = \det \begin{vmatrix} \mathcal{E}_{\xi}^{1} & \mathcal{E}_{\zeta}^{1} \\ \mathcal{E}_{\xi}^{2} & \mathcal{E}_{\zeta}^{2} \end{vmatrix}.$$
(23)

Эту функцию в дальнейшем будем называть коэффициентом плотности. Из соотношения (22) следует, что масса, заключенная в любом замкнутом объеме V(t)[r, z] в физических координатах, но изменяющемся таким образом, что он остается фиксированным в автомодельных переменных, $V(t)[r, z] = \mathcal{V}[\xi, \zeta]$, не меняется во время эволюции:

$$\mathcal{M} = 2\pi \oint_{\mathsf{V}(t)} \rho r dr dz = 2\pi M_0 \oint_{\mathcal{V}} |\mathcal{J}(\xi,\zeta)| d\xi d\zeta = \text{const.}$$
(24)

Величина \mathcal{M} определяется целиком "числом" маркеров \mathcal{V}_0 (точек среды) в объеме V(t)[r, z]:

$$\mathcal{V}_0 = \oint\limits_{\mathcal{V}} |\mathcal{J}(\xi,\zeta)| d\xi d\zeta = \int\limits_{\mathcal{E}} de^1 de^2,$$

которая остается неизменной в процессе эволюции. Здесь Е — объем в пространстве значений маркеров. Границы звезд и других астрофизических объектов определяются обычно свойствами распределения плотности и температуры в них, которые должны фиксироваться в автомодельных переменных. Это будет обсуждаться далее. Поэтому процесс автомодельной эволюции, по крайней мере, в рассматриваемых моделях соответствует условию $\mathcal{M} = 0.$ В частности, не имеет физического смысла связывать автомодельную эволюцию с процессами потери массы звездами за счет звездного ветра. В стандартном понимании [2] звездный ветер — это поток частиц с поверхности звезды, теряющих со временем гравитационную связь с ней. Такой процесс должен описываться соотношениями с изменением числа частиц в звезде, т.е. с $\dot{\mathcal{V}}_0 < 0$.

Подставляя (21) в уравнения переноса маркеров (5), приходим к следующим соотношениям:

$$\Theta_{j}\mathcal{E}^{j} + \frac{\mathcal{E}_{\xi}^{j}}{a(t)}\left(u - H(t)r\right) + \frac{\mathcal{E}_{\zeta}^{j}}{b(t)}\left(w - F(t)z\right) = 0,$$

$$j = 1, 2.$$
(25)

Здесь

$$\Theta_j = \frac{\dot{\tau}_j}{\tau_j}, \quad j = 1, 2; \quad H = \frac{\dot{a}}{a}, \quad F = \frac{\dot{b}}{b}.$$

Функции H = H(t) и F = F(t) называются в космологии параметрами Хаббла. Общие решение системы (25) относительно компонентов u(r, z, t) и w(r, z, t) скорости потока имеет вид

$$u = H(t)r + a(t)\frac{\Theta_2 \mathcal{E}^2 \mathcal{E}_{\zeta}^1 - \Theta_1 \mathcal{E}^1 \mathcal{E}_{\zeta}^2}{\mathcal{J}},$$
(26)

$$w = F(t)z + b(t)\frac{\Theta_1 \mathcal{E}^1 \mathcal{E}_{\xi}^2 - \Theta_2 \mathcal{E}^2 \mathcal{E}_{\xi}^1}{\mathcal{J}}.$$
 (27)

Если рассматривать ситуацию, когда $\dot{\Theta}_j = 0, \ j = 1, 2$, то система (25) оказывается вырожденной относительно *u* и *v*. В силу требования независимости $\mathcal{E}^1(\xi,\zeta)$ и $\mathcal{E}^2(\xi,\zeta)$ друг относительно друга (иначе плотность обращается в нуль), единственным решением системы (25) относительно *u* и *w* в этом случае является анизотропный поток Хаббла:

$$u = H(t)r = a(t)H(t)\xi, \ w = F(t)z = b(t)F(t)\zeta.$$
 (28)

Для такого выбора компонентов потока имеем

$$u_t + uu_r + wu_z = a(H + H^2)\xi, w_t + uw_r + ww_z = b(\dot{F} + F^2)\zeta.$$
(29)

Ранее сферически-симметричные модели космологических течений с потоком Хаббла в рамках классической механики Ньютона рассматривались в работах [5, 27, 28]. Следует отметить, что стандартным подходом к выбору автомодельных переменных (см. [2, 5, 6]) является явное определение функциональной зависимости a = a(t) в виде некоторой степенной функции. В этом случае появляется возможность более общего выбора пространственного распределения скорости потока в зависимости от автомодельной переменной ξ , но ограничивается форма автомодельной эволюции газа со временем. В противоположность этому в случае выбора скорости потока в форме (28) можно получить модели с более ограниченным по форме пространственным распределением параметров газовой среды, эволюция которой со временем описывается более общей системой уравнений [12]. Ограничения пространственного распределения параметров среды в случае выбора закона Хаббла сводятся к тому, что автомодельное уравнения для плотности или температуры оказываются некоторой модификацией уравнения Лейна-Эмдена [12]. Именно этот вариант и будет рассматриваться далее в данной работе.

6. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ УСЛОВИЯ В СРЕДЕ

В данной работе будет рассматриваться модель самогравитирующей среды в форме идеального газа с уравнением состояния Менделеева – Клапейрона:

$$p = \frac{\mathcal{A}}{\mu_g} \rho T, \tag{30}$$

где \mathcal{A} — универсальная газовая постоянная, а μ_g — молярная масса газа. На термодинамические процессы в газе будут накладываться определенные ограничения. Эти ограничения связаны с тем, как происходят изменения локальной энтропии s(r, z, t) со временем. Такие ограничения возникают как условия автомодельности самогравитирующей системы, обладающей автомодельным потоком Хаббла (28).

6.1. Автомодельные режимы распределения энтропии

Согласно первому закону термодинамики, в каждой точке пространства для идеального газа приращение энтропии [2] можно представить в следующем виде:

$$ds/c_v = d\ln\left(T\rho^{1-\gamma}\right).$$

Здесь c_v — молярная теплоемкость при постоянном объеме, а γ — показатель адиабаты. Отсюда следует

$$T = Q_0 \rho^{\gamma - 1} e^{s/c_v}, \tag{31}$$

где Q_0 — некоторая постоянная, характеризующая состояние газа в некоторой фиксированной точке пространства. Если локальная энтропия постоянна в пространстве и времени: s = const, то процесс расширения или сжатия газа будет "глобально" адиабатическим. Локально адиабатический процесс соответствует условию, когда энтропия не меняется вдоль линий переноса газа. В этом случае для *s* имеем уравнение переноса

$$\frac{ds}{dt} \equiv s_t + us_r + ws_z = 0. \tag{32}$$

В этом случае энтропия является некоторой функцией гидродинамических маркеров: $s = s(e^1, e^2) = S(\xi, \zeta)$. Такие процессы характерны для процессов взрыва звезд, расширения звездных оболочек [2,6] и процессов космологического расширения, когда диффузионной теплопередачей можно пренебречь.

Кроме таких процессов в дальнейшем будут рассматриваться и квазиадиабатические процессы, для которых энтропия будет явно зависеть от времени по следующему закону:

$$s = s_a(\xi, \zeta) + s_0(t).$$
 (33)

Здесь $s_a(\xi, \zeta)$ — некоторая функция автомодельных переменных, а $s_0(t)$ — функция времени, характеризующая поступление тепла в систему. Такие процессы эквивалентны уравнению для *s* следующего вида:

$$\frac{ds}{dt} = \dot{s}_0$$

что соответствует однородному по пространству оттоку или притоку тепла в систему в зависимости от знака функции \dot{s}_0 . Эти режимы теплообмена важны при описании моделей динамики газа с автомодельным распределением его в пространстве.

6.2. Уравнения состояния

Уравнение состояния, соответствующее (31), можно представить в виде

$$p = K_0 e^{s/c_v} \rho^{\gamma}, \quad K_0 = Q_0 \mathcal{A} \mu_g^{-1}.$$
 (34)

Для процессов (33) это уравнение можно записать как

$$p = K_0 \sigma(t) \mathcal{S}(\xi, \zeta) \rho^{\gamma}.$$
(35)

Здесь $\sigma(t) = e^{s_0(t)/c_v}$ и $S(\xi,\zeta) = e^{s_a(\xi,\zeta)/c_v}$. Соответствующее соотношение для температуры будет иметь вид

$$T = K_0 \sigma(t) \mathcal{S}(\xi, \zeta) \rho^{\gamma - 1} = \Pi(t) \mathcal{T}(\xi, \zeta), \qquad (36)$$

где

$$\Pi(t) = K_0 \sigma(t) M_0^{\gamma - 1} a^{-2(\gamma - 1)} b^{-\gamma + 1},$$

$$\mathcal{T}(\xi, \zeta) = \mathcal{S}(\xi, \zeta) \mathcal{R}^{\gamma - 1}(\xi, \zeta).$$
(37)

Квазиадиабатические процессы, соответствующие (33), можно рассматривать и для анализа эволюции звездной структуры в автомодельном режиме [2, 3]. В этом случае необходимо к уравнениям состояния добавлять уравнения, позволяющие описывать функцию $\mathcal{S}(\xi,\zeta)$ с помощью уравнений теплопередачи в звездах с учетом объемного энерговыделения в них. Однако эта задача, как уже отмечалось, требует отдельного анализа, выходящего за рамки данной работы. Далее будут рассмотрены модели с однородным ($\mathcal{S}(\xi,\zeta) \equiv 1$) и с неоднородным политропным распределениями энтропии $\mathcal{S}(\xi,\zeta) \sim \mathcal{R}^{\delta}$, где δ — некоторая постоянная. В последнем случае, пользуясь автомодельностью распределения энтропии, можно полагать, что $\mathcal{S}(\xi,\zeta)$ может быть задана в начальный момент времени. Подобный подход используется в случае анализа моделей взрыва в звездах [2].

7. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ПОТОКА ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА

Сформулированные общие положения позволяют получить уравнения для всех автомодельных переменных среды, включая маркеры \mathcal{E}_j , j = 1, 2, а также коэффициенты плотности \mathcal{R} и температуры \mathcal{T} . Используя (21), (22), (29) и (20), уравнения (18) можно привести к следующему виду:

$$a(\dot{H} + H^2)\xi - \frac{V^2(\xi,\zeta)}{a^3\xi^3} =$$

= $\mathcal{F}_A^1 - \frac{2\pi G M_0}{a\xi} |J| K_1 + \Phi_r,$ (38)
 $b(\dot{F} + F^2)\zeta = \mathcal{F}_A^2 - \frac{2\pi G M_0}{a\xi} |J| K_2 + \Phi_z.$

Эти уравнения представляют собой уравнения для маркеров $\mathcal{E}^1(\xi,\zeta)$, $\mathcal{E}^2(\xi,\zeta)$. В них \mathcal{F}^1_A , \mathcal{F}^2_A — компоненты силы Архимеда по соответствующим осям координат:

$$\mathcal{F}^1_A = -\frac{\Pi(t)}{a\mathcal{R}}\frac{\partial}{\partial\xi}(\mathcal{SR}^{\gamma}), \quad \mathcal{F}^2_A = -\frac{\Pi(t)}{b\mathcal{R}}\frac{\partial}{\partial\zeta}(\mathcal{SR}^{\gamma}).$$

Здесь предполагается выполнение уравнения состояния (35).

8. РАЗДЕЛЕНИЕ ПЕРЕМЕННЫХ

Для полного описания распределения и эволюции всех составляющих динамики среды необходимо решать пару уравнений (38) относительно $\mathcal{E}^1(\xi,\zeta), \mathcal{E}^2(\xi,\zeta)$. Поскольку эти уравнения записаны в автомодельных переменных с коэффициентами, зависящими от времени, для построения решений этих уравнений необходимо в каждом из них разделить переменную t и пространственные переменные ξ, ζ . Чтобы проделать такую процедуру, перепишем уравнения (38), используя (17) в следующем виде:

$$a(\dot{H} + H^2)\xi - \frac{V^2(\xi,\zeta)}{a^3\xi^3} = = -\frac{\Pi(t)}{a}\frac{1}{\mathcal{R}}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\mathcal{SR}^{\gamma}\right) - \frac{2\pi GM_0}{a^2}\mathcal{K}_1 + \frac{1}{a}\Phi_{\xi}, b(\dot{F} + F^2)\zeta = = -\frac{\Pi(t)}{b}\frac{1}{\mathcal{R}}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\mathcal{SR}^{\gamma}\right) - \frac{2\pi GM_0}{a^2}\mathcal{K}_2 + \frac{1}{b}\Phi_{\zeta}.$$
(39)

Здесь введены обозначения

$$\mathcal{K}_1 = \frac{a}{b} \frac{1}{\xi} \left(\frac{\partial \mathcal{E}^2}{\partial \zeta} \mathcal{E}^1 - \frac{\partial \mathcal{E}^1}{\partial \zeta} \mathcal{E}^2 \right),$$
$$\mathcal{K}_2 = \frac{1}{\xi} \left(\frac{\partial \mathcal{E}^1}{\partial \xi} \mathcal{E}^2 - \frac{\partial \mathcal{E}^2}{\partial \xi} \mathcal{E}^1 \right).$$

Заметим, что \mathcal{K}_1 и \mathcal{K}_2 удовлетворяют тождеству

$$\frac{1}{\xi}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\mathcal{K}_{1}\right) + \frac{a}{b}\frac{\partial\mathcal{K}_{2}}{\partial\zeta} = 2\mathcal{R}.$$
(40)

Поскольку \mathcal{K}_1 , \mathcal{K}_2 и \mathcal{R} зависят только от ξ и ζ , из последнего соотношения следует требование $b = \beta a(t)$. Параметр β можно назвать параметром анизотропии эволюции газодинамической структуры.

Необходимым условием разделения переменных является требование выполнения соотношения

$$V^2 = \mu \xi^4 + h(\xi), \tag{41}$$

где $\mu > 0$ — постоянная, а $h(\xi)$ — вспомогательная функция, требующая уточнения. Физический смысл μ и h устанавливается после подстановки (41) в (20). В результате находим, что слагаемое с коэффициентом μ связано с вращением системы как твердого тела, а слагаемое с h описывает дифференциальное вращение.

Представим произвольную пока функцию Ф в следующем виде:

$$\Phi = \frac{2\pi G M_0}{a} \Phi_0(\xi,\zeta) + \frac{n(\xi)}{a^2} + \frac{b^2 \mu}{2a^4} \zeta^2, \qquad (42)$$

где $\Phi_0(\xi, \zeta)$ и $n(\xi)$ — некоторые вспомогательные функции, требующие уточнения их смысла. Подставляя теперь (42) и (41) в уравнения системы (39), получаем

$$\left[a(\dot{H} + H^2) - \frac{\mu}{a^3} \right] \xi - \frac{h}{a^3 \xi^3} = = -\frac{\mathcal{P}(t)}{a} \frac{1}{\mathcal{R}} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\mathcal{SR}^{\gamma} \right) - \frac{2\pi G M_0}{a^2} \left(\mathcal{K}_1 + \Phi_{0,\xi} \right) + \frac{n'}{a^3}, b \left[(\dot{F} + F^2) - \frac{\mu}{a^4} \right] \zeta =$$
(43)
 = $-\frac{\mathcal{P}(t)}{b} \frac{1}{\mathcal{R}} \frac{\partial}{\partial \zeta} \left(\mathcal{SR}^{\gamma} \right) - \frac{2\pi G M_0}{a^2} \left(\mathcal{K}_2 + \frac{a}{b} \Phi_{0,\zeta} \right).$

Условиями разделения переменных в этих уравнениях теперь являются следующие соотношения:

$$\frac{a\Pi(t)}{2\pi GM_0} = \frac{K_0 M_0^{\gamma-2} \beta^{1-\gamma}}{4\pi G} \sigma(t) a^{4-3\gamma} = Q_1 = \text{const}; a^3 \left(\dot{H} + H^2\right) - \frac{\mu}{a} = 2\pi G M_0 \Lambda, \qquad (44) h = -\xi^3 n'(\xi).$$

Кроме этого, необходимо, чтобы разделение переменных было выполнено в уравнении для функции Результатом процедуры разделения переменных являются уравнения (43)

$$\Lambda \xi + \frac{Q_1}{\mathcal{R}} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(S \mathcal{R}^{\gamma} \right) + \mathcal{K}_1 + \Phi_{0,\xi} = 0, \qquad (45)$$
$$\beta \Lambda \zeta + \frac{Q_1}{\beta \mathcal{R}} \frac{\partial}{\partial \zeta} \left(S \mathcal{R}^{\gamma} \right) + \mathcal{K}_2 + \frac{1}{\beta} \Phi_{0,\zeta} = 0.$$

Основной задачей данной работы является получение и анализ решений относительно распределения плотности среды и эволюции масштабных факторов. Для решения этой задачи вместо построения решений системы уравнений (45) относительно \mathcal{E}^1 и \mathcal{E}^2 достаточно решать уравнение динамического равновесия. Вычисляя дивергенцию этих двух уравнений в переменных ξ и ζ и учитывая то, что функция Φ_0 удовлетворяет уравнению (96)(см. Приложение), приходим к модифицированному уравнению Лейна – Эмдена для функции \mathcal{R}

$$\lambda + \mathcal{R} + \frac{Q_1}{2} \left[\frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\xi}{\mathcal{R}} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(S \mathcal{R}^{\gamma} \right) \right) + \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial}{\partial \zeta} \left(\frac{1}{\mathcal{R}} \frac{\partial}{\partial \zeta} \left(S \mathcal{R}^{\gamma} \right) \right) \right] = 0.$$
(46)

Параметр $\lambda = 3\Lambda/2$ будем далее называть параметром динамического равновесия. Знак и величина этого параметра определяют характер и величину отклонения системы от точного баланса сил Архимеда и тяготения.

В соответствии с (44) физический смысл параметра ν и, соответственно, параметра λ , состоит в том, что они определяют локальную силу реакции среды на ускоренное ее расширение или сжатие, вызванную нарушением баланса сил тяготения и Архимеда. Обычно строение звезд рассматривается в предположении их статического равновесия, когда в каждой точке среды сила тяготения в точности уравновешивается силой Архимеда. Такому равновесию соответствует значение $\lambda = 0$. В реальности, если слои звезды смещаются в радиальном направлении и имеется зональный поток, то баланс силы тяготения и Архимеда нарушается. При этом в системе возникают потоки радиального и зонального перемещения точек среды, приводящие к автомодельной эволюции. В статическом случае $a(t) \equiv \text{const}$ выполняется условие баланса сил и уравнения модели формально переходят в уравнения статической теории строения звезд [1,3] с $\lambda = 0$. Как будет ясно из дальнейшего, дополнительная сила реакции среды, связанная с λ , играет важную

роль в структуре звезд и космологических потоков газа, находящихся не в статическом, а динамическом равновесии.

9. ЭВОЛЮЦИЯ ГАЗОДИНАМИЧЕСКОГО ПОТОКА СО ВРЕМЕНЕМ

Автомодельная эволюция газодинамической структуры описывается третьим уравнением системы (44), в соответствии с которым происходит растяжение или сжатие структуры в зависимости от изменений со временем масштабного фактора a(t). Это уравнение перепишем в следующем виде:

$$\ddot{a} = \mu a^{-3} + \nu a^{-2}. \tag{47}$$

Здесь введено обозначение

$$\nu = \frac{4\pi G M_0}{3\beta} \lambda. \tag{48}$$

Для удобства дальнейшего качественного анализа решений уравнения (47), представим его в форме динамической системы:

$$\dot{c} = \frac{\mu}{a^3} + \frac{\nu}{a^2}, \quad \dot{a} = c.$$
 (49)

Эту систему удобно привести к безразмерному виду, вводя новые переменные

$$x = a/a_0, \quad y = t_0 c/a_0, \quad \tau = t/t_0$$

где

$$a_0 = \frac{\mu}{|\nu|}, \ t_0 = \frac{\mu^{3/2}}{|\nu|^2}.$$
 (50)

В этом случае система (49) приобретает вид

$$\frac{dy}{d\tau} = x^{-3} + \operatorname{sign}(\nu)x^{-2}, \quad \frac{dx}{d\tau} = y, \tag{51}$$

в котором отсутствуют свободные параметры, кроме знака величины ν .

Динамическая система (51) имеет в случае $\nu > 0$ одну особую точку, а в случае $\nu < 0$ — две. Общей для обоих знаков ν особой точкой является точка $(x_{\infty} = \infty, c_{\infty} = 0)$. В случае $\nu < 0$ дополнительной особой точкой является точка $x_0 = 1, y_0 = 0$, что соответствует $a_0 = \mu/|\nu|$. Именно эта точка представляет особый интерес с точки зрения существования автомодельных осцилляций структуры при сохранении их динамического равновесия. Полагая вблизи этой точки $x = 1 + \eta(t), y = \delta$, где η и δ — бесконечно малые величины первого порядка малости, приходим к линеаризованной системе

$$\dot{\eta} = \delta, \quad \dot{\delta} = -\eta. \tag{52}$$

Отсюда следует, что особая точка $x_0 = 1, y_0 = 0$ является центром, а размерная угловая частота Ω_0 бесконечно малых колебаний вблизи этого центра равна

$$\Omega_0 = \frac{1}{t_0} = \frac{|\nu|^2}{\mu^{3/2}}.$$
(53)

Таким образом, при $\nu < 0$ для начальных условий вблизи особой точки с $a_0 = \mu/|\nu|$ эволюция газодинамической структуры представляет собой колебания с частотой близкой к Ω_0 .

Динамическая система (51) имеет интеграл движения

$$\frac{y^2}{2} + \operatorname{sign}(\nu)\frac{1}{x} + \frac{1}{2x^2} = E, \qquad (54)$$

который аналогичен интегралу энергии частицы, совершающей одномерное движение в потенциальном поле сил.

9.1. Фазовые портреты при $\nu < 0$

Фазовые траектории динамической системы (51), соответствующие (54) для различных значений E при $\nu < 0$, приведены на диаграмме рис. 1. Особая точка системы обозначена на диаграмме 1 под номером 0. Жирной линией под номером 4 обозначена фазовая траектория, соответствующая значению E = 0. Все траектории для -0.5 < E < 0 являются замкнутыми, а траектории с E > 0 асимптотически стремятся к точкам ($x = \infty$, $y = \pm \sqrt{2E}$) при $t \to \pm \infty$. Из (54) следует, что фазовые траектории для -0.5 < E < 0 являются замкнутыми, а траектории с x = 0.

$$x_{\pm} = \frac{1}{1 \pm \sqrt{2E + 1}}.$$
 (55)

Точка x_+ соответствует максимальному сжатию структуры, а точка x_- — максимальному расширению. Размах колебаний $\Delta_E = |x_- - x_+|$ в случае осцилляций определяется следующим образом:

$$\Delta_E = |x_- - x_+| = \frac{\sqrt{1 - 2|E|}}{|E|}.$$
 (56)

Для $E = 0 x_{-} = \infty$, а при E > 0 эта точка лежит в отрицательной области значений $x_{-} < 0$, но траектории в полуплоскости x < 0 не имеют физического смысла.

Период колебаний P_E газодинамического объекта, соответствующий определенному значению параметра E, вычисляется в соответствии со следующей формулой:

$$P_E = 2 \int_{x_+}^{x_-} \frac{x dx}{\sqrt{2Ex^2 + 2x - 1}} = \frac{\pi \sqrt{2}}{2|E|^{3/2}}.$$
 (57)

Как следует из этого соотношения при $E\to 0$ период колебаний стремится к бесконечности.

Таким образом, в случае $\nu < 0$ и 0.5 < E < 0газодинамическая система представляет собой осциллирующую астрофизическую структуру сжимающуюся и расширяющуюся со временем с периодом, который определяется параметром Ω_0 . В дальнейшем свяжем данные структуры со звездами, совершающими осцилляции. Основной причиной возникновения осцилляций является периодическая перекачка энергии от кинетической энергии радиального сжатия или расширения к энергии зонального потока и потенциальной энергии силы тяготения при неизменном балансе сил тяготения, Архимеда и реакции среды. Когда звезда автомодельно расширяется с увеличением масштабного фактора а. кинетическая энергия среды, запасаемая в радиальном потоке, убывает, а разность потенциальной энергия среды в поле тяготения и энергии зонального потока увеличивается. На обратном ходе цикла колебаний кинетическая энергия зонального потока увеличивается, а разность потенциальной энергии и энергии зонального потока уменьшается. При $\mu = 0$, т.е. при отсутствии зонального потока, колебательный режим невозможен, поскольку сам знак потенциальной энергии не меняется в процессе эволюции. Такая ситуация соответствует чисто радиальной модели, описанной в [12]. Такой тип осцилляций не требует наличия в звезде слоя переионизации газа, который необходим для механизма осцилляций, предложенного в работах [32–34] для цефеид. Следовательно, механизм осцилляций, соответствующий предлагаемой модели, возможен на любой стадии эволюции звезд, но может иметь различные варианты параметров осцилляций.

9.2. Фазовые портреты при $\nu > 0$

Фазовые траектории динамической системы (51) для $\nu > 0$ приведены на диаграмме рис. 2.

Допустимыми значениями параметра E для данных траекторий являются значения E > 0. Траектории на диаграмме рис. 2 пересекают ось абсцисс в точках

$$x_E = \frac{1}{-1 + \sqrt{2E + 1}}$$

Эти точки соответствуют максимальному возможному сжатию структуры и достигается только, если в начальный момент времени y(0) < 0. Исходя из соотношения (54) находим, что при $\tau \to \infty$ скорость расширения автомодельной структуры стремится к



Рис. 1. Фазовый портрет (51) для $\nu < 0$: E = -0.5(0), -0.4(1), -0.3(2), -0.2(3), 0(4), 0.5(5), 1.0(6), 2.0(7)



Рис. 2. Фазовый портрет (51) для $\nu > 0$: E = 0.125 (1), 0.25 (2), 0.5 (3), 1.0 (4), 2.0 (5), 4.0 (6)

постоянному значению y_{∞} , которое определяется величиной энергетического параметра E

$$y_{\infty} = \sqrt{2E}.$$
 (58)

Соответствующее значение E определяет и асимптотическую скорость сжатия при $t \to -\infty$, равное $y_{-\infty} = -\sqrt{2E}$.

10. АВТОМОДЕЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ГАЗА

Рассмотрим теперь пространственную структуру распределения плотности, температуры и других параметров среды, которые соответствуют рассмотренной автомодельной эволюции звезд. Эти распределения описываются уравнением (46). Приведем это уравнение к следующему виду:

$$\frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \mathcal{S}_{\xi} \mathcal{T} + S \mathcal{T}_{\xi} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \mathcal{S}_{\eta} \mathcal{T} + S \mathcal{T}_{\eta} \right) + \mathcal{T}^{n} + \lambda = 0.$$
(59)

Здесь введены обозначения $\eta = \beta \zeta = z/a(t)$ и $n = (\gamma - 1)^{-1}$ — показатель политропы. При выводе этого уравнения, учитывая произвол в выборе параметра K_0 , параметр Q_1 в (46) был выбран в соответствии с соотношением

$$\frac{\gamma}{2(\gamma-1)}Q_1 = 1.$$

Заметим, что в случае сферической симметрии распределения плотности в газодинамической структуре при условиях: $\mathcal{S}(\xi,\eta) = S_0 = \text{const}$ и $\lambda = 0$, уравнение (59) превращается в классическое уравнение звездных политроп Лейна-Эмдена (LEm) [1, 3, 18, 19]. Уравнение LEm при $a(t) = a_0 = \text{const}$ описывает статическое распределение плотности и температуры в нормальных звездах с политропным уравнением состоянием газа (плазмы). В рамках же расширенной теории, когда $\lambda \neq 0$ и a = a(t), это уравнение описывает нестатические астрофизические (и космологические) объекты с автомодельной структурой. Модели же с функцией $\mathcal{S}(\xi,\eta),$ отличной от постоянной, позволяют учитывать теплопередачу в газе. Поэтому уравнение (59) можно рассматривать как двумерное обобщение уравнения Лейна-Эмдена.

Существенным отличием рассматриваемой в данной работе модели от модели Лейна – Эмдена является отсутствие полной сферической симметрии в распределении плотности и других параметров среды. Это отличие является принципиальным, но может быть малым. Полная сферическая симметрия означает, что все параметры среды, включая маркеры e^1, e^2 , зависят только от сферической координаты $\chi = \sqrt{\xi^2 + \eta^2}$. Однако в этом случае имеем

$$\begin{aligned} |\mathcal{J}| &= \frac{\partial \mathcal{E}^1}{\partial \xi} \frac{\partial \mathcal{E}^2}{\partial \zeta} - \frac{\partial \mathcal{E}^1}{\partial \zeta} \frac{\partial \mathcal{E}^2}{\partial \xi} = \\ &= \left(\frac{\partial \mathcal{E}^1}{\partial \chi} \frac{\partial \mathcal{E}^2}{\partial \chi} - \frac{\partial \mathcal{E}^1}{\partial \chi} \frac{\partial \mathcal{E}^2}{\partial \chi}\right) \frac{\xi \zeta}{\chi^2} = 0. \end{aligned}$$

Отсюда следует, что и $\rho = a^{-3}\beta^{-1}M_0|\mathcal{J}|/\xi = 0$, т.е. плотность среды в таком представлении оказывается нулевой. Поэтому маркеры должны обязательно зависеть от двух координатных переменных. Вместе с этим реальные астрофизические структуры очень часто обладают пространственными симметриями. К таким объектам относятся звезды и спиральные галактики. Звезды в большинстве своем обладают почти точной сферической симметрией, отклонения от которой в случае одиночных звезд обусловлены их вращением. Для Солнца эффект нарушения сферической симметрии мало заметен. Тем не менее, наличие дифференциального вращения Солнца указывает на отклонения от его сферической симметрии, что проявляется и в распределении магнитного поля по его поверхности. В отличие от звезд спиральные галактики и другие аналогичные структуры представляют собой почти плоские тонкие диски. В таких структурах скорость изменения плотности вдоль оси вращения существенно больше, чем вдоль радиальной координаты в плоскости диска. Эллиптические галактики и быстро вращающиеся звезды занимают промежуточное положение между одиночными звездами и спиральными галактиками. В качестве основной цели исследований в данной работе будут рассмотрены звезды с относительно медленным вращением. Галактики и другие типы объектов следует рассматривать в отдельной работе.

Для описания почти сферических звезд перейдем в уравнении (59) от цилиндрических координат к сферическим. Соответственно уравнение (59) примет следующий вид:

$$\frac{1}{\chi^2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\chi^2 \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \mathcal{S}_{\chi} \mathcal{T} + S \mathcal{T}_{\chi} \right) \right) + \tag{60}$$

$$+\frac{1}{\chi^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \mathcal{S}_{\theta} \mathcal{T} + S \mathcal{T}_{\theta} \right) \right) + \mathcal{T}^n + \lambda = 0$$

Здесь $\chi = \sqrt{\xi^2 + \eta^2}$ и $\theta = \operatorname{arctg}(\xi/\eta)$ — радиальная координата и полярный угол соответственно. По аналогии с моделями Лейна – Эмдена в качестве граничных условий для безразмерной функции $\mathcal{R}(\chi, \theta)$, записанной в сферических координатах, будем рассматривать два условия:

$$\mathcal{R}(0,\theta) = 1, \quad \frac{\partial}{\partial \chi} \mathcal{R}(\chi,\theta) \Big|_{\chi=0} = 0.$$
 (61)

Первое из этих условий фактически связывает масштаб плотности газа в исследуемых объектах, например, неопределенный пока параметр M_0 , с его плотностью в центре поля. Второе условие необходимо для того, чтобы исключить сингулярные в центре поля решения. Отсюда также следует граничное условие для $S(\chi, \theta)$:

$$\left. \frac{\partial}{\partial \chi} \mathcal{S}(\chi, \theta) \right|_{\chi=0} = 0, \tag{62}$$

которое также необходимо для исключения сингулярных в точке $\chi = 0$ решений в случае неоднородного распределения энтропии. Граничным условием

по угловой координате, как обычно, следует считать условие периодичности.

Предположим, что функция $S(\chi, \theta)$ может быть представлена в виде ряда:

$$S = S_0(\chi) + \sum_{k=1}^{\infty} \varsigma^k S_k(\chi, \theta), \qquad (63)$$

Тогда решение уравнения (60) можно искать в виде аналогичного ряда:

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}_0(\chi) + \sum_{k=1}^{\infty} \varsigma^k \mathcal{T}_k(\chi, \theta), \tag{64}$$

где ς — малый параметр, характеризующий отклонение автомодельного распределения плотности и температуры от сферически симметричной формы. Подставляя (64) в уравнение (60), можно получить уравнения для всех функций \mathcal{T}_k . В нулевом порядке уравнение выглядит следующим образом:

$$\frac{1}{\chi^2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\chi^2 \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \mathcal{S}_{0,\chi} \mathcal{T}_0 + S_0 \mathcal{T}_{0,\chi} \right) \right) + \mathcal{T}_0^n + \lambda = 0.$$
(65)

Граничные условия для \mathcal{T}_0 будут иметь такой вид:

$$\mathcal{T}_0(0) = 1, \quad \mathcal{T}'_0(0) = 0.$$
 (66)

Уравнение этого типа при $S_0 = 1$ рассматривалось в [12] для анализа автомодельной эволюции центрально симметричных астрофизических структур.

В первом порядке теории возмущений имеем следующее линейное уравнение для функции \mathcal{T}_1 :

$$\frac{1}{\chi^2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\chi^2 \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \mathcal{S}_{0,\chi} \mathcal{T}_1 + S_0 \mathcal{T}_{1,\chi} \right) \right) + n \mathcal{T}_0^{n-1}(\chi) \mathcal{T}_1 + \frac{1}{\chi^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \mathcal{S}_{0,\theta} \mathcal{T}_1 + S_0 \mathcal{T}_{1,\theta} \right) \right) = (67)$$
$$= F_1(\chi, \theta),$$

с однородными граничными условиями

$$\mathcal{T}_1(0,\theta) = 0, \quad \mathcal{T}_1'(0,\theta) = 0.$$

Функция $F_1(\chi, \theta)$ имеет при этом вид

$$F_{1} = -\frac{1}{\chi^{2}} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\chi^{2} \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \mathcal{S}_{1,\chi} \mathcal{T}_{0} + S_{1} \mathcal{T}_{0,\chi} \right) \right) - \frac{1}{\chi^{2} \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \mathcal{S}_{1,\theta} \mathcal{T}_{0} \right) \right).$$

Уравнение (67) для однородной части решения допускает разделение переменных, поэтому

$$\mathcal{T}_1 = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(\chi) \mathcal{P}_l(\cos \theta).$$

Здесь $\mathcal{P}_l(\cos(\theta))$ — функции, удовлетворяющие уравнениям

$$\frac{1}{\chi^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} S_{0,\theta} \mathcal{P}_l + S_0 \mathcal{P}_{l,\theta} \right) \right) + \Lambda(l) \mathcal{P}_l = 0.$$

Это уравнение в случае $S_0 = 1$ переходит в классическое уравнение Лежандра для одноименных полиномов $P_l(\cos \theta), \ l = 0, ..., \infty$, с собственным числом $\Lambda = l(l+1)$. Функции $R_l(\chi)$ являются собственными функциями радиального уравнения

$$\frac{1}{\chi^2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\chi^2 \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma} \mathcal{S}_{0,\chi} R_l + S_0 R_{l,\chi} \right) \right) + \\ + n \mathcal{T}_0^{n-1}(\chi) R_l = \Lambda(l) R_l$$
(68)

с граничными условиями $R_l(0) = 0$, $R'_l(0) = 0$.

Несмотря на всю важность анализа возмущений, в данной работе этот анализ проводится не будет. Такие вычисления удобно представлять в отдельной работе. Поэтому далее основное внимание будет уделено анализу уравнения (65), которое можно назвать модифицированным уравнением Лейна – Эмдена (mLEm), от которого это уравнение отличается лишь наличием аддитивной постоянной $\lambda \neq 0$.

Кроме этого, следует отметить, что в теории строения звезд используют граничные условия для температуры и давления на поверхности звезды, где $\mathcal{R}(\chi, \theta)$ обращается по определению в нуль [1,3]. При этом могут возникать определенные проблемы, связанные с тем, что плотность и температура могут обращаться в нуль не при одном и том же значении r. Как будет ясно из дальнейшего, условие обращения в нуль плотности на поверхности звезды, которое на самом деле является приближенным, в наиболее интересном классе моделей с $\lambda < 0$ не выполняется. В таких моделях для определения радиуса звезды следует использовать положение первого минимума плотности или температуры. Такое определение более точно отражает суть физических процессов, формирующих звезды и другие астрофизические структуры.

11. МОДЕЛИ С ОДНОРОДНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ЭНТРОПИИ. ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ ДЛЯ n = 1

Начнем анализ моделей пространственной структуры с наиболее простых моделей, имеющих однородное распределение энтропии, полагая $S_0(\chi) = 1$. Целью дальнейшего анализа является

получение общей информации о распределении плотности в сферическом приближении для случая $\lambda \neq 0$. Это означает, что далее будут исследоваться свойства функций \mathcal{R} и \mathcal{T} в нулевом приближении. В силу этого для упрощения записи индекс 0 у функций $\mathcal{S}_0(\chi)$, $\mathcal{R}_0(\chi)$ и $\mathcal{T}_0(\chi)$ будет опускаться.

Как хорошо известно [1,3], уравнения LEm имеют несколько точных решений. Одно из них соответствует показателю политропы n = 1, что эквивалентно $\gamma = 2$. Для этого случая уравнение (65) принимает следующий вид:

$$\frac{d^2}{d\chi^2}\mathcal{Z} + \mathcal{Z} + \chi\lambda = 0.$$

Здесь введено обозначение $\mathcal{Z} = \chi \mathcal{T}$. Это линейное уравнение имеет решение

$$\mathcal{Z} = C_1 \sin(\chi) + C_2 \cos(\chi) - \chi \lambda.$$

Удовлетворяя граничным условиям, находим $C_2 = 0, C_1 - \lambda = 1.$ В результате решение для \mathcal{T} примет вид

$$\mathcal{T}(\chi) = (1+\lambda)\frac{1}{\chi}\sin(\chi) - \lambda.$$
 (69)

Отсюда видно, что при $\chi \to \infty \mathcal{T}(\chi) \to -\lambda$. В случае $\lambda > 0$, предельное значение плотности оказывается отрицательным, что означает, что коэффициент температуры $\mathcal{T}(\chi)$ и $\mathcal{R}(\chi)$ обращаются в некоторой точке в нуль. Обращение плотности в нуль при некотором значении χ_0 трактуется в теории LEm как существование его конечного радиуса r_0 , который в данной теории будет зависеть от времени: $r_0 = a(t)\chi_0$.

В случае $\lambda < 0$ предельное значение плотности на бесконечности оказывается положительным и почти постоянным, т.е. при удалении от центра системы $\mathcal{T}(\mathcal{R})$ осциллирует, но приближается к постоянной величине \mathcal{T}_{∞} . Анализируя (69), устанавливаем, что существует такой диапазон отрицательных значений λ : $\lambda_{cr} \leq \lambda < 0$, в котором $\mathcal{T}(\chi)$ принимает отрицательные значения, хотя при $\chi \to \infty \mathcal{T}(\chi)$ стремится к положительному значению. Это аналогично моделям с положительными λ в классической модели LEm. В отличие от этого при $\lambda < \lambda_{cr}$ коэффициент температуры $\mathcal{T}(\chi)$ оказывается всюду положительной величиной. Для модели с n = 1 величину λ_{cr} можно найти из соотношения $\lambda_{cr} = \sin(z_0)/(z_0 - \sin(z_0))$, где z_0 — минимальное положительное решение уравнения: z = tg(z), которое эквивалентно уравнениям на экстремумы функции $\mathcal{T}(z)$ (69). Численно находим $\lambda_{cr} \simeq -0.1784650236.$



Рис. 3. Коэффициент температуры $\mathcal{T}(\chi)$ для n = 1 и $\lambda > 0$: $\lambda = 0 (0) \ \lambda = 0.5 (1)$, 1.0 (2), 2.0 (3), 4.0 (4), 8.0 (5), 16.0 (6)



Рис. 4. Коэффициент температуры $\mathcal{T}(\chi)$ для $\lambda < 0$: $\lambda = 0$ (0), -0.1784650236 (1), -0.25 (2), -0.5 (3), -0.75 (4), -1.0 (5), -1.25 (6), -1.5 (7), -1.75 (8), -2.0 (9)

Еще одной особенностью решения (69) является то, что при $\lambda = -1$ функция $\mathcal{T}(\chi)$ всюду оказывается равной 1. Такое решение соответствует однородному пространственному распределению температуры, плотности и давления в газе, что характерно космологическим моделям.

На рис. 3 представлены кривые коэффициента температуры $\mathcal{T}(\chi)$ для положительных значений λ и n = 1. Точками показана кривая, соответствующая классической теории Лейна–Эмдена с $\lambda = 0$. Из графиков видно, что с увеличением λ радиус сферы, на которой температура, плотность и давление обращаются в нуль (т.е., по определению, радиус звезды), уменьшается.

На рис. 4 изображены кривые $\mathcal{T}(\chi)$ для $\lambda < 0$. Как и на рис. 3 точками обозначена кривая, соответствующая $\lambda = 0$. Пунктиром — кривая, соответствующая значению $\lambda = -0.1784650236$, при котором кривая в одной точке касается оси абсцисс.

Заметим, что точные решения для модели LEm, как и для mLEm можно также найти при $\gamma = \infty$ (n = 0) (несжимаемая жидкость) и $\gamma = 6/5$ (n = 5)



Рис. 5. Коэффициент температуры $\mathcal{T}(\chi)$ для $\lambda = 0.25$: n = 1 (1), 1.5 (2), 2.0 (3), 3.0 (4), 5.0 (5)

[3].Bogoyavlensky1980

12. МОДЕЛИ С $n \neq 1$ ДЛЯ $\lambda > 0$

Рассмотрим теперь характерные особенности моделей с $n \neq 1$ для случая положительных значений параметра динамического равновесия: $\lambda > 0$. В качестве примера рассмотрим модель одноатомного газа с $\gamma = 5/3$ и n = 3/2. Как и в случае точного решения, рассмотренного выше, при $\lambda > 0$ поведение параметров среды подобно поведению этих параметров в соответствующих моделях LEm с $\lambda = 0$.

Для того, чтобы показать это, представим уравнение (65) в виде

$$\frac{d^2}{d\chi^2}\mathcal{T} + \frac{2}{\chi}\frac{d}{d\chi}\mathcal{T} + \mathcal{T}^n + \lambda = 0.$$
(70)

Отсюда видно, что при стремлении производных $\mathcal{T}''(\chi)$ и $\mathcal{T}'(\chi)$ на бесконечности к нулю, имеем $\mathcal{T}^n \to -\lambda < 0$. Однако последнее для вещественных решений невозможно, если $\lambda > 0$ и показатель политропы $n = (\gamma_0 - 1)^{-1}$ отличается от нечетного целого числа. Это означает, что для граничного условия $\mathcal{T}(0) = 1$ вещественное решение в случае $\lambda > 0$ может существовать на некотором отрезке вблизи нуля и обращается в нуль в некоторой точке $\chi_0: \mathcal{T}(\chi_0) = 0$. Для случая нечетных n будут существовать решения и на некоторых других интервалах χ , как это имеет место для n = 1 ($\gamma = 2$).

Для иллюстрации такого поведения на рис. 5 приведены графики $\mathcal{T}(\chi)$ для нескольких значений n при $\lambda = 0.25$.

На рис. 6 приведены графики $\mathcal{T}(\chi)$ для набора положительных значений параметра $\lambda \geq 0$ для показателя адиабаты одноатомного газа с $\gamma = 5/3$ и n = 3/2. Значение $\lambda = 0$ соответствует стандартной



Рис. 6. Коэффициент температуры $\mathcal{T}(\chi)$ для одноатомного газа с $n = 3/2(\gamma = 5/3)$ и $\lambda > 0$: $\lambda = 0$ (0), 0.5 (1), 1.0 (2), 1.5 (3), 2.0 (4), 4.0 (5), 8.0 (6)

модели LEm. Таким образом, модели с $\lambda > 0$ в целом похожи на модели LEm, но при одном и том же n имеют меньший автомодельный радиус звезды.

Сопоставляя приведенный анализ с анализом эволюции масштабного фактора, находим, что модели с $\lambda > 0$ не могут описывать какие-либо статические структуры. При $t \to \infty$ в соответствии с (58) эволюция обязательно переходит в режим расширения с постоянной скоростью

$$v_{\infty} = \lim_{t \to \infty} \dot{a} = a_0 y_{\infty} / t_0.$$

При достаточно малых значениях параметра энергии E эта асимптотическая скорость может быть достаточно маленькой, чтобы имелась возможность сопоставить ее реальному автомодельному расширению звезд. Однако наличие отрицательных значений плотности и температуры при значениях $\chi > \chi_0$ делает эти модели менее пригодными для сопоставления с реальными данными, чем модели с $\lambda < 0$.

13. МОДЕЛИ С $n \neq 1$ И $\lambda \leq 0$

В отличие от моделей с $\lambda > 0$ модели с отрицательными значениями этого параметра, как и в случае точного решения с n = 1, демонстрируют иное асимптотическое поведение $\mathcal{T}(\chi)$ при $\chi \to \infty$. Важным является то, что при $\chi \to \infty$ величина $\mathcal{T}(\chi)$ стремится к постоянному значению, которое определяется формулой

$$\lim_{\chi \to \infty} \mathcal{T}(\chi) = \mathcal{T}_{\infty} = |\lambda|^{1/n}.$$
 (71)

Это можно доказать, рассматривая приближенное асимптотическое решение уравнения (70) вида

$$\mathcal{T}(\chi) = \mathcal{T}_{\infty} + q(\chi),$$

где $|q(\chi)| << 1$. В результате уравнение для $q(\chi)$ линеаризуется. Если ввести вместо $q(\chi)$ функцию $w = \chi q(\chi)$, то для $w(\chi)$ уравнение приводится к следующему виду:

$$w'' + n\mathcal{T}_{\infty}^{n-1}w = 0.$$

Отсюда находим, что решение для $w(\chi)$ будет иметь вид

$$w = W_0 \sin(K\chi)$$

, соответственно, для $q(\chi)$ — вид

$$q = W_0 \frac{1}{\chi} \sin(K\chi). \tag{72}$$

Здесь

$$K = \sqrt{n\mathcal{T}_{\infty}^{n-1}} = \sqrt{n}|\lambda|^{(n-1)/(2n)}.$$

Параметр K определяет длину осцилляций плотности при $\chi \to \infty$. Значение W_0 находится из граничного условия $\mathcal{T}(0) = 1$:

$$W_0 = \frac{1 - \mathcal{T}_{\infty}}{K} = \frac{1 - |\lambda|^{1/n}}{K}.$$

Окончательно находим

$$\mathcal{T} \simeq q \mathcal{T}_{\infty} + (1 - \mathcal{T}_{\infty}) \frac{1}{K\chi} \sin(K\chi).$$
 (73)

В частности, для всех n > 1 при $\lambda = 1$ находим $W_0 = 0$, что эквивалентно отсутствию пространственных осцилляций. Этот факт подтверждают и численные расчеты, приведенные ниже. Полезно отметить для более точного понимания физического смысла параметра λ , что согласно (71), величина $|\lambda|$ совпадает со значением коэффициента плотности среды на бесконечности:

$$\mathcal{R}_{\infty} = \lim_{\xi \to \infty} \mathcal{R}(\xi).$$

По аналогии с точным решением при n = 1 можно приближенно рассчитать значение $\lambda_{cr}(n)$, при котором кривая $\mathcal{T}(\chi)$ касается единственный раз оси абсцисс. Условием этого является обращение $\mathcal{T}(\chi)$ из (73) в нуль и обращение в нуль производной $\mathcal{T}'(\chi)$ в этой же точке. Эти два условия имеют вид

$$\mathcal{T}(\chi_0) = \mathcal{T}_{\infty} + (1 - \mathcal{T}_{\infty}) \frac{\sin(K\chi_0)}{K\chi_0} = 0,$$

$$\mathcal{T}'(\chi_0) = \frac{W_0 \cos(K\chi_0)}{K\chi_0^2} \Big(K\chi_0 - \operatorname{tg}(K\chi_0) \Big) = 0.$$

Второе уравнение этой системы,

 $\operatorname{tg}(K\chi_0) = K\chi_0,$



Рис. 7. Коэффициент температуры $\mathcal{T}(\chi)$ для одноатомного газа с $n = 3/2(\gamma = 5/3)$ и $\lambda > 0$: $\lambda = 0$ (0), -0.085 (1), -0.2 (2), -0.4 (3), -0.7 (4), -1.0 (5), -1.5 (6), -2.0 (7), -2.5 (8)

решается независимо. Минимальный положительный корень этого уравнения равен

$$K\chi_0 \simeq 4.493409458.$$

Из первого уравнения находим

$$\mathcal{T}_{\infty} = |\lambda|^{1/n} = -\frac{\mathcal{T}_0}{1 - \mathcal{T}_0} \simeq 0.1784650236.$$

Отсюда

$$\lambda_{cr}(n) \simeq -\mathcal{T}_{\infty}^{n}.$$

В частности, для n = 3/2 ($\gamma = 5/3$) получаем

$$\lambda_{cr}(3/2) \simeq -0.07539276488.$$

Более точное значение, полученное численным подбором решения, дает оценку $\lambda_{cr}(3/2) \simeq -0.085$. Аналогично, для n = 3 ($\gamma = 4/3$) имеем оценку по приближенному решению $\lambda_{cr}(3) = -0.005684069$, а согласно численному решению $\lambda_{cr}(3) = -0.0065$.

На рис. 7 и 8 представлены графики изменения $\mathcal{T}(\chi)$ для различных значений λ для одноатомного газа с $\gamma = 5/3$ и ультрарелятивистского электронного газа с $\gamma = 4/3$. Кривые на этих графиках демонстрируют все основные особенности пространственного распределения температуры, рассмотренные выше. В частности, при $\lambda = 1$ в пространственном распределении $\mathcal{T}(\chi)$ отсутствуют осцилляции.

Как показывает анализ точного решения для n = 1, так и численного для n > 1, весь диапазон отрицательных значений параметра динамического равновесия λ можно разделить на три интервала, в которых поведение коэффициентов плотности, температуры и давления существенно отличаются. Первый интервал [$\lambda_{cr}(n), 0$] отличается тем, что в этом диапазоне значений λ коэффициент температуры \mathcal{T} конечное число раз обращается в нуль,



Рис. 8. Коэффициент температуры $\mathcal{T}(\chi)$ для ультрарелятивистского электронного газа с n = 3 ($\gamma = 4/3$) и $\lambda > 0$: $\lambda 0$ (0), -0.0065 (1), -0.2 (2), -0.4 (3), -0.7 (4), -1.0 (5), -1.5 (6), -2.0 (7), -2.5 (8)

что аналогично поведению температуры для классических моделей LEm с $\lambda = 0$. Как и в классических моделях LEm участки с положительной плотностью перемежаются с участками, где вещественного решения не существует. Однако в отличие от моделей LEm в пределе при $\chi \to \infty$ значение коэффициента температуры стремится к положительному значению q_{∞} .

Второй открытый интервал $(-1, \lambda_{cr}(n))$ характеризуется тем, что температура нигде не обращается в нуль и, совершая осцилляции с волновым числом $K(n, \lambda)$, стремится к q_{∞} . Для этого интервала важным является то, что колебания температуры нигде не превышают значения 1. В этом отношении модели из этого диапазона значений λ подобны классическим моделям LEm. Поскольку для этих моделей положительные решения для плотности и температуры существуют всюду, то такую модель можно рассматривать как модель политропной звезды с пространственными осцилляциями температуры и плотности, затухающими вдали от звезды.

Третий интервал $(-\infty, -1)$ соответствует моделям с почти однородным при $\lambda < -1$ и однородным при $\lambda = -1$ пространственным распределением плотности и температуры. Такие модели можно использовать для описания космологического расширения в классическом приближении. Пространственные осцилляции \mathcal{T} , соответствующие (73), можно при этом сопоставить известным реально наблюдаемым пространственным космологическим осцилляциям температуры [29]. Такие осцилляции обнаруживают в форме акустического пика в спектре флуктуаций температуры.

Важной особенностью построенных решений, которая воспроизводится во всех моделях с $\lambda < 0$, является поведение коэффициентов температуры и плотности при $\chi \to \infty$. Из соотношения (71) следует, что величина $\mathcal{R}_{\infty} = |\lambda|$ определяет плотность газа

$$\rho_{\infty} = M_0 a^{-2} b^{-1} \mathcal{R}_{\infty} = M_0 a^{-2} b^{-1} |\lambda|$$

на бесконечности. Это означает, что модели mLEm, основанные на уравнении (60), как и модели LEm с $\lambda = 0$, адекватно описывают распределение плотности лишь на ограниченном расстоянии от центра звезды. В моделях LEm ограничиваются расстояниями, на которых плотность остается вещественной и не отрицательной. В рассматриваемых в данной работе моделях mLEm с $\lambda < 0$ также приходится ограничиваться конечными расстояниями от центра звезды. Если считать, что звезда является единственным объектом в пространстве, то на больших расстояниях от нее плотность должна убывать достаточно быстро так, чтобы общая масса газа была бы конечной величиной. В реальности звезды находятся в некотором окружении. Поэтому плотность среды на большом удалении от звезд не стремится к нулю. Формально это означает, что на определенном расстоянии от звезды должна возникать ударная волна, соответствующая переходному процессу от плотности газа, связанного со звездой, к плотности межзвездной среды. Как хорошо известно, такие волны наблюдаются в реальности. При этом следует подчеркнуть, что при сферически симметричном распределении плотности, поле тяготения, порождаемое газом вне некоторой сферы, окружающей звезду, не оказывает влияния на процессы внутри этой сферы. Поэтому формальное ограничение модели конечными расстояниями не меняет физической сути построений для рассматриваемых моделей.

14. МОДЕЛИ ДИНАМИЧЕСКОГО РАВНОВЕСИЯ ОСЦИЛЛИРУЮЩИХ ЗВЕЗД

Собирая полученную информацию о свойствах рассмотренных моделей, можно предположить, что наиболее адекватными по отношению к реальному строению звезд и их эволюции являются модели с λ в диапазоне значений $(-1, \lambda_{cr})$. Действительно, поскольку для моделей из этого диапазона λ плотность и температура газа всюду положительны, то модель может, хотя бы на качественном уровне, быть сопоставлена реальным данным без потери физического смысла на всех расстояниях от условной поверхности звезды. В классических моделях LEm всегда существуют области пространства, в которых отсутствуют вещественные положительные решения для температуры и плотности.



Рис. 9. Коэффициент температуры $\mathcal{T}(\chi)$ для одноатомного газа с n = 3/2 ($\gamma = 5/3$): $\lambda = 0$ — точки, $\lambda = \lambda_{cr} = -0.0851$ — штриховая, $\lambda = -0.2 < \lambda_{cr}$ — сплошная линия, χ_0 — первый минимум, χ_1 — первый максимум

Если отложить пока вопрос о теплопередаче в исследуемой структуре, то более точный отбор моделей по величине λ может осуществляться с помощью двух основных параметров пространственной структуры. Первый параметр — это значение температуры газа в первом минимуме с автомодельной координатой χ_0 , отсчитывая от $\chi = 0$ (см. рис. 9), который в структуре нормальных звезд можно отождествить с условным радиусом звезды, т.е. с минимумом температуры в фотосфере. Второй это значение \mathcal{T} в первом после минимума в точке χ_0 максимуме температуры. Важность этих параметров состоит в том, что их можно просто соотнести с известными данными о строении Солнца, исходя из стандартной его модели.

На рис. 9 представлены кривые коэффициента температуры $\mathcal{T}(\chi)$, соответствующие нулевому значению $\lambda = 0$ (точки) и $\lambda \simeq \lambda_{cr}$ (сплошная кривая) для одноатомного газа n = 3/2. Для этой кривой указаны положения первого минимума χ_0 и первого максимума χ_1 коэффициента температуры. Как отмечалось выше, первый минимум температуры может быть сопоставлен минимуму в фотосфере звезды. Для Солнца оценка равновесной температуры в центре соответствует примерно $15 \cdot 10^6 K$, а минимальная температура в фотосфере — 4800K [8, 30]. Таким образом, минимум температуры примерно в 3000 раз меньше температуры в центре Солнца. Отсюда следует, что реальное значение параметра λ для Солнца и, по всей видимости, для звезд других типов, должно быть близко к критическому значению λ_{cr} . Для одноатомного газа в модели с постоянной энтропией $\lambda_{cr} \simeq -0.085$. Это значение автоматически определяет температуру газа вдали от звезды: $\mathcal{T}_{\infty} \simeq = 0.1934$ (штриховая). Если принимать, что в центре звезды температура $15 \cdot 10^6 K$, то температура вдали от звезды будет примерно $T_{\infty} \simeq 15 \cdot 10^6 \mathcal{T}_{\infty} \simeq 3 \cdot 10^6$. Очевидно, что это завышенная оценка связана с тем, что при ее получении не учитывалась теплопередача в газе, потеря тепла за счет излучения и, возможно, влияние магнитного поля.

Вторым важным элементом автомодельной структуры является немонотонный характер изменения температуры и плотности с расстоянием от центра поля. Наличие первого максимума χ_1 можно отождествить с наблюдаемым реально максимумом температуры в короне Солнца [8, 30]. Если отождествить положение первого минимума температуры с радиусом звезды, то следующий максимум находится на расстоянии чуть меньше радиуса звезды от ее поверхности. Величина $\mathcal{T}_{max} = \mathcal{T}(\chi_1)$ в максимуме χ_1 для кривой с критическим значением λ равна $\mathcal{T}_{max} \simeq 0.3$. Соответственно для Солнца находим $T_{max} = 15 \cdot 10^6 \mathcal{T}_{max} \simeq 5 \cdot 10^6$. Это тоже завышенная оценка, что также по всей видимости, связано с неучтенной теплопередачей.

Вместе с тем можно констатировать, что данная модель дает качественное объяснение росту температуры в короне Солнца. Осциллирующий характер пространственного распределения температуры и плотности в данной модели связан с динамическиим влиянием ускоренного течения газа вне звезды. В сочетании с тем, что при таких значениях $\lambda < 0$ и E < 0 в (54) структура переходит в режим осцилляций во времени, рассмотренные модели представляются наиболее адекватными для сопоставления реальной структуре Солнца. Некоторые недостатки модели можно устранить с помощью учета теплопередачи в среде.

15. РАДИАЛЬНЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ ЗВЕЗД

15.1. Параметры звездных осцилляций

Для более детального понимания свойств рассматриваемой модели рассмотрим особенности эволюции структуры звезд с $\lambda < \lambda_{cr}$ в режиме осцилляций. Для того чтобы связать параметры модели с реальными данными о звездах, в том числе, данными о Солнце, будем следовать следующим достаточно очевидным предположениям. Во-первых, положение первого минимума χ_0 в распределении температуры, как уже отмечалось, будем интерпретировать как автомодельный радиус звезды. Поэтому $\chi_0 = R_*/a_*$, где R_* — текущий радиус звезды, определяемый по минимуму температуры в фотосфере. Отсюда текущее значение масштабного фактора можно оценить следующим образом $a_* = R_*/\chi_0$. Вовторых, исходя из соотношения для плотности (22), можно оценить масштаб массы M_0 , зная плотность вещества звезды в ее центре. Из граничного условия в центре звезды $\mathcal{R}(0) = 1$ следует

$$M_0 = a_*^3 \beta \rho(0). \tag{74}$$

В результате имеем

$$\nu = \frac{4\pi G M_0}{3\beta} |\lambda_*| = \frac{4\pi G}{3} a_*^3 |\lambda_*| \rho(0).$$
(75)

Здесь λ_* — значение параметра динамического равновесия, соответствующего текущему состоянию звезды.

Рассмотрим звезды типа Солнца, осцилляции которых невелики, так что можно считать, что текущий масштабный фактор a_* мало отличается от масштабного фактора, соответствующего особой точке фазовой диаграммы (1), т.е. $a_* = a_0$, где $a_0 = \mu/|\nu|$. Из последнего соотношения можем вычислить параметр μ :

$$\mu = a_* |\nu|. \tag{76}$$

Эти соотношения позволяют вычислить значение периода осцилляций вблизи особой точки. В соответствии с (48) находим

$$P_0 = 2\pi \frac{\mu^{3/2}}{|\nu|^{3/2}} = \sqrt{\frac{3\pi\beta}{|\lambda_*|\rho(0)G}}.$$
 (77)

Эта формула показывает, что частота осцилляций звезды зависит от плотности в центре звезды $\rho(0)$, от значения параметра динамического равновесия $|\lambda_*|$ и от значения параметра анизотропии β , который для звезд с относительно малой скоростью вращения можно полагать равным 1: $\beta \simeq 1$. Формулу (77) можно сравнить с классической формулой периода пульсаций цефеид [9], которая имеет следующий вид:

$$P_c = \frac{1}{\sqrt{G\overline{\rho}}},\tag{78}$$

где $\overline{\rho}$ — средняя плотность вещества звезды. Сравнивая (77) с (78) находим, что эти формулы совпадают, если выполнено равенство

$$\overline{\rho} = \frac{1}{3\pi\beta} |\lambda_*| \rho(0). \tag{79}$$

Фактическое совпадение соотношения (77) с (78) при учете (79) означает, что полученные соотношения теории динамического равновесия почти сферических звезд могут служить нелинейной моделью теории звездных пульсаций, в том числе, цефеид. С этой точки зрения (79) можно рассматривать как огрубленную интерпретацию частоты пульсаций с точки зрения линейной теории.

15.2. Диаграмма период-светимость

Наиболее важной практической целью теории звездных пульсаций является вывод диаграммы период-светимость, который играет важнейшую роль в использовании цефеид в качестве маркеров астрономических расстояний. Светимость L по определению может быть вычислена как полный поток энергии излучения с поверхности звезды. Дифференциальный поток излучения вычисляется с помощью закона Стефана-Больцмана по формуле

$$F = \sigma_0 T^4(R_*) = \sigma_0 \Pi^4(t) \mathcal{T}^4(\chi_0)$$

Здесь σ_0 — постоянная Стефана-Больцмана. Соответственно, светимость может вычислена с помошью соотношения:

$$L = 4\pi\sigma_0 \Pi^4(t) \mathcal{T}^4(\chi 0) R_*^2 = 4\pi\sigma_0 \Pi^4(t) a^2(t) \mathcal{T}^4(\chi 0) \chi_0^2.$$

Согласно (44) имеем

$$\Pi = 2\pi G M_0 Q_1 a^{-1}(t).$$

Учитывая (37) находим

$$L = x^{-2}(t)\mathcal{L}_0, \tag{80}$$

где

$$\mathcal{L}_0 = 4\pi\sigma_0 \left(\frac{4\pi GM_0(\gamma-1)}{\gamma}\right)^4 a_0^{-2} \mathcal{T}^4(\chi 0).$$
 (81)

Для построения диаграммы период-светимость воспользуемся соотношением (80), записанным для максимального $x_{-}(E)$ и минимального $x_{+}(E)$ автомодельных радиусов звезд. В результате с учетом (55) имеем

$$L_{max} = \mathcal{L}_0 \left(1 + \sqrt{1 - 2|E|} \right)^2,$$
$$L_{min} = \mathcal{L}_0 \left(1 - \sqrt{1 - 2|E|} \right)^2.$$

Исключая из этих соотношений Е с помощью выражения (57), получаем формулы, которые по сути и являются диаграммами период-светимость

$$\frac{L_{max}}{\mathcal{L}_0} = \left(1 + \sqrt{1 - \left(\frac{P_E}{2\pi}\right)^{-2/3}}\right)^2,$$

$$\frac{L_{min}}{\mathcal{L}_0} = \left(1 - \sqrt{1 - \left(\frac{P_E}{2\pi}\right)^{-2/3}}\right)^2.$$
(82)



Модели динамического равновесия ...

Рис. 10. Зависимость $x(\tau)$ (а) и $y(\tau)$ (b), а также фазовые траектории звезды (с) для $\lambda_* = -0.085$ с начальными условиями: 1 - (y(0) = 0, x(0) = 0.6) -штриховая, 2 -(y(0) = 0, x(0) = 0.9) — сплошная

Эти соотношения универсальны и не зависят от типа звезды. Реальные диаграммы периодсветимость будут зависеть от двух параметров \mathcal{L}_0 и $t_0 = \mu^{3/2} / |\nu|^2$. В данной работе не ставилась цель провести сравнение реальных диаграмм периодсветимость с диаграммами, соответствующими (82). Эта задача требует привлечения большого набора данных по цефеидам. В данной работе приводятся лишь графики универсальных кривых, соответствующих (82), а также универсальных кривых $x(\tau)$ и $y(\tau)$, соответствующих модели (51).

Для наглядности характера осцилляций на рис. 10(a,b,c) представлены графики изменения безразмерного радиуса $x(\tau)$ (а) и безразмерной скорости $y(\tau)$ (b) изменения радиуса от безразмерного времени τ для $\lambda_* = -0.085$ и двух начальных условий.

Соответствующие кривые для относительных величин L_{max}/\mathcal{L}_0 и L_{min}/\mathcal{L}_0 представлены на рис. 11. Верхний график (а) соответствует светимости звезд в максимуме, a (b) — в минимуме в зависимости от периода осцилляций звезд с одними и теми же параметрами, но для различных значений энергетиче-



Рис. 11. Диаграмма период–светимость, соответствующая формулам (82)

ского параметра E.

Следует отметить, что полученное соотношение период-светимость (82) выражено в безразмерной форме. Поэтому его трудно сопоставлять с реальными эмпирическими диаграммами, полученными на основе реальных данных [9,11]. Тем не менее, общий вид диаграммы (82) в сравнении с реальными диаграммами указывает на их сходство. Это позволяет надеяться на возможность использования модели (51) для описания звездных осцилляций цефеид.

16. МОДЕЛИ С НЕОДНОРОДНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ЭНТРОПИИ

Рассмотренные модели с $\lambda \in (-1, \lambda_{cr})$, как это следует из предыдущего анализа, дают картину эволюции звезд, которая на качественном уровне может быть сопоставлена реальным астрофизическим данным. Вместе с тем, при попытках сопоставить числовые оценки с параметрами Солнца возникают определенные проблемы, хотя качественно выводы, основанные на представленной модели дают объяснение некоторым известным фактам, например, росту температуры в короне Солнца. Проводя оценку параметров модели с $\gamma = 5/3$ (n = 3/2) и однородным распределением энтропии с наблюдаемыми параметрами Солнца, можно убедиться, что они существенно отличаются друг от друга, либо в отношении строения, либо в отношении эволюции Солнца. Как показывает анализ, основной проблемой при сопоставлении с реальными данными является величина критического значения $\lambda_* = -0.085$ параметра

динамического равновесия. Эта величина оказывается по модулю слишком большой для того, чтобы параметры модели были сопоставимы параметрам строения и эволюции Солнца.

Естественным способом коррекции модели с целью получения более реалистичных значений параметров Солнца является включение в модель неоднородного распределения коэффициента энтропии $\mathcal{S}(\chi,\theta)$. В общем случае модели с неоднородным распределением энтропии следует исследовать с использованием уравнений переноса излучения в звездах и в межзвездной среде [2,3]. Можно показать, что при некоторых предположениях относительно коэффициента непрозрачности среды и коэффициента энерговыделения в среде уравнения теплопередачи можно привести к автомодельному виду. В этом случае одно из уравнений системы будет уравнение (59). Однако исследования такого рода удобнее проводить в отдельной работе. Тем не менее существует круг задач, в которых описание теплопередачи можно упростить и свести к задаче с некоторым заданным модельным распределением коэффициента энтропии $\mathcal{S}(\chi)$. Поскольку $\mathcal{S}(\chi)$ является функцией автомодельных переменных, то ее функциональный вид формально определяется распределением в начальный момент времени. В данной работе будет рассмотрена модельная функция $\mathcal{S}(\chi)$, зависящая от коэффициента плотности $\mathcal{R}(\chi)$ в соответствии с общим соотношением:

$$\mathcal{S} = \mathcal{H}_0(\chi) \mathcal{R}^{\delta}(\chi), \tag{83}$$

где $\mathcal{H}_0(\chi) > 0$ — безразмерная функция радиальной координаты, необходимая для более точной коррекции потока тепла в звезде, а δ — некоторая безразмерная вещественные постоянная.

Для первого этапа анализа, который реализуется далее, будем полагать $\mathcal{H}_0 = \text{const. B}$ этом случае величина \mathcal{H}_0 влияет лишь на масштаб радиальной координаты, поскольку может быть исключена из уравнения с помощью формальной замены: $\chi \to \chi' = \chi/\sqrt{\mathcal{H}_0}$. Это означает, что все вычисления можно проводить в предположении $\mathcal{H}_0 = 1$, а необходимые коррекции распределений в случае $\mathcal{H}_0 \neq 1$ можно сделать масштабированием радиальной координаты в полученном решении.

Наиболее важным обстоятельством, связанным с соотношением (83) при $\mathcal{H}_0 = \text{const}$ является то, что эта формула фактически возвращает формулу для давления в среде к баротропному виду, но с новым эффективным показателем адиабаты $\gamma' = \gamma + \delta$. С точки зрения термодинамики это означает, что процесс автомодельной эволюции звезды, соответствующий (83), является не адиабатическим, а политропным с показателем политропы

$$m = \frac{n}{1+n\delta}.$$
(84)

В случае адиабатической эволюции энтропия и количество тепла в слоях звезды не изменяются со временем. В случае же политропного режима энтропия среды изменяется и происходит перераспределение тепла, что и соответствует процессу теплопередачи. Этот процесс происходит так, что уравнение mLEm по форме не меняется, но меняется показатель политропы. В частности, это означает, что модифицированный показатель политропы в звездах типа Солнца может существенно отличаться от n = 3/2. То же самое относится и к звездам других типов.

Важность указанного вывода о политропном характере автомодельной эволюции, вытекающего из соотношения (83), требует некоторых замечаний относительно применимости этого соотношения для описания реальных условий в звездах. С формальной точки зрения в приближении радиального распределения параметров среды зависимость $\mathcal{S}(\chi)$ от χ почти всегда эквивалентна некоторой зависимости этой же функции от $\mathcal{R}(\chi)$. Конкретный же выбор зависимости энтропии от плотности, соответствующий (83), может быть обоснован тем, что в теории строения и эволюции звезд [2,3] используются предположения о том, что энерговыделение в ядрах звезд, а также коэффициенты непрозрачности вещества являются степенными функциями температуры и плотности. С этой точки зрения соотношение (83) выглядит достаточно адекватным. Тем не менее, доказательство того, что модели, использующие (83), соответствуют реальной структуре и эволюции звезд следует подтвердить сопоставлением расчетов в рамках рассматриваемых моделей с реальными данными. Для этого необходимо установить наиболее подходящую величину параметра δ , параметров вращения µ и динамического равновесия λ , соответствующие тем или иным типам звезд. В данной работе такой анализ будет проведен в сопоставлении с данными о строении Солнца.

Оптимальный выбор параметров модели для нормальных звезд типа Солнца с $\gamma = 5/3$, n = 3/2проводился перебором величин δ и λ в диапазоне их значений, которые позволяли получить решения для распределений температуры и плотности, а также эволюционных траекторий звезды на фазовой диаграмме, которые наиболее точно согласовывались с реальными данными для Солнца. Из-за ограниченности объема статьи будут приведены результаты численных вычислений лишь для одного значения параметра δ , который дает наиболее подходящие значения параметров модели Солнца в сопоставлении с реальными данными.

Численный анализ проводился в с помощью средств Maple. Для численных расчетов использовалась процедура dsolve с применением подпрограммы dverk78. Для численного анализа автомодельного строения звезд уравнение (59) удобно переписать в следующем виде:

$$\frac{d}{d\chi}\mathcal{F} + \frac{2}{\chi}\mathcal{F} + \mathcal{Q}^n + \lambda = 0, \qquad (85)$$

где $Q = \mathcal{R}^{\gamma-1}$ и $\mathcal{F} = SQ' + S'Q/(n+1)$. В этом случае коэффициент температуры $\mathcal{T}(\chi)$ будет вычисляться по формуле: $\mathcal{T} = \mathcal{S}(\chi)Q(\chi)$. Можно видеть, что в случае $\mathcal{S}(\chi) = 1$ уравнение (85) переходит в уравнения (70) модели mLEm, а $Q(\chi)$ в $\mathcal{T}(\chi)$, при том же выборе параметров обезразмеривания переменных. Поскольку в уравнение (85) входит функция $Q(\chi)$, то соотношение (83) удобно переписать в виде

$$\mathcal{S} = \mathcal{H}_0 \mathcal{Q}^k(\chi),$$

где $k = n\delta$. В дальнейшем именно этот параметр будет использоваться для идентификации различных типов моделей. Следует отметить, что можно было бы решать уравнение (70). Как уже отмечалось, в случае $\mathcal{H}_0 = 1$ решения уравнений (85) и (70) связаны некоторым масштабным преобразованием координат $\chi' = \chi/d$, где масштаб d зависит от n, δ . Чтобы не производить это дополнительное преобразование координат, численно решалось непосредственно уравнение (85).

В качестве примера на рис. 10 для иллюстрации результатов численных расчетов представлены распределения коэффициентов температуры для нескольких значений параметра k при одном и том же значении параметра $\lambda = -0.0015$.

17. ОБЩАЯ ПРОЦЕДУРА ОЦЕНИВАНИЯ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ

Наиболее важными параметрами, которые полностью определяют пространственное автомодельное распределение плотности, температуры и энтропии, являются параметры $k, f(\mu)$ и $\lambda(\nu)$. Параметр f определяется скоростью зонального потока на экваторе звезды, но при его оценке имеется неопределенность, связанная с параметром h_0 . Наличие не нулевого слагаемого с h_0 приводит к тому, что угловая скорость потока вблизи оси вращения стремится к бесконечности. Кроме этого, как следует из



Рис. 12. Коэффициент температуры $\mathcal{T}(\chi)$ для одноатомного газа с n = 3/2 ($\gamma = 5/3$) для $\lambda = -0.0015$: k = -4/9 (1), -5/9 (2), -6/9 (3), -7/9 (4), -8/9 (5)

(42), при $h_0 \neq 0$ связано с логарифмической особенностью в потенциале на оси вращения. Это означает, что вблизи оси вращения модель должна быть уточнена в дальнейшем. Тем не менее, в дальнейшем именно выбор значения h_0 будет играть важную роль в подгонке модели под реальные данные.

Выбор параметров k и λ также заранее не определен и может приводить к различным вариантам моделей звезды и ее эволюции. В частности, в зависимости от выбранных значений k и λ модель может соответствовать фазовой траектории звезды на диаграмме 1 с поступательным изменением ее радиуса в случае $E \ge 0$ или фазовой траектории в зоне осцилляций с $-0/5 \le E < 0$.

Исходными данными, которые позволяют строить оценку параметров модели, соответствующей конкретной звезде, являются видимый радиус звезды, температура в фотосфере и скорость зонального потока на экваторе. Для оценки параметра модели M_0 необходимо иметь оценку плотности массы в центре звезды. Вместе с тем оценка плотности в центре звезды сама зависит от типа модели. Тем не менее для простоты получения оценки в данной работе для Солнца будет использована классическая оценка $\rho(0) \simeq 150[\Gamma/cm^3]$, соответствующая стандартной модели Солнца. То же самое касается и температуры в центре Солнца $T_{\odot} \simeq 15 \cdot 10^6 K$ [8].

Общая процедура построения модели конкретной звезды сводится к выбору определенных значений k и $\lambda < \lambda_{cr}$ и вычислению соответствующей кривой распределения коэффициента температуры внутри звезды и за ее пределами. При заданном значении k подбором λ можно установить приближенно значение λ_{cr} , которое, как отмечалось ранее, соответствует условию касания кривых распределения \mathcal{T} и \mathcal{R} оси абсцисс. В точке касания плотность массы и температура для $\lambda = \lambda_{cr}$ обращаются в нуль. Далее, конкретные значения λ_* должны выбираться в интервале $-1 < \lambda < \lambda_{cr}$. Выбор величины λ_* может осуществляться уже из прямого сравнения результатов численного счета с реальными данными. Однако эту процедуру подбора λ_* можно упростить, заменив ее процедурой подбора параметра h_0 . Это можно сделать, исходя из предположения, что строится модель звезды, осцилляции которой происходят вблизи положения равновесия в особой точке с безразмерными координатами $x_* \simeq 1$, $y_* \simeq 0$.

Анализ полученных численным способом кривых распределения \mathcal{T} сводится к вычислению положения первого минимума и следующего за ним максимума коэффициента температуры. Как уже отмечалось, первый минимум температуры и плотности по определению считается условной поверхностью звезды и связывается с минимумом температуры и плотности в ее фотосфере. По форме кривой $\mathcal{T} = \mathcal{T}(\chi)$ определяется положение первого минимума χ_0 и текущего значения масштабного фактора $a_* = R_* / \chi_0$. Это позволяет оценить значение M_0 по формуле (74). В результате по формуле (75) для выбранного значения λ_* можно оценить значение параметра ν . Параметр μ должен вычисляться по формуле (48), исходя из значения параметра вращения f.

Параметр вращения f можно оценить по формуле (41), если известна скорость зонального потока v_0 на экваторе звезды. Формулу (41) с учетом (98) полезно записать в виде

$$v = \frac{1}{a}\sqrt{f\xi^2 + h_0}.$$
 (86)

В эту формулу входит неопределенный параметр h_0 , который описывает дифференциальное вращение звезды, но не влияет на другие оценки параметров звезды. Для того чтобы скорость зонального потока $v(\xi, \zeta, t)$ принимала всюду только вещественные значения, достаточно, чтобы $h_0 \ge 0$. Удобно представить оценку $f = 3\mu/2$ в следующем виде:

$$f = \frac{v_0^2 a_*^2 - h_0}{\xi_0^2} = \frac{v_0^2 a_*^2}{\xi_0^2} \varepsilon,$$
(87)

где $\varepsilon = 1 - h_0 \chi_0^2 / (v_0 R_*)^2$ — безразмерный параметр модели, заменяющий h_0 . В результате для μ имеем соотношение:

$$\mu = 2f/3 = \frac{2v_0^2 R_*^2}{3\xi_0^4}\varepsilon.$$
(88)

Важным параметром для оценивания положения звезды на диаграмме рис. 1 является величина безразмерной координаты $x_* = a_*/a_0$, где a_0 — значение масштабного фактора в особой точке фазовой диаграммы, которая определяется из соотношения (76)

$$a_0 = \mu/|\nu|. \tag{89}$$

Эта величина указывает характерный масштабный фактор (размер объекта), который звезда должна иметь, чтобы ее осцилляции совершались на фазовой диаграмме вблизи особой точки. Отсюда находим реальную безразмерную координату Солнца на фазовой диаграмме:

$$x_* = \frac{a_*}{a_0} = \frac{2\pi G R_*^2 \rho(0)}{v_0^2 \varepsilon} |\lambda_*|.$$
(90)

Вторая координата y_* на фазовой диаграмме 1 для данной звезды должна оцениваться из (54), что дает следующее соотношение:

$$y_* = \sqrt{2x_*^{-1} - x_*^{-2} + 2E_*},\tag{91}$$

где E_* — энергетический параметр текущей фазовой траектории звезды. Значение параметра E_* можно оценить, если известна реальная скорость изменения радиуса звезды

$$c_* = \dot{a} = t_0 y_* / a_0 \tag{92}$$

в текущий момент времени.

Как следует из приведенных формул, основными параметрами, которые определяют текущую фазовую траекторию звезды являются k, λ_* , ε . Параметры γ и n определяются свойствами вещества звезды и для нормальных звезд равны, соответственно, $\gamma = 5/3$ и n = 3/2. Параметры же k, λ_* , ε приходится оценивать с помощью сравнения свойств вычисленных модельных распределений температуры и плотности с аналогичными свойствами реальных распределений. Однако один из этих параметров можно исключить из анализа, учитывая предполагаемое положение звезды (далее Солнца) вблизи особой точки x = 1, y = 0 на фазовой диаграмме.

С точки зрения данной модели наличие слабых осцилляций звезды означает, что текущее значение ее безразмерной координаты x_* должно почти точно совпадать со значением 1: $x_* \simeq 1$, а величина энергетического параметра E не должна сильно отличаться от $E_0 = -0.5$. Выбор x_* и E_* должен определяться наблюдаемым размахом колебаний звезды Δ_E . Исходя из этих рассуждений, для звезд в состоянии, близком к статическому равновесию параметр λ_* можно выбрать исходя из формулы (90)

$$\lambda_* \simeq -\frac{x_* v_0^2}{2\pi G R_*^2 \rho(0)} \varepsilon.$$
(93)

Полагая $x_* \simeq 1$, из этого соотношения можно найти значение λ_* , которое должно обеспечивать положение звезды вблизи особой точки фазовой диаграммы.

Полученная таким способом оценка λ_* явно не зависит от значения параметров n и k. Тем не менее такая зависимость существует. Оценка (93) при заданных n и k может оказаться больше, чем λ_{cr} . В этом случае, как это уже обсуждалось ранее, нарушается принцип существования физически значимых значений плотности и температуры при всех значениях радиальной координаты. Таким образом, осцилляционный режим для данной конкретной звезды возможен только при некоторых подходящих значениях n и k.

Подходящие величины n и k можно определить прямыми вычислениями для $\varepsilon = 1$. Поскольку по определению $0 \le \varepsilon \le 1$, то при $\varepsilon = 1$ находится минимальная величина λ_* , соответствующая выбранным значениям n и k. После этого величину ε можно уменьшать в диапазоне $\varepsilon_{cr} < \varepsilon < 1$, где ε_{cr} соответствует значению $\lambda_* = \lambda_{cr}$. Выбор конкретной величины ε может осуществляться, исходя из сопоставления величин, полученных численным способом, с величинами, соответствующими конкретным параметрам структуры и эволюции звезды. Далее при построении модели Солнца в качестве критерия выбора параметра ε выбираются величина \mathcal{T}_{min} температуры в минимуме, лежащем в фотосфере, и период осцилляций РЕ. В качестве вторичного признака используется величина \mathcal{T}_{max} в следующим за ним максимуме.

18. ОЦЕНКА ПОЛОЖЕНИЯ СОЛНЦА НА ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЕ

Рассмотрим теперь оценки, которые можно получить в применении развитой модели к Солнцу. Для Солнца хорошо известны основные физические параметры, необходимые для получения относительно надежных оценок параметров модели. Стандартным предположением является то, что Солнце относится к нормальным звездам, состоящим из одноатомного газа с $\gamma = 5/3$ и n = 3/2. Также для Солнца известны значение видимого радиуса $R_{\odot} \simeq 7 \cdot 10^{10}$ [см], значение скорости зонального потока на экваторе $v_{\odot} \simeq 2 \cdot 10^5$ [см/с] и плотность в центре, оцениваемая величиной $\rho_{\odot} \simeq 150$ [г/см³] [8].

Как показывает численный анализ, наиболее подходящее значение параметра k равно k = -0.7, что соответствует эффективным значениям показа-

теля адиабаты $\gamma' = \gamma + k/n = 6/5$ и показателя политропы n' = 5. Этот вывод сделан, исходя из двух основных показателей. Первый состоит в том, чтобы для выбранного k значение λ_* , вычисленное в соответствии с (93) для $x_*\simeq 1,\; \varepsilon=1,$ не оказалось больше λ_{cr} . Вторым показателем является требование, чтобы при изменении ε в диапазоне [ε_{cr} , 1], температура \mathcal{T}_{min} в первом минимуме и период осцилляций могли быть согласованы с реальными данными. Например, уже при k = -0.678 и $\varepsilon = 1$ величина λ_* (93) оказывается большим, чем λ_{cr} . При k < -0.7 температура T_{min} и контраст между T_{min} и T_{max} становятся слишком маленькими по сравнению с реальными данными. Только при $k \simeq -0.7$ удается согласовать между собой все основные критерии выбора модели, указанные в предыдущем разделе.

Следует отметить, что в классической модели LEm ($\lambda = 0$) значение $\gamma = 6/5$ соответствует граничному значению показателя адиабаты, при котором распределение плотности газа оказывается монотонно убывающим с ростом χ , что эквивалентно отсутствию видимого радиуса звезды [3, 4]. Обычно это интерпретируется как невозможность существования устойчивого статического равновесия такой конфигурации. В рассматриваемой модели для $\lambda < \lambda_{cr}$ минимумы имеются, что соответствует не статическому, а динамическому равновесию звезды.

18.1. Модели для различных значений ε пр
иk=-0.7

Для выбора подходящей модели проводились вычисления кривых распределения коэффициентов температуры \mathcal{T} , плотности \mathcal{R} и энтропии \mathcal{S} для значений ε в диапазоне от 1 и до величины $\varepsilon = 1.0 \cdot 10^{-5}$. Интервал автомодельной радиальной координаты χ , на котором вычислялись параметры среды, содержал первый минимум и следующий за ним максимум \mathcal{T} . Это позволяло оценить по графикам кривых с достаточной точностью значения χ_0 , \mathcal{T}_{min} , \mathcal{T}_{max} . На рис. 13 представлены графики распределения коэффициента энтропии и температуры для k = -0.7и $\varepsilon = 1$.

Рисунок 13(a, b, c) демонстрируют общее распределение lg(S)(a), lg(T)(b) и lg(R)(c). На рис. 14(a, b) представлены участки общего распределения коэффициента температуры, которые иллюстрируют положения первого минимума χ_0 и следующего за ним максимума χ_1 . Значения T в этих точках, как и раньше, обозначаются далее, соответственно, $T_{min} = T(\chi_0)$ и $T_{max} = T(\chi_1)$. Для данных значений k и ε получаем $\lambda_* \simeq -1.297990 \cdot 10^{-7}$, а также сле-



Рис. 13. Коэффициенты энтропии $\lg(S)$ (a), температуры $\lg(\mathcal{T})$ (b) и плотности $\lg(\mathcal{R})$ для одноатомного газа с $n = 3/2 \ (\gamma = 5/3)$ для k = -0.7 и $\varepsilon = 1$



Рис. 14. Коэффициент температуры $\mathcal{T}(\chi)$ для одноатомного газа с $n=3/2~(\gamma=5/3)$ для k-0.7 и $\varepsilon=1$ в двух диапазонах χ вблизи нуля

дующие оценки $\chi_0 \simeq 105, T_{min} \simeq 3 \cdot 10^{-3}, \chi_1 \simeq 400$ и $T_{max} \simeq 0.12$.

На рис. 15(a, b, c, d) представлены результаты вычисления $P_E(a)$, $\mathcal{T}_{min}(b)$, $\mathcal{T}_{max}(c)$ и $\chi_0(d)$ зависимости от ε в двойном логарифмическом масштабе. Каждая точка соответствует модели с определенным значением ε . На диаграммах $P_E(a)$, $\mathcal{T}_{min}(b)$ серым цветом выделены области значений периодов осцилляций и температуры, наиболее согласующиеся с данными о Солнце. Эта же область выделена и на диаграмме для и $\mathcal{T}_{max}(c)$. Как видно из диаграмм, результаты численного счета для всех параметров хорошо укладываются на прямые, соответствующие степенной зависимости от ε . Соответствующие зависимости аппроксимируются следующим



Рис. 15. Зависимость параметров модели от значений параметра ε : P(E)-а, \mathcal{T}_{min} -b, \mathcal{T}_{max} -с, χ_0 -d.

образом:

$$\begin{split} P_E(\varepsilon) &\simeq P_E(1) \cdot \varepsilon^{-1/2} = 0.085 \cdot \varepsilon^{-1/2} \text{ [год]}, \\ T_{min}(\varepsilon) &\simeq T_{min}(1) \cdot \varepsilon^{1/3} = 1.14 \cdot 10^5 \cdot \varepsilon^{1/3} \text{ [K]}, \\ T_{max}(\varepsilon) &\simeq T_{max}(1) \cdot \varepsilon^{1/5} = 7.49 \cdot 10^5 \cdot \varepsilon^{1/5} \text{ [K]}, \\ \chi_0(\varepsilon) &\simeq \chi_0(1) \cdot \varepsilon^{-1/3} = 530 \cdot \varepsilon^{-1/3}. \end{split}$$

Как следует из представленных диаграмм, при $\varepsilon=0.6\cdot 10^{-4}$ период радиально-зональных осцилляций Солнца совпадает с наблюдаемым периодом солнечной активности, равным примерно 11 лет. При этом температура в минимуме фотосферы оказывается почти точно совпадающей со значением $T_{\odot}\simeq 4800[K]$, которое дается стандартной моделью

Солнца [8]. Существенным отличием от реальных данных является лишь значение T_{max} .

18.2. Пространственное распределение температуры для оптимального выбора параметров

На рис. 16 представлены $lg(\mathcal{S})(a), lg(\mathcal{T})(b)$ и $lg(\mathcal{R})(c)$ для k = -0.7 и $\varepsilon = 0.6 \cdot 10^{-4}$, что соответствует $\lambda_* = -7.7879456 \cdot 10^{-12}$. Оставленное количество знаков после запятой в записи λ_* необходимо. поскольку это связано с тонкой настройкой модели. Основным критерием подгонки параметра λ_* в этой модели являлось значение безразмерного масштабного фактора x_* , которое должно быть максимально близким к значению $x_0 = 1$, соответствующему особой точке на фазовой диаграмме. Близость x_{*} к 1 приводит к близости значения энергетического параметра E_* к значению -0.5, что соответствует почти нулевому размаху колебаний масштабного фактора. Поскольку в реальности не наблюдается существенных изменений радиуса Солнца, то размах его радиальных колебаний не может существенно превышать сотню метров.

На рис. 16(а) приведено общее распределение $\lg(S)$, а на рис. 16(b) — $\lg(\mathcal{T})$. Рисунки 17(a, b) служат для оценивания значений положения первого минимума χ_0 и следующего за ним максимума χ_1 . Для данного значения k и ε получаем следующие оценки $\chi_0 \simeq 13537$, $\mathcal{T}_{min} \simeq 6 \cdot 10^{-3}$, $\chi_1 \simeq 132000$, $\mathcal{T}_{max} \simeq 0.00717$. В результате для данной модели находим

$$a_* = R_{\odot} / \chi_0 \simeq 5.1710 \cdot 10^6 \text{ [cm]},$$

$$M_0 = \rho_{\odot} a_*^3 \simeq 2.0740 \cdot 10^{22} \text{ [r]},$$

$$\nu \simeq -7.4259 \cdot 10^8 \text{ [cm}^3/\text{c}^2],$$

$$\mu \simeq 3.8911 \cdot 10^{15} \text{ [cm}^2/\text{c]}$$

(94)

Исходя из полученных оценок, вычисляем

$$a_{0} = \mu/|\nu| \simeq 5.7170 \cdot 10^{6} \text{ [cm]},$$

$$x_{*} = a_{*}/a_{0} = 1 - \delta x, \quad \delta x \simeq 4.0 \cdot 10^{-10},$$

$$y_{*} \simeq 1.0 \cdot 10^{-8}, \quad c_{*} \simeq 0.9 \cdot 10^{-9} \text{[cm/c]} \qquad (95)$$

$$E_{*} = -0.5 + \delta E, \quad \delta E \simeq 5.0 \cdot 10^{-15},$$

$$\Delta_{E}(E_{*}) \simeq 2 \cdot 10^{-7}, \quad \delta H \simeq 0.14 \text{[km]},$$

$$P(E_{*}) \simeq 11.03 \text{[rog]}$$

Параметр E_* вычислялся по условию обращения y_* в нуль с требуемой точностью.

Из оценки величины x_* следует, что данная модель описывает колебательный режим вблизи особой точки $x_0 = 1$ с периодом около 11 лет. Для



Рис. 16. Коэффициенты энтропии $\lg(S)$ (a), температуры $\lg(\mathcal{T})$ (b) и плотности $\lg(\mathcal{R})$ (c) одноатомного газа с $n = 3/2 (\gamma = 5/3)$ для k = -0.7, $\varepsilon = 6.0 \cdot 10^{-5}$ $(\lambda_* \simeq -7.7879456 \cdot 10^{-12})$



Рис. 17. Коэффициент температуры $\mathcal{T}(\chi)$ одноатомного газа с $n = 3/2(\gamma = 5/3)$ для k = -0.7 и $\varepsilon = 0.6 \cdot 10^{-4}$ ($\lambda_* \simeq -7.7879456 \cdot 10^{-12}$) в двух диапазонах χ вблизи нуля

данного значения $\varepsilon \simeq 6.0 \cdot 10^{-5}$ и заданном значении x_* и E_* величина размаха оценивается величиной $\delta H \simeq 0.14$ [км] со средней скоростью перемещения поверхности $c = \delta H/P \simeq 1.3 \cdot 10^{-2}$ [км/год] за полупериод будет маленькой величиной, которую трудно обнаружить на фоне флуктуаций и волновых колебаний плазмы вблизи поверхности Солнца. Мгновенная скорость перемещения поверхности си $c_* \simeq 0.9 \cdot 10^{-9}$ [см/с] в точке x_* одновременно позволяет оценить значение скорости потока Хаббла $u = \dot{a}\chi$ на поверхности Солнца в соответствующий момент времени: $u_* = c_*\chi_0 \simeq 1.2 \cdot 10^{-5}$ [см/с]. Поскольку скорость потока Хаббла осциллирует вбли-

зи нуля, то u_* указывает лишь на порядок амплитуды u на поверхности Солнца.

Анализируя распределение \mathcal{T} , соответствующее данной модели в предположении, что температура в центре Солнца $T_{\odot} \simeq 15 \cdot 10^6 \, [{\rm K}]$, находим, что в минимуме фотосферы температура $T_{min} \simeq 4500 \, [{
m K}]$ вполне соответствует реально наблюдаемому значению $T_{\odot} \simeq 4800 \, [{
m K}]$. Однако в следующем максимуме $T_{max} \simeq 1.01 \cdot 10^5 \, [{\rm K}]$, что примерно в двадцать раз меньше, чем реальная максимальная температура в короне Солнца, равная по оценкам [30] 2 · 10⁶ [K]. При условии, что в центре Солнца $\rho(0) \simeq 150 [r/cm^3]$, оценки плотности среды по численным расчетам в минимуме фотосферы равна $\rho_{min} \simeq 1.8 \cdot 10^{-17} [г/cm^3]$ и в максимуме $\rho_{min} \simeq 4.8 \cdot 10^{-11} [\Gamma/cM^3].$ Эти оценки существенно ниже тех, что дает стандартная модель Солнца [8] величиной $\rho_{ph} \simeq 2.0 \cdot 10^{-7} \, [\Gamma/cM^3]$. Также устанавливаем, что отношение $\chi_1/\chi_0 = R_{max}/R_{\odot} \simeq 9.8$ достаточно велико. Однако эта величина укладывается в общую приближенную оценку расположения максимума температуры в короне Солнца в несколько его радиусов [8]. Таким образом, можно констатировать, требуется определенная модификация модели для более детального согласования ее модели с реальными данными. Для этого в первую очередь следует использовать более точные соотношения для энтропии (83), в частности, вводя в расчеты подходящую зависимость $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_0(\chi)$, а также учитывать процессы излучения и влияние магнитного поля. В частности, существенное отличие температуры T_{max} от реально наблюдаемого значения $\simeq 2 \cdot 10^6$ [K], возможно, связано с не рассматриваемыми в данной работе процессами турбулентности и диссипации различного рода магнитоактивных волн в короне Солнца [35].

19. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе развита теория динамического равновесия пространственного распределения самогравитирующего газа, обладающего цилиндрической симметрией с автомодельной эволюцией его параметров со временем. Такой тип равновесия определяется специфическим типом взимодействия радиального гидродинамического потока газа — потоком Хаббла и зональным потоком, который лишь частично связан с вращением звезды как твердого тела. Как показано в данной работе, именно наличие взаимодействия радиального и зонального потоков позволяет существовать режиму осцилляций звезд. Фактически режим осцилляций связан с периодическим преобразованием энергии радиального расширения звезд в энергию зонального потока и в потенциальную энергию гравитационного поля и обратно. Как отмечалось в разделе 17, модель зонального потока, хотя формально и не имеет особенностей, но приводит к особенностям в потенциале на оси вращения. Поэтому данная модель требует в дальнейшем уточнения для устранения этой особенности.

В работе выведены уравнения автомодельных осцилляций и показана их связь с параметром динамического равновесия λ , появление которого в теории обеспечивается и потоком Хаббла [12], и зональным потоком. Этот параметр является критерием отклонения суммарного значения сил Архимеда и тяготения в ту или иную сторону в зависимости от знака λ , что приводит к ускорению или замедлению радиального расширения звезды и ее зонального потока. Модели осцилляций связаны с отрицательным значением параметра λ . С этой точки зрения в данной работе получены условия возникновения осцилляций, которые оценены для модели с различными параметрами в сопоставлении с данными о Солнце. В данной работе одним из важных аспектов, связанным с моделями осцилляций, является вывод соотношения период-светимость для осцилляций в аналитической безразмерной форме. Форма полученной кривой совпадает качественно с известными кривыми период-светимость для цефеид. Это дает основания надеяться, что данная модель может быть использована в теории звездных пульсаций для звезд на различных стадиях эволюции.

С точки зрения пространственного распределения плотности и температуры построенные и исследованные модели представляют собой модифицированные модели mLEm, содержащие ключевой дополнительный параметр динамического равновесия λ , отсутствующий в классических уравнениях теории Лейна-Эмдена. Все такие модели распадаются на три основных класса по диапазону, в котором принимает значение параметр динамического равновесия λ . Границы диапазонов определяются значениями $\lambda = \lambda_{cr} < 0$ и $\lambda = -1$. В диапазоне $[\lambda_{cr},\infty)$ лежат модели, для которых коэффициенты плотности и температуры хотя бы при одном значении автомодельного радиуса обращаются в нуль. Для $\lambda = \lambda_{cr}$ имеется только одна точка, в которой плотность обращается в нуль. Эти модели являются наиболее близкой модификацией классических моделей Лейна-Эмдена, которым соответствует значение $\lambda = 0$. Формально, как это и делается в классической теории статического равновесия, модели с $\lambda > \lambda_{cr}$ могут рассматриваться как модели звезд в ограниченной области радиальной координаты вблизи центра. В отличие от классических моделей LEm модифицированные модели, в том числе и при $\lambda = 0$, оказываются нестатическими и их динамика описывается автомодельными решениями уравнений модели mLEm.

Модели с λ_{cr} > λ > $-\infty$ (за исключением $\lambda = -1$) описывают пространственные осцилляции плотности и температуры, амплитуда которых убывает при $r \to \infty$. Предельное значение температуры и плотности на бесконечности зависит от значений λ, γ и параметров пространственного распределения энтропии. Модели с $\lambda = -1$ при однородном или политропном распределении энтропии в независимости от показателя адиабаты газа γ приводят к однородному пространственному распределению плотности и температуры. Все такие модели при определенных условиях могут иметь режим осцилляций по времени. Как отмечалось в выше, на больших расстояниях от центра плотность газа в моделях с $\lambda < 0$ стремится к некоторому постоянному значению ρ_{∞} . Поэтому такие модели с физической точки зрения имеет смысл рассматривать только до границы астросферы (гелиосферы для Солнца), на которой происходит взаимодействие солнечного ветра и межзвездной среды.

Важным элементом данной модели, делающей ее пригодной для описания реальных звезд, является модель квазиполитропного распределения энтропии в звездах, соответствующая (83). Это соотношение превращает модель mLEm общего вида в модель с политропным процессом эволюции звезд с показателем политропы, отличающимся от классического случая с адиабатическим процессом эволюции. В работе анализировались модели с чисто политропным распределением энтропии, что соответствует $\mathcal{H}_0(\chi) = 1$. Как было показано, в таких моделях распределение потоков тепла модифицирует термодинамические параметры среды, превращая ее в среду с эффективным показателем политропы, отличающимся от показателя политропы самого газа. Это позволяет построить модель Солнца, согласующуюся с реальными данными по основным параметрам ее структуры и эволюции. В частности, показано, что в случае распределения энтропии с k = -0.7, приводящем к эффективному показателю адиабаты $\gamma = 6/5$, параметры модели при подходящем выборе параметра зонального потока $\varepsilon = 6.0 \cdot 10^{-5}$ дают период осцилляций Солнца вблизи значения 11.3 года при температуре в минимуме фотосферы, равной 4500 К. Эти параметры очень близки к реально наблюдаемым параметрам 11-летнего цикла солнечной активности. Поскольку все модели с $\lambda_{cr} > \lambda > -1$ описывают пространственные осцилляции температуры и плотности вне звезды, то наличие таких осцилляций объясняет простым образом наличие максимума температуры в короне Солнца. Но для чисто политропного распределения энтропии, которое анализировалось в данной работе, величина максимума температуры в короне Солнца при оптимальном выборе других параметров примерно в двадцать раз меньше реально наблюдаемого значения для Солнца, равного $\simeq 2 \cdot 10^6 \, [{\rm K}]$, и имеет значение $T_{max} \simeq 100000 \, [{\rm K}]$. По всей видимости, это расхождение можно устранить с помощью уточнения модели, включив в нее подходящий множитель $\mathcal{H}_0(\chi)$ неполитропного характера.

Решения с $\lambda \leq -1$ могут использоваться в качестве моделей динамики газа после их взрыва, когда почти вся масса газа выбрасывается наружу. Эти модели в некотором смысле можно рассматривать как космологические, в особенности, модель с $\lambda = -1$. Последняя модель, по сути, представляет модель расширения газа с однородным распределением плотности, что характерно для моделей с пылью.

Рассмотренные модели не учитывают ряд важных факторов реальной динамики и строения звезд, например, такие, как наличие магнитного поля, изменения тепловыделения за счет ядерных реакций и возможной неавтомодельности теплопередачи в газе. Модель не учитывает, например, охлаждение газа за счет излучения в области пространственных осцилляций. Кроме этого, в работе рассматривалось лишь сферически-симметричное приближение к пространственному распределению плотности и температуры. Для меридианальных составляющих таких распределений были лишь выписаны сами уравнения без прямого анализа их решений. Этот анализ не проводился из-за ограниченности объема одной статьи. Анализ и учет всех дополнительных факторов требует усложнения представленных моделей. Эти уточнения могут дать более адекватное согласие с реальными данными о строении звезд.

Благодарности. Автор благодарит С.В.Червона за полезное обсуждение ряда затронутых в статье проблем.

Финансирование. Работа выполнена в рамках проекта 0777-2020-0018, финансируемого из средств государственного задания победителям конкурса научных лабораторий образовательных организаций высшего образования, подведомственных Минобрнауки России и частично в рамках проекта РФФИ 20-02-00280.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Разделение переменных в уравнении (16) приводит к следующему соотношению:

$$\frac{2\pi GM_0}{a} \left(\frac{1}{\xi}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial\Phi_0}{\partial\xi}\right) + \frac{1}{\beta}\frac{\partial^2}{\partial\zeta^2}\Phi_0\right) + \frac{1}{a^2}\left(\frac{\mu}{\beta} + \frac{1}{\xi}\frac{\partial}{\partial\xi}(\xi n)\right) = 0.$$

Отсюда следует, что функция Φ_0 удовлетворяет уравнению

$$\frac{1}{\xi}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial\Phi_0}{\partial\xi}\right) + \frac{1}{\beta}\frac{\partial^2}{\partial\zeta^2}\Phi_0 = 0, \qquad (96)$$

а функция $n(\xi)$ принимает следующий вид:

$$n = -\frac{\mu\xi^2}{4} - h_0 \ln\xi - C_1.$$
(97)

Учитывая связь (44) между h и n, находим

$$h = \frac{\mu}{2}\xi^4 + h_0\xi^2.$$
 (98)

Отсюда следует

$$V^2 = f\xi^4 + h_0\xi^2. (99)$$

где $f=3\mu/2.$ Вспомогательный потенциал
 Φ теперь имеет вид

$$\Phi = \frac{2\pi G M_0}{a} \Phi_0 + \frac{\beta^2 \mu}{2a^2} \zeta^2 - \frac{1}{a^2} \left(\frac{\mu \xi^2}{4} + h_0 \ln \xi + C_1 \right).$$

Слагаемое с $\ln \xi$ имеет сингулярность в нуле, что указывает на необходимость уточнения модели вблизи оси вращения звезды.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Я. Б. Зельдович, И. Д. Новиков, *Теория тяготе*ния и эволюция звезд, Наука, Москва (1971).
- В. Г. Горбацкий, Космическая газодинамика, Наука, Москва (1977).
- Я. Б. Зельдович, С. И. Блинников, Н. И. Шакура. Физические основы строения и эволюции звезд, Изд-во МГУ, Москва (1981).
- 4. С. Вайнберг, *Гравитация и космология*б Мир, Москва (1975).
- 5. Я. Б. Зельдович, И. Д. Новиков, Строение и эволюция Вселенной Наука, Москва (1975.)

- О. И. Богоявленский, Методы качественной теории динамических систем в астрофизике и газовой динамике, Наука, Москва (1980).
- В. Г. Бисноватый-Коган, Физические вопросы звездной эволюции, Наука, Москва (1989).
- Плазменная гелиофизика, 1 под ред. Л.М. Зеленого, И.О. Веселовского, ФИЗМАТЛИТ, Москва (2008).
- Дж. П. Кокс, Теория звездных пульсаций, Мир, Москва (1983).
- 10. J. R. Bucher, arXiv: 0907.1766v1 (2009).
- А. С. Расторгуев, Звездные маяки Вселенной, ГА-ИШ, http://lnfm1.sai.msu.ru/ rastor (2015).
- В. М. Журавлев, Пространство, время и фундаментальные взаимодействия, N4, 10, (2020).
- D. K. Nadezhin, Soviet Physics Astronomy 12, 924 (1969).
- 14. R. A. Chevalier and E. A. Lufkin, Astrophys. J. 356, 41 (1990).
- M. V. Murzina and D. K. Nadezhin, Astron. Zh. 68 574 (1991).
- 16. Ue-Li Pen, Astrophys. J. 429, 759 (1994).
- R. N. Antonova and Ya. M. Kazhdan, Astron. Lett. 26, 344 (2000).
- 18. J. H. Lane, Amer. J. of Science and Arts, Second Series 50, 57 (1870).
- 19. R. Emden, Gaskugeln. B.G. Teubner, Leipzig (1907).
- **20**. В. М. Журавлев, в сб. *Инновационные технологии*, Ульяновск, УлГУ, 77 (2010).
- В. М. Журавлев, Нелинейные интегрируемые модели физических процессов. Метод функциональных подстановок, Издательство УлГУ, Ульяновск (2020).

- 22. В. М. Журавлев, Пространство, время и фундаментальные взаимодействия, N1, 5 (2017).
- 23. В. М. Журавлев, ЖЭТФ, 152, 495 (2017).
- 24. V. M. Zhuravlev, Gravitation and Cosmology, 17, 201 (2011).
- V. M. Zhuravlev, Gravitation and Cosmology, 23, 95 (2017).
- V. M. Zhuravlev, Gravitation and Cosmology, 28, No. 4, (принята в печать) (2022).
- 27. W. McCrea and E. MilneQuart, J. Math. N.5, 73 (1934)
- 28. Л. М. Озерной, О. Ф. Прилуцкий, И. Л. Розенталь. Астрофизика высоких энергий, Атомиздат, Москва (1973).
- 29. В. А. Рубаков, Д. С. Горбунов. Введение в теорию ранней Вселенной. Космологические возмущения. Инфляционная теория, Едиториал УРСС, Москва (2009)ю
- M. J. Aschwanden, Physics of the Solar Corona: an Introduction with Problems and Solutions, Springer, Berlin (2006).
- 31. A. Genova, E. Mazarico, S. Goossens, F. G. Lemoine, G. A. Neumann, D. E. Smith, and M. T. Zuber, Nature Communications (2018), DOI: 10.1038/s41467-017-02558-1.
- **32**. С. А. Жевакин, Астрон. Ж. **30**, 161 (1953).
- 33. С. А. Жевакин, Астрон. Ж. 31, 141 (1954).
- 34. S. A. Zhevakin, Annual Review of Astron. and Astrophys. 1, 367. (1963).
- **35**. J. Squire, R. Meyrand, M. W. Kunz, et al. Nat Astron (2022) https://doi.org/10.1038/s41550-022-01624-z

ТЕНИ ЧЕРНЫХ ДЫР КАК ИСТОЧНИК ОГРАНИЧЕНИЙ НА РАСШИРЕННЫЕ ТЕОРИИ ГРАВИТАЦИИ 2: SGR A*

В. А. Прокопов^{а,b}, С. О. Алексеев^{а,b}, О. И. Зенин^b

^а Государственный астрономический институт им. П.К. Штернберга, Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова 119234, Москва, Россия

^b Физический факультет, Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова 119234, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 29 сентября 2022 г., после переработки 8 октября 2022 г. Принята к публикации 9 октября 2022 г.

Почти сразу после опубликования [1] проектом Event Horizon Telescope (EHT) было получено первое прямое изображение черной дыры в центре нашей галактики: Sagittarius A* [2]. Полученные ранее [1] результаты для модели Хорндески с инвариантом Гаусса–Бонне, петлевой квантовой гравитации, скалярных моделей Бамбелби, Гаусса–Бонне и конформной гравитации полностью согласуются с наблюдения ми Sgr A*. В f(Q) гравитации наблюдения Sgr A* дополнительно ограничивают значения параметра α : $-0,025 < \alpha < 0,005$. Для альтернативного обобщения метрики Бамбелби с приближением Шварцшильда ограничение становится следующим: -0,05 < l < 0,45. Полученные ограничения демонстрируют тот максимум, которого можно достичь без учета вращения черной дыры.

DOI: 10.31857/S0044451022120070 **EDN:** LCRZOY

1. ВВЕДЕНИЕ

Черная дыра (ЧД) в центре нашей Галактики Sgr A* более чем в тысячу раз меньше черной дыры в центре галактики М87 [3]. Таким образом, после получения изображений теней от черных дыр (ЧД) различных масс стало возможным сравнить их друг с другом, а также использовать их для более точной проверки предсказаний различных расширенных теорий гравитации. Отметим, что оценка массы Sgr A* от Event Horizon Telescope (EHT) сходится с оценкой, полученной по результатам наблюдений за траекториями звезд, вращающихся вокруг Sgr A*, что дает возможность более точно проверять применимость различных расширенных теорий гравитации, налагая дополнительные ограничения на них. Напомним, что ограничения на размер тени ЧД при наблюдении Sgr A* составляют (4.3M < D < 5.3M) [2].

В настоящей работе с привлечением новых данных [2] уточняются ограничения, наложенные нами ранее [1] на модель Бамбелби (расширение ОТО с помощью векторного поля [4]) и телепараллельный эквивалент общей теории относительности (TEGR) [5]. В то же время, на модель Хорндески [6], петлевую квантовую гравитацию (loop quantum gravity, LQG) [7], скалярнаую гравитацию Гаусса-Бонне [8] и модель гравитации с конформной симметрией [9] новые наблюдательные данный Sgr A* дополнительных ограничений не накладывают.

2. ОБОБЩЕННАЯ МЕТРИКА МОДЕЛИ БАМБЕЛБИ

Напомним, что в модели Бамбелби размер тени не зависит от метрической функции B(r), если на рассматриваемом масштабе B(r) > 0 и нет других особых точек (регулярность над горизонтом) [1]. Метрика Бамбелби отличается от шварцшильдовской только компонентой B(r), поэтому рассмотрим предложенное ранее альтернативное обобщение [1]:


Рис. 1. Зависимость размера тени ЧД D от параметра l в альтернативном обобщении метрики Бамбелби в приближении Шварцшильда (в единицах массы ЧД M, M = 1)



Рис. 2. Зависимость размера тени ЧД D от параметра α в f(Q)-гравитации в единицах массы ЧД M_{ren}

$$A(r) = (1+l)\left(1-\frac{2M}{r}\right),\tag{1}$$

$$B(r)^{-1} = 1 - \frac{2M}{r},$$
(2)

где *l* — константа.

На рис. 1 показано влияние параметра l на размер тени ЧД. С учетом результатов наблюдения Sgr A* [2], получим, что -0.05 < l < 0.45. Заметим, что в случае ограничений, полученных на М87*, среднее значение значение параметра l лежит гораздо ближе к отрицательной области (старые ограничения -0.3 < l < 0.45 [1]). Судя по этой тенденции, при дальнейшем уточнении наблюдательных данных параметр l может стать полностью положительным.

3. f(Q) ГРАВИТАЦИЯ

f(Q)-гравитация — это симметричная версия телепараллельной гравитации (STEGR) с ненулевым скаляром неметричности Q [5]:

$$A(r) = 1 - \frac{2M_{ren}}{r} - \alpha \frac{32}{r^2},$$
(3)

$$B(r)^{-1} = 1 - \frac{2M_{ren}}{r} - \alpha \frac{96}{r^2},\tag{4}$$

$$2M_{ren} = 2M - \alpha \left(\frac{32}{3M} + c_1\right),\tag{5}$$

где α — параметр разложения, c_1 — постоянная ин-

тегрирования, M_{ren} — ренормированная масса. Для удаленного наблюдателя нет разницы между перенормированной массой и обычной массой Шварцшильда.

На рис. 2 показано влияние параметра *a* на размер тени ЧД. С учетом наблюдений Sgr A* [2], ограничения на α примут вид $-0.025 < \alpha < 0.005$. Заметим, что, в отличие от случая M87* (старые ограничения $-0.025 < \alpha < 0.04$ [1]), среднее значение параметра α смещается ближе к отрицательной области. Судя по этой тенденции, при дальнейшем уточнении наблюдательных данных параметр α сместится в отрицательную область.

4. ОБСУЖДЕНИЕ И ВЫВОДЫ

Разрешение первых изображений черных дыр в проекте Event Horizon Telescope составляло приблизительно половину размера тени черной дыры в центре галактики М87* [3]. Верхняя граница размера тени для Sgr A* (5.3*M*) ниже, чем в случае М87* (6.1*M*), что уже сравнимо с расчетным размером тени ЧД в ОТО (примерно 5.2*M* [1]). Это позволило наложить более жесткие ограничения на альтернативную метрику Бамбелби (-0.05 < l < 0.45) снизу и f(Q) гравитацию ($-0.025 < \alpha < 0.005$) сверху.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Междисциплинарной научнообразовательной школы Московского университета "Фундаментальные и прикладные космические исследования" (ГАИШ).

ЛИТЕРАТУРА

- С. О. Алексеев, В. А. Прокопов, О. И. Зенин, ЖЭТФ 161, 108 (2022).
- 2. The Event Horizon Telescope Collaboration, Astrophys. J. Letters **930** L17 (2022).
- 3. K. Akiyama et al., Astrophys. J. 875, L5 (2019).
- R. Casana, A. Cavalcante et al., Physical Review D 97, 104001 (2018).

- F. D'Ambrosio, S. D. B. Fell et al., Phys. Rev. D 105, 024042 (2022).
- G. W. Horndeski, Int. J. Theor. Phys. 10, 363 (1974).
- A. Barrau, T. Cailleteau et al., Class. Quant. Grav. 31, 053001 (2014).
- N. Yunes and L. C. Stein, Phys. Rev. D 83, 104002 (2011).
- 9. P. D. Mannheim, Found. Phys. 42, 388 (2012).

НИЗКОПОРОГОВЫЙ АВТОЭМИССИОННЫЙ КАТОД НА ОСНОВЕ ТЕРМИЧЕСКИ ОБРАБОТАННОГО ДЕГИДРОФТОРИРОВАННОГО ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА

О. А. Стрелецкий, И. А. Завидовский^{*}, О. Ю. Нищак, А. А. Хайдаров, Н. Ф. Савченко,

А. В. Павликов

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет 119991 Москва, Россия

> Поступила в редакцию 25 июня 2022 г., после переработки 8 июля 2022 г. Принята к публикации 8 июля 2022 г.

Изучались пленки, полученные путем термической обработки при температуре 600–800 °С материала на основе *sp*-углерода, синтезированного методом дегидрофторирования поливинилиденфторида. Структура образцов исследовалась методами растровой электронной микроскопии, рентгеновской дифракции, инфракрасной спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния. Показано, что электронная эмиссия образцов активируется при напряженности поля 0.3–1.5 В/мкм. Рассмотрено влияние структуры полиеновой и графитовой фаз, сформированных в результате отжига, на эмиссионные характеристики материала. Показано, что эмиссия обусловлена автоэлектронным и термоэлектронным механизмами.

DOI: 10.31857/S0044451022120082 **EDN:** LDCCNU

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время актуальной задачей является исследование материалов, которые возможно использовать в качестве эмиссионных источников электронов [1-4]. Данная цель обусловлена как возможностью применения эмиттеров в широком спектре существующих вакуумных устройств, так и перспективами создания эмиссионных катодов для использования в планарной наноэлектронике [5-8]. Особый интерес представляет поиск новых эмиссионных материалов, способных функционировать при атмосферном давлении. Они могут найти свое применение при разработке СВЧ-устройств, более мощных по сравнению с устройствами на основе элементов твердотельной электроники [9–12]. Преимущественным образом описанные задачи решаются при помощи автоэлектронных эмиттеров. Эффективные автоэмиссионные структуры должны иметь электрофизические и структурные параметры, обеспечивающие высокую стабильность и эффектив-

E-mail: ia.zavidovskii@physics.msu.ru

ность работы. Последний аспект связан с тем, что реализация туннельного эффекта возможна лишь при высокой напряженности поля. При полях порядка 10³ В/мкм, при которых имеет место автоэмиссия, катоды могут разрушаться в условиях технического вакуума под действием распыления ионизованным остаточным газом [13, 14]. Для решения этой проблемы необходимо разработать и исследовать материалы, обладающие выраженными эмиссионными свойствами в плоской конфигурации. Такие материалы должны обладать высокой тепловой и механической стабильностью, а также быть устойчивыми к ионному распылению. Подобная стабильность может быть достигнута за счет увеличения эффективной площади эмитирующего участка и низкого порога активации автоэлектронной эмиссии.

К числу перспективных материалов эмиттеров относятся различные углеродные и углеродсодержащие материалы: алмазоподобные и графитовые наноструктуры, пористый углерод, фуллероиды [15], графит-содержащие композиты [16], графен [17], углеродные волокна [18], наноструктурированные композитные материалы [19]. Эмиссионные свойства углеродных наноматериалов чаще всего обусловлены как низким пороговым полем эмиссии, так

и высоким коэффициентом усиления поля — соотношением локальной напряженности поля, усиленного за счет локальных неоднородностей структуры, и средним значением поля между катодом и эмиттером [19, 20]. Формирование наноразмерных острий, обеспечивающих локальное усиление поля, нередко является основой высокой эффективности электронной эмиссии для различных структур. Однако в случае углеродных материалов формирование эмиссионных катодов возможно и для структур, не имеющих существенных морфологических особенностей [21], что может способствовать созданию структур с высокостабильными эмиссионными свойствами на основе углерода.

Помимо структурного аспекта, ключевым вопросом разработки эмиттеров на основе наноструктурированного углерода является определение механизма эмиссии, для которого часто используется построение эмиссионной вольт-амперной характеристики (BAX) исследуемого эмиттера в различных координатах [22]. При этом нужно учитывать дополнительные факторы, влияющие на эмиссию: так, в работе [22] отмечено, что ВАХ углеродных пленок, полученных методом химического осаждения из газовой фазы, достаточно хорошо спрямляется в координатах, отвечающих четырем различным механизмам эмиссии. В работе, посвященной исследованию игольчатых углеродных структур, напротив, не было получено приемлемой аппроксимации ни для одной из шести исследованных зависимостей, что позволило авторам сделать вывод о вкладе нескольких механизмов эмиссии в электронный транспорт [23]. Нелинейность (в выбранных координатах, к примеру, Фаулера-Нордгейма $(U^{-1}; \ln(I/U^2)))$ может при этом быть интерпретирована не только за счет вклада нескольких механизмов, но и за счет проявления сопутствующих эффектов (взаимной экранировки эмиссионных центров, адсорбционно-десорбционных процессов), учета зависимости коэффициентов, входящих в закон Фаулера-Нордгейма, от напряжения [24]; некорректности применения выбранной формулы для исследуемых систем [25]; вклада шунтирующего сопротивления, обусловленного конструкцией диода [26]. Таким образом, исследование эмиссионных свойств материала невозможно без комплексного подхода, включающего в себя анализ структуры и интерпретации особенностей его ВАХ.

В данной работе представлены результаты исследования структуры и эмиссионных свойств наноструктурированных материалов, полученных путем термической обработки дегидрофторированного поливинилденфторида (ПВДФ). Для исследования структуры использовались методы растровой электронной микроскопии (РЭМ), рентгеновской дифракции, инфракрасной фурье-спектроскопии (ИКспектроскопии) и спектроскопии комбинационного рассеяния (КР-спектроскопии).

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Материал эмиттеров изготавливался в несколько этапов. В качестве прекурсора для получения наноуглеродного материала использовались пленки на основе пористых мембран из ПВДФ толщиной около 5 мкм. Материал пленки подвергался процедуре дегидрогалогенирования в соответствии с описанием, изложенным в работах [27,28]. Химическая реакция дегидрофторирования, приводящая к формированию *sp*-углерода, может быть записана следующим образом [28]:

$$(-CH_2 - CF_2 -)n + 2nKOH \rightarrow$$

 $\rightarrow (-C \equiv C -)n + 2nH_2O + 2nKF$

Побочные продукты реакции удалялись из синтезированного материала путем его промывания в этаноле и последующей очистки в ультразвуковой ванне, наполненной дистиллированной водой, на протяжении 15 минут. Полученный в результате реакции материал представлял собой пленку толщиной ~ 1 мкм черного цвета, которая аккуратно нарезалась на отдельные квадраты размером 5 × 5 мм², закреплявшиеся в дальнейшем на подложке из нержавеющей стали.

На следующем этапе образцы подвергались термическому отжигу при различных температурах вплоть до 800 °C в кварцевой трубке, помещенной в высоковакуумную камеру с предварительной откачкой до 10⁻⁶ торр. Температура контролировалась при помощи хромель-копелевой термопары. Нагрев осуществлялся линейно со скоростью 20 °C в минуту. При достижении требуемой температуры отжиг образцов проводился в течении 30 мин.

Исследование морфологии образцов проводилось на растровом электронном микроскопе Jeol Leo 120. Рентгеноструктурный анализ проводился на порошковом рентгеновском дифрактометре Rigaku D/MAX-2500 PC с вращающимся анодом. Рентгеновское излучение возбуждалось на длине волны CuK_{α} ($\lambda = 1.5405$ Å). Фазовый состав и структура образцов исследовались при помощи спектроскопии комбинационного рассеяния света и инфракрасной спектроскопии. КР-спектры регистрировались при помощи спектрометра Sunshine GE-Raman, сопряженного с микроскопом Leitz Wetzlar. Длина волны лазера — 532 нм, мощность падающего луча — 1 мВт. ИК-спектры образцов были сняты на спектрометре Bruker FTIR.

Измерения эмиссионных характеристик проводились в условии высокого вакуума 10^{-9} торр при помощи установки Lass 4000 фирмы «RIBER». Перед началом измерения катод выдерживался при температуре 500 °C в течение 30 мин для обезгаживания материала. Эмиссионные ВАХ измерялись по диодной схеме, в которой в качестве катода выступал исследуемый материал, а в качестве анода устанавливалась плоскопараллельная полированная пластина из нержавеющей стали. Расстояние между катодом и анодом составляло 300 мкм. Анодное напряжение менялось по линейному закону с шагом 10 B/c.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Структурные свойства

3.1.1. РЭМ

На рис. 1 представлено изображение образца после дегидрогалогенирования, полученное с помощью растровой электронной микроскопии. Для образцов, которые подвергались отжигу, изображения РЭМ отличались от приведенного незначительно. Данные РЭМ показывают, что полученная структура имеет поры и неоднородности с характерным размером порядка 1 мкм.



Рис. 1. РЭМ-изображение дегидрогалогенированной пленки



Рис. 2. Дифрактограмма неотожженного и отожженного образцов. Отмечены плоскости, соответствующие структуре кристаллитов ПВДФ. Верхняя шкала соответствует межплоскостным расстояниям

3.1.2. Рентгеноструктурный анализ

С целью определения структуры полученных образцов был проведен рентгеноструктурный анализ. Фиттирование дифрактограмм гауссовыми линиями было выполнено при помощи программы MagicPlot. На рис. 2 представлены дифрактограммы образцов после дегидрофторирования и отжига при 700 °C. Для образца после дегидрогалогенирования наблюдается набор узких и широких пиков, обусловленных присутствием двух фаз: отдельных кристаллитов и аморфной (разупорядоченной) субструктуры. Пики при $2\theta = 17.9^{\circ}$ (100/020), 20.1° (110), 26.8° (021) и 38.8° (002), согласно литературным данным, соответствуют структуре кристаллов ПВДФ [29] и отвечают межплоскостным расстояниям соответственно 4.9, 4.4, 3.3 и 2.3 Å. Наличие кристаллитов ПВДФ в структуре образца после дегидрогалогенирования связано с остаточным присутствием материала прекурсора. На дифрактограмме неотожженного образца также наблюдаются более широкие пики с максимумами при $2\theta = 12.2^{\circ}, 20.3^{\circ}$ и 38.7°, что соответствует межплоскостным расстояниям 7.3, 4.4 и 2.3 Å. По своим положениям они соответственно схожи с линиями 11.9°, 21.9° и 37.9° (7.4, 4.1 и 2.4 Å), наблюдающимися для образца, претерпевшего термическую обработку. Стоит отметить, что наблюдаемые большие межплоскостные расстояния 7.3–7.4 Å не характерны для аморфных sp^2/sp^3 -углеродных структур, которые, как правило, формируются в процессе отжига органических материалов.

По нашему предположению, описанные наборы дифракционных максимумов на 7.3–7.5 Å, 4.4–4.5 Å, 2.3–2.4 Å отвечают полимерной компоненте в структуре материала. Согласно литературным данным, для допированного полиацетилена характерны линии, лежащие в окрестности 7.5–7.8 Å и 4.0–4.2 Å, а также ряд линий в диапазоне 2.0–2.2 Å [30–32]. Разница в положении известных из литературы и наблюдаемых линий позволяет предположить, что структура полимерной фазы отлична от чистого или допированного транс-полиацетилена. Таким образом, набор линий, характерный для дефектного транс-полиацетилена, а также данные о формировании полиеновых фрагментов в процессе дегидрогалогенирования [33] позволяют предположить, что они отвечают полиеновой субструктуре, т.е. структуре полимера, содержащего не менее трех сопряженных одинарных С – С и двойных С = С связей.

Стоит отметить, что для *sp*-углерода, который, согласно [27,28], формируется в процессе дегидрофторирования, характерны межплоскостные расстояния около 4–5 Å. Таким образом, *sp*-гибридизованные цепочки могут также вносить вклад в широкий максимум в диапазоне 17.7–22.2°, однако выделить вклад *sp*-углерода в дифракционный максимум не представляется возможным [34].

Дифрактограмма образца, отожженного при температуре 700 °С, является характерной для всех образцов после термической обработки. Можно видеть, что острые пики, отвечающие кристаллитам ПВДФ, после отжига не наблюдаются. Помимо описанных выше пиков, отвечающих полиеновой фазе, можно видеть также широкую линию с максимумом $2\theta = 43.6^{\circ}$, что соответствует межплоскостному расстоянию 2.1 Å, типичному для ориентации (100) разупорядоченного графита [35]. Для аморфного графита также характерна дифракция от плоскостей (002) с межплоскостным расстоянием 3.5 Å, которая может давать вклад в широкий пик с максимумом 21.9°.

Таким образом, в рентгеновской дифракции дегидрогалогенированного неотожженного образца наблюдаются две фазы: кристаллиты ПВДФ и субструктура, которая предположительно соответствует насыщенному дефектами полимеру с большими межплоскостными расстояниями. Вклад sp-углерода, формирующегося в ходе реакции дегидрофторирования, при помощи данной методики выявить не удалось, так как его межплоскостные расстояния схожи с расстояниями наблюдаемых субструктур. В силу этого пик sp-углерода не представляется возможным разрешить в широком



Рис. 3. ИК-спектры отожженной и неотожженной дегидрофторированной пленки

максимуме при $2\theta = 20.3^{\circ}$. При отжиге наблюдается исчезновение пиков, атрибутированных ПВДФ. Положение дифракционных максимумов позволяет предположить, что в отожженных пленках присутствует полимерная и разупорядоченная графитовая фаза.

3.1.3. ИК-спектроскопия

На рис. 3 (черная линия) представлены результаты ИК-спектроскопии дегидрогалогенированного ПВДФ. Спектр материала, являющегося продуктом данной химической реакции, описан в работе [28]. Согласно [28], линия 1600 см $^{-1}$ соответствует колебанию С = С, 1720 см⁻¹ — карбонильной группе $C = O, 2170 \text{ см}^{-1} - C \equiv C.$ Полосы поглощения на линиях 770 см $^{-1}$ и 900 см $^{-1}$ отвечают колебаниям связей С – Н на изгиб, а линии в диапазоне 1100- 1200 см^{-1} соответствуют колебаниям связей C - C, С – О и С – Н [28,36,37]. Полосы поглощения на 1100–1200 см⁻¹, как и 1250 см⁻¹ (C – C), а также 1430 см $^{-1}~({\rm C-H})$ типичны для разупорядоченных sp^2/sp^3 -гибридизованных углеродных структур [36]. В то же время, в диапазоне 1100-1300 см⁻¹ в ИКспектре могут присутствовать пики, обусловленные сложением колебаний, в которые дают вклад осцилляции группы $-CF_2$ остаточного ПВДФ [38].

Полосы поглощения в диапазоне 2900–3040 см⁻¹ характерны для колебаний связей С – Н в материалах со структурой на основе углеродных и полимерных цепочек [39, 40]. Отличительной особенностью линий в диапазоне 2920–3040 см⁻¹ является то, что их положения отвечают различным конфигурациям атомов: так, о наличии – CH₂-групп свидетельствуют линии 2920–2930 см⁻¹, положение полосы поглощения в пределах 2960–2980 см⁻¹ соответствуют связям $C(sp^3)$ – H, а для связей $C(sp^2)$ – H характер-

на наибольшая частота линий (3010-3040 см⁻¹) [36]. В свою очередь, полосы поглощения, волновое число которых превышает 3050 см⁻¹, характерны для C(sp³) – Н-колебаний фенильных групп в полимерах [40-42]. Их присутствие в спектре может свидетельствовать об ароматической структуре боковых или концевых радикалов цепочки. Это предположение подтверждается данными ИК-спектроскопии химически синтезированных карбиновых цепочек с фенильными концевыми группами [43]. Таким образом, полоса поглощения на линии 2170 см⁻¹ является свидетельством формирования цепочечной карбиноподобной углеродной структуры, а набор узких интенсивных линий в диапазоне $2900-3100 \text{ см}^{-1}$ позволяет сделать предположения о наличии как водородной пассивации, так и фенильных групп в боковых и концевых группах углеродных цепочек.

Спектр, представленный красной линией на рис. 3, соответствует образцу, отожженному при температуре 700 °C, и является характерным для всех образцов после отжига. При сравнении с ИК-спектром образца после дегидрофторирования можно видеть, что в результате отжига произошли значительные изменения: увеличилась ширина линий, что говорит о разупорядочении структуры образцов, а также произошло изменение положения и интенсивности некоторых линий, что позволяет сделать вывод о существенной структурной перестройке образцов в процессе отжига. Наиболее существенным изменением спектров является исчезновение полосы поглощения на линии 2170 см⁻¹, а также редукция серии линий в диапазоне 2900-3040 см⁻¹ до одной, сравнительно широкой линии с минимумом при 2910 см $^{-1},$ положение которого характерно для колебания С-Н-связей в аморфном углероде [36]. Также стоит отметить, что линии, отвечающие C-C-связям (1100–1250 см⁻¹), практически перестали быть различимы, в то время как $C = C (1600 \text{ см}^{-1})$ уменьшилась не столь сильно. Увеличение относительной интенсивности пиков, обусловленных колебаниями С = С-связей, может свидетельствовать о возрастании доли *sp*²-гибридизованных атомов углерода. При этом формирование sp^2 -компоненты может быть связано как с образованием графитовых кластеров, так и с появлением субструктуры на основе полиенов [44].

3.1.4. КР-спектроскопия

Дополнительные исследования изменения структуры образцов в процессе отжига были проведены методом КР-спектроскопии. На рис. 4 представ-



Рис. 4. Спектры комбинационного рассеяния отожженных и неотожженных образцов. Для неотожженного образца красным обозначен пик, отвечающий фону люминесценции, а также энергетическое положение максимума люминесценции

лены КР-спектры исходного и отожженного образцов. КР-линии спектра исходного образца являются типичными для карбиноподобных материалов [37]. Два пика на линиях 1140 и 2090 cm^{-1} соответствуют колебаниям связей C – C и C = C [45,46]. Мы предполагаем, что пик связей С – С главным образом связан с колебаниями в полиеновой субструктуре или углеводородных концевых группах цепочечного углерода, содержащих одинарные и двойные связи [37]. О том, что этот пик не может быть связан только с колебанием одинарных связей в spуглероде, свидетельствует меньшая интенсивность линий, лежащих в диапазоне $1000-1300 \text{ см}^{-1}$, по сравнению с линией, лежащей в окрестности 2000- 2300 см^{-1} , характерной для «атомных проволок» углерода с преимущественной *sp*-гибридизацией [47]. Линии, расположенные на 1550 и 1640 см $^{-1}$, в свою очередь, могут быть связаны как с изгибами цепочек, соответствующими хейнмановской модели карбина, так и с sp²-гибридизованным углеродом сшивок, фенильных концевых групп цепочек или полиеновой субструктуры [44,47-50].

Еще одной особенностью образца, не подвергшегося отжигу, является широкий фон люминесценции, который в пересчете рамановского сдвига на абсолютное значение энергии имеет максимум при 2.11 эВ. Для карбина эта линия, по-видимому, отвечает переходу возбужденного электрона из зоны проводимости в валентную зону. Её энергетическое положение, таким образом, соответствует ширине запрещенной зоны, отвечающей энергетической структуре углеродных цепочек с 10–12 атомами в линейном фрагменте [45]. Данное предположение подтверждается положением КР-линии, отвеча-



Рис. 5. Разложение КР-спектров образцов, изготовленных при различной температуре отжига

ющей колебанию тройных связей, при 2090 см⁻¹: как показано в [51], для цепочки из 10–12 атомов углерода наиболее интенсивный максимум лежит в диапазоне 2089–2128 см⁻¹. При этом ширина КРлинии, расположенной на 2090 см⁻¹, превышает ширину пиков, наблюдаемых для идеальных цепочек с фиксированной длиной. По-видимому, причиной этого является разупорядочение структуры, а также формирование цепочек с различными длинами и различными концевыми группами.

Спектры отожженных образцов, в свою очередь, имеют два выраженных пика в диапазонах 1300-1400 см⁻¹ и 1500-1600 см⁻¹. Исчезновение линий с волновыми числами, превышающими 2000 см⁻¹, подтверждает данные ИК-спектроскопии, свидетельствующие о насыщении тройных связей в процессе отжига. Типичное для аморфных углеродных структур разложение КР-спектра включает в себя два пика: D-пик (1330–1370 см⁻¹), соответствующий оборванным связям или дефектам, а также G-пик (1510–1600 см⁻¹), отвечающий графитовой составляющей [52,53]. В качестве особенности спектра исследуемых образцов можно отметить существенную ширину линий, не позволяющую аппроксимировать пики только двумя описанными выше линиями, типичными для аморфных углеродных структур.

Для того чтобы более подробно проанализировать эволюцию структуры при изменении температуры отжига от 600 до 800 °C, при помощи программы MagicPlot было проведено разложение их KP-спектров на гаусс-лоренцевы составляющие (см. рис. 5).

Полученные результаты представлены в таблице и свидетельствуют о том, что в структуре содержится две фазы: субструктура, соответствующая разу-

Таблица 1. Характеристики пиков, полученных при разложении КР-спектров образцов: положение максимума k_{max} , относительная площадь пика S, полная ширина пика на половине высоты (ПШПВ)

	$k_{max},$ cm^{-1}	S, %	$\underset{\mathrm{CM}^{-1}}{\Pi \mathrm{III} \mathrm{IIB}},$
	1180	11	71
600 °C	1358	44	102
	1498	7	45
	1584	38	51
	1187	5	55
700 °C	1366	47	102
	1505	6	55
	1606	42	35
	1098	4	64
800 °C	1355	49	122
	1589	47	52

порядоченному углероду, которая описывается D- и G-линиями; а также полимерная субструктура, которой отвечают пики в диапазонах $1100-1200 \text{ см}^{-1}$ и $1500-1600 \text{ см}^{-1}$. Положение G-линии указывает на то, что разупорядоченная фаза представляет собой структуру на основе графита [37]. При этом для образца, отожженного при температуре 700 °C, пирина G-линии значительно меньше, чем для других образцов, что свидетельствует о некотором упорядочении графитовой субструктуры при данной температуре [54,55]. Этот результат находится в соответствии с литературными данными [56], свидетельствующими о снижении ширины G-линии образцов на основе аморфного углерода, отожженных при температуре 700 °C.

Фаза, соответствующая полимерной субструктуре, оказывается более чувствительной к термической обработке и претерпевает более существенные изменения при вариации температуры отжига. Это подтверждает наше предположение, что данная субструктура образована углеродными цепочками полиенового типа. Схожие выводы были сделаны в результате анализа спектров образцов на основе поликристаллического алмаза, для которых появление нетипичных для структуры линий было связано с формированием трансполиацетилена на границах поликристаллитов при изменении условий синтеза [57]. Однако положение КР-линий исследуемой полиеновой субструктуры $(1100-1200 \text{ см}^{-1})$ существенно отличаются от известных положений для кристаллического трансполиацетилена (1080 см⁻¹) [58,59]. Для полимерных структур положения пиков в окрестности 1180 см⁻¹ и 1500 см⁻¹ характерны, в частности, для каротина, полипентина и полигептина — полимеров, представляющих собой длинные цепочки атомов углерода с сопряженными двойными связями, в которых -СН3, -С3Н7, -С5Н11 присутствуют в качестве боковых радикалов [44, 58, 59]. Вследствие этого структуру полимерной фазы для образцов, полученных при температурах 600 и 700 °C, можно представить в виде разветвленных полиенов, т.е. полимерных фрагментов, содержащих как цепочку чередующихся одиночных и двойных углеродуглеродных связей, так и боковые группы. В совокупности с результатами рентгеновской дифракции эти данные позволяют утверждать, что полиеновая субструктура существует в виде отдельной фазы как в неотожженных, так и в отожженных образцах. Таким образом, отжиг приводит к перестройке структуры на основе *sp*-углерода в аморфную графитоподобную пленку, содержащую включения на основе полиенов. Уменьшение интенсивности пиков при 1187 см⁻¹ и 1505 см⁻¹ для образца, отожженного при температуре 700 °C, свидетельствует об уменьшении доли цепочечной полиеновой субструктуры в его фазовом составе. Помимо этого, для данного образца наблюдается упорядочение графитовой структуры. Для образца, отожженного при температуре 800 °C, происходит дальнейшее уменьшение доли полиеновой фазы. При этом положение КР-линии на 1100 см⁻¹, наблюдавшееся для данного образца, характерно для полимеров, содержащих значительное число сшивок [60]. Таким образом, при температуре 800 °C наблюдается существенная деградация структуры.

3.2. Эмиссионные свойства

Вольтамперограммы, полученные в результате измерения эмиссионных характеристик отожженных образцов, представлены на рис. 6*a*. Образцы, отоженные при температурах менее 600 °C, а также неотожженный образец не проявили выраженных эмиссионных свойств. Полученные данные позволили определить порог активации эмиссии, соответствующий напряженности поля, при которой ток эмиссии составляет 0.10 ± 0.05 мкA/см². Для



Рис. 6. а) Вольтамперограммы структур, полученных при различных температурах отжига. Представлены значения пороговых полей активации эмиссии Е_{ПА}, измеренные при плотности тока 0.10 ± 0.05 мкА/см²; б) ВАХ структур, отожженных при различных температурах, в координатах Фаулера-Нордгейма. в) ВАХ структур, отожженных при различных температурах, в координатах Шоттки. На рис. б, в точки, расположенные ниже порога детектирования 0.1 мкА/см², не представлены

структур, отожженных при температурах 600, 700 и 800 °C, пороговое поле включения эмиссии оказалось равно соответственно 0.6, 0.3 и 1.5 В/мкм. Из литературных данных следует, что характерные значения порогового поля включения эмиссии для эмиттеров на основе углеродных волокон составляют 13–30 В/мкм [61], но для наноострий на основе аморфного углерода данное значение может снижаться и до 1.6 В/мкм [62]. Для углеродных нанотрубок поле активации эмиссии составляет 0.5–3 В/мкм [63], при этом введение металлических включений может снижать его вплоть до 0.13-0.14 В/мкм [64]. Сравнение полученных нами данных с результатами других работ осложнено тем, что порог эмиссии может наблюдаться при различающихся на порядки значениях плотности тока, а в ряде случаев значения тока не пересчитываются авторами в удельные величины. Однако диапазон характерных полей, приведенный в работе [65], позволяет утверждать, что достигнутое значение полей включения эмиссии ниже 1.0-1.5 В/мкм свидетельствует о том, что порог активации эмиссии термически обработанного дегидрогалогенированного ПВДФ достаточно низок по сравнению со схожими структурами.

Согласно полученным данным, наилучшие эмиссионные характеристики показывает образец, отожженный при температуре 700 °С. Эти данные находятся в соответствии с результатами анализа структуры образцов: согласно результатам КРспектроскопии, в данном образце содержатся наиболее упорядоченные кристаллиты графитовой компоненты, а также присутствует фаза на основе разветвленных полиенов. По-видимому, хорошие эмиссионные характеристики обусловлены тем, что графитовая фаза обеспечивает транспорт электронов к низкопроводящим полиеновым фрагментам. В свою очередь, полимерная фаза имеет низкий порог эмиссии, что и обеспечивает эффективную эмиссию электронов в вакуум [66]. Схожая модель, подразумевающая, что электронная эмиссия осуществляется благодаря инжекции электронов из проводящей субструктуры и их последующей эмиссии из субструктуры с низкой работой выхода, была описана для композита, сочетающего алмазную и графитовую фазы [67]. Такая модель позволяет описать и то, что для неотожженного образца, а также для образцов, отжиг которых осуществлялся при низких температурах, эмиссия не наблюдалась: по-видимому, высокое электросопротивление *sp*-углерода [68] не позволяет осуществить электронный транспорт и инжектировать электроны в эмитирующую субструктуру. Для исследованных в настоящей работе образцов существенное увеличение порога эмиссии наблюдалось при увеличении температуры отжига до 800 °C. По-видимому, это связано с деградацией полиеновой субструктуры, проявляющейся в образовании сшивок, а также с разупорядочением графитовой субструктуры, обеспечивающей

электронный транспорт.

В работах [61-65], посвященных эмиссии наноструктурированных углеродных материалов, эмиссия описывалась при помощи туннельного механизма. Описание эмиссии с помощью туннельного эффекта показывает, что плотность туннельного тока зависит от напряженности поля по закону Фаулера-Нордгейма. В таком случае ВАХ спрямляется в координатах $(1/E; \ln(j/E^2))$ [69]. На рис. 6б показано, что в нашем случае зависимость хорошо спрямляется в данных координатах. Однако вычисление работы выхода из коэффициентов линейной аппроксимации данной зависимости дает значение 0.007-0.014 эВ. В свою очередь, оценки соотношения площади эмитирующей поверхности к полной площади катода, проведенные с использованием данных коэффициентов, показывают значения 10^{-8} – 10^{-13} . В то же время, известно, что величина работы выхода для углеродных материалов обычно лежит в диапазоне 4.3–5 эВ [17], хотя в рамках данной оценки на ее величину могут оказывать влияние и геометрические параметры структуры [70]. Критика подходов к интерпретации низкой работы выхода образцов на основе аморфного углерода [71], а также наличие эффектов, которые могут быть связаны с композитной структурой образца, приводят к необходимости поиска механизмов эмиссии, не ограничивающихся туннельным эффектом. То, что получаемые в рамках модели Фаулера-Нордгейма значения нереалистичны, отмечено и в работах [72,73]. В обзоре [73] показано, что отсутствие физического смысла значений работы выхода и площади эмитирующей поверхности может быть связано с влиянием дополнительных механизмов на эмиссионные свойства материала. Такие механизмы включают в себя локальный разогрев эмитирующих областей, индуцированный электронным транспортом через них, который может приводить к инициации термоэмиссионного механизма эмиссии. Вклад термоэлектронной эмиссии, позволяющий объяснить результаты аппроксимации ВАХ в координатах Фаулера-Нордгейма, был выявлен для островковых углеродных пленок [74]. В статье [18], в свою очередь, показано, что для углеродных спиралевидных структур, для которых вследствие слабого отвода тепла ярко проявляется резистивный нагрев, эмиссионная характеристика спрямляется в координатах Шоттки. В нашем случае полиеновые фрагменты, плохо проводящие тепло, могут нагреваться схожим образом.

На рис. 66 приведено спрямление ВАХ в координатах Шоттки ($\sqrt{E}, \ln(j)$). Как для модели Фаулера–Нордгейма, так и для модели Шоттки зависимости хорошо спрямляются в соответствующих им координатах. Предположение о вкладе термоэмиссии, индуцированной локальным нагревом полиеновых фрагментов, подтверждается тем, что измерение ВАХ для исследуемых образцов возможно лишь в малом диапазоне плотностей токов: при продолжительном воздействии на образцы полей, вызывающих токи плотностью выше 2 мкA/см², наблюдается дестабилизация ВАХ, сопряженная с деградацией образцов. В работах [22,23] показано, что на эмиссию углеродных структур также могут оказывать влияние как описанные выше механизмы, так и ограничение тока пространственным зарядом, а также эффект Пула-Френкеля. Таким образом, электронная эмиссия в исследуемых материалах может быть обусловлена совокупностью различных механизмов, однако вклад термоэмиссии для полиеновой эмитирующей субструктуры, по-видимому, приводит к ее деградации и ограничению рабочего диапазона токов эмиссии.

3.3. Заключение

В работе были исследованы материалы, изготовленные путем отжига дегидрогалогенированных пористых ПВДФ-мембран при температурах 600-800 °С. Рентгеноструктурный анализ показал, что в неотожженной пленке присутствуют кристаллиты остаточного ПВДФ, а также субструктура, которая соответствует насыщенному дефектами полимеру с большими межплоскостными расстояниями 7.3-7.5 Å, 4.4-4.5 Å. При отжиге наблюдается уширение пиков, а также исчезновение максимумов, соответствующих кристаллитам ПВДФ. Данные ИК-спектроскопии свидетельствуют о том, что в структуре образцов присутствуют главным образом углерод-углеродные и углерод-водородные связи. Отжиг образцов привел к графитизации структур, сопряженной с перестройкой тройных углерод-углеродных связей. Согласно данным КРспектроскопии, образец, синтезированный при температуре отжига 600 °C, состоит из разупорядоченного графита, в котором содержатся включения на основе разветвленных полиенов. Повышение температуры отжига до 700 °C приводит к уменьшению доли полиеновой фазы и упорядочению графитовой компоненты. При температуре 800 °С в цепочечной фазе образуются сшивки, а графитовая фаза снова разупорядочивается.

Отожженные образцы показывают низкое значение поля активации эмиссии, которое составляет 0.3–1.5 В/мкм. Хорошие эмиссионные характеристики образцов обусловлены их композитной структурой, в которой транспорт электронов обеспечивается графитовой субструктурой, а эмиссия — субструктурой на основе полиенов с низкой работой выхода. Наилучшие эмиссионные характеристики наблюдались для образца, отожженного при температуре 700 °C. Низкий порог активации эмиссии для данного образца обусловлен повышением упорядоченности графитовой субструктуры. Эмиссия изготовленных структур происходит как за счет туннельного механизма, так и за счет термоэлектронного эффекта. При этом термоэлектронная эмиссия инициируется локальным нагревом эмитирующих полиеновых кластеров в процессе электронного транспорта, однако вследствие деградации их свойств максимальный зарегистрированный ток эмиссии ограничен 2 мкA/см².

Благодарности. Авторы выражают благодарность В. В. Хвостову за плодотворные обсуждения.

Финансирование. Исследование выполнено в рамках Программы развития Междисциплинарной научно-образовательной школы Московского университета «Фотонные и квантовые технологии. Цифровая медицина».

ЛИТЕРАТУРА

- D. M Trucchi and N. A. Melosh, MRS Bulletin 42, 488 (2017).
- В. И. Шестеркин, Радиотехника и Электроника 65, 3 (2020).
- 3. M. Krysztof, Microsyst. Nanoeng. 7, 1 (2021).
- 4. N Dwivedi, C. Dhand, J. D. Carey et al., J. Mater. Chem. C 9, 2620 (2021).
- Q. Zhao, C.-K. Huang, R. Zhu et al., Solid State Commun. 151, 1650 (2011).
- S. Kumon, N. Shimoi, in Proceed. of the International Display Workshops (Sendai, Japan, 2017), International Display Workshops 2 (2017), p. 1292.
- M. Turchetti, Y. Yang, M. R. Bionta et al., 34th International Vacuum Nanoelectronics Conference (IVNC) (2021), p. 1.
- R. Bhattacharya, M. Turchetti, P. D. Keathley et al., J. Vac. Sci. Technol. B 39, 053201 (2021).
- X. Wei, Q. Chen, and L.-M. Peng, MRS Bull. 42, 493 (2017).

- T. A. J. Loh, Y. J. Ooi, and D. H. C. Chua, Sci. Rep. 9, 3672 (2019).
- T. Iwamatsu, A. Tsutsui, and H. Yamaji, Appl. Phys. Lett. **114**, 053511 (2019).
- 12. S. Nirantar, T. Ahmed, G. Ren et al., Nano Lett. 18, 7478 (2018).
- 13. G. S. Bocharov and A. V. Eletskii, Fuller. Nanotub. Car. N. 20, 444 (2012).
- Y. Mo, Doctor of Philosophy Dissertation, University of North Texas, Denton, Texas, USA (2014), ark:/67531/metadc500202.
- 15. А. В. Архипов, Н. М. Гнучев, С. И. Крель, Науч.техн. вед. СПбГУ. Физ.-мат. науки 4, 98 (2012).
- 16. Г. Ё. Соминский, В. Е. Сезонов, Д. А. Саксеев и др., ЖТФ 81, 104 (2011).
- Г. Н. Фурсей, М. А. Поляков, Н. Т. Баграев и др., Поверхность 9, 28 (2019).
- E. Einarsson, D. W. Tuggle, and J. Jiao, Appl. Phys. A 79, 2049 (2004).
- 19. A. Haque and J. Narayan, Diam. Rel. Mat. 86, 71 (2018).
- 20. A. L. Musatov, N. A. Kiselev, D. N. Zakharov et al., App. Surf. Sci. 183, 111 (2001).
- 21. А. В. Архипов, П. Г. Габдуллин, Н. М. Гнучев и др., Письма в ЖТФ 40, 58 (2014).
- 22. P. W. May, S. Höhn, W. N. Wang et al., Appl. Phys. Lett. 72, 2182 (1998).
- 23. N. Hu, Y. Wang, J. Li, Q. Wei et al., Surf. Coat. Technol. 359, 459 (2019).
- 24. Е. О. Попов, А. Г. Колосько, М. А. Чумак и др., ЖТФ 89, 1615 (2019).
- **25**. Б. В. Стеценко, ЖТФ **81**, 152 (2011).
- 26. L. Chen, Z. Ji, Y. Mi et al., Phys. Scr. 82, 035602 (2010).
- 27. Yu. P. Kudryavtsev, S. E. Evsyukov, V. G. Babaev et al., Carbon 30, 213 (1992).
- 28. S. E. Evsyukov, in Carbyne and Carbynoid Structures, Edited by R. B. Heimann, S. E. Evsyukov, and L. Kavan, Dordrecht, Springer Netherlands (1999), p. 55.
- 29. B. A. Newman, C. H. Yoon, K. D. Pae et al., J. Appl. Phys. 50, 6095 (1979).

- 30. P. Robin, J. P. Pouget, R. Comes et al., Polymer 24 1558 (1983).
- C. Riekel, H. W. Hässlin, K. Menke et al., Synth. Met. 10, 31 (1984).
- 32. H. W. Hässlin, C. Riekel, K. Menke et al., Makromol. Chem. 185, 397 (1984).
- 33. V. E. Zhivulin, L. A. Pesin, E. A. Belenkov et al., Polym. Degrad. Stab. 172, 109059 (2020).
- 34. И. А. Завидовский, О. А. Стрелецкий, О. Ю. Нищак и др., ЖТФ 90, 149 (2020).
- I. Bodrikov, E. Y. Titov, A. Vasiliev et al., Plasma Process. Polym., e2200008 (2022).
- 36. V. Tucureanu, A. Matei, and A. M. Avram, Crit. rev. anal. chem. 46, 502 (2016).
- 37. O. A. Streletskiy, O. Y. Nishchak, I. A. Zavidovskiy et al., Thin Solid Films 739, 138993 (2021).
- 38. Y. Peng and P. Wu, Polymer 45, 5295 (2004).
- 39. X. Wang, G. Shi, and Y. Liang, J. Electroanal. Chem. 470, 95 (1999).
- 40. D. Olmos, E. V. Martín, and J. González-Benito, Phys. Chem. Chem. Phys. 16, 24339 (2014).
- 41. C. C. Ersanli, G. Kaya Kantar, and S. Şaşmaz, J. Mol. Struct. 1143, 318 (2017).
- 42. A. Siddekha, A. Nizam, and M. A. Pasha, Spectrochim. Acta A Mol. Biomol. Spectrosc 81, 431 (2011).
- 43. F. Cataldo, Polym. Int. 44, 191 (1997).
- 44. I. A. Zavidovskiy, O. A. Streletskiy, O. Yu. Nishchak et al., Thin Solid Films **738**, 138966 (2021).
- 45. B. Pan, J. Xiao, J. Li et al., Sci. Adv. 1, e1500857 (2015).
- 46. M. Rybachuk and J.M. Bell, Carbon 47, 2481 (2009).
- 47. A. Rabia, F. Tumino, A. Milani et al., Nanoscale 11, 18191 (2019).
- 48. L. Ravagnan, F. Siviero, C. Lenardi et al., Phys. Rev. Lett. 89, 285506 (2002).
- 49. В. Г. Бабаев, М. Б. Гусева, Н. Ф. Савченко и др., Поверхность 6 100 (2005).
- A. Milani, M. Tommasini, V. Russo et al., Beilstein J. Nanotechnol. 6, 480 (2015).
- 51. H. Tabata, M. Fujii, S. Hayashi et al., Carbon 44, 3168 (2006).
- 52. A. C. Ferrari and J. Robertson, Phys. Rev. B 61, 14095 (2000).

- 53. И. А. Завидовский, О. А. Стрелецкий, О. Ю. Нищак и др., ЖТФ 90, 489 (2020).
- 54. X.-M. Tang, J. Weber, Y. Baer et al., Phys. Rev. B 48, 10124 (1993).
- 55. S. S. Roy, R. McCann, P. Papakonstantinou et al., Thin Solid Films 482, 145 (2005).
- 56. S. Peter, M. Gúnther, O. Gordan et al., Diam. Rel. Mater 45, 43 (2014).
- 57. A. C. Ferrari and J. Robertson, Phys. Rev. B 63, 121405 (2001).
- E. Mullazzi, G. P. Brivio, E. Faulques et al., Solid State Commun. 46, 851 (1983).
- 59. I. Harada, Y. Furukawa, M. Tasumi et al., J. Chem. Phys. 73, 4746 (2008).
- 60. T.L. Rapp, W. K. Kowalchyk, K. L. Davis et al., Anal. Chem. 64, 2434 (1992).
- V. I. Merkulov, D. H. Lowndes, L. R. Baylor et al., Solid-State Electron. 45, 949 (2001).
- 62. C. J. Huang, Y. K. Chih, J. Hwang et al., J. Appl. Phys. 94, 6796 (2003).
- 63. D. Varshney, A. V. Sumant, B. R. Weiner et al., Diam. Rel. Mater. 30, 42 (2012).

- 64. S. Sridhar, C. Tiwary, S. Vinod et al., ASC Nano 8, 7763 (2014).
- J.-M. Bonard, F. Maier, T. Stóckli et al., Ultramicroscopy 73, 7 (1998).
- 66. I. Musa, D. a. I. Munindrasdasa, G. a. J. Amaratunga et al., Nature 395, 362 (1998).
- 67. V. Ralchenko, A. Karabutov, I. Vlasov et al., Diamond and Related Materials 8, 1496 (1999).
- 68. O. A. Streletskiy, I. A. Zavidovskiy, O. Yu. Nischak et al., Thin Solid Films 671, 31 (2019).
- 69. B. S. Satyanarayana, A. Hart, W. I. Milne et al., Appl. Phys. Lett. 71, 1430 (1998).
- 70. J. Li, W. Zheng, C. Gu et al., Carbon 42, 2309 (2004).
- 71. R. G. Forbes and J. P. Xanthakis, Surf. Interface Anal. 39, 139 (2007).
- 72. G. A. J. Amaratunga and S. R. P. Silva, Appl. Phys. Lett. 68, 2529 (1996).
- **73**. Е. Д. Эйдельман, А. В. Архипов, УФН **190**, 693 (2020).
- 74. A. Andronov, E. Budylina, P. Shkitun et al., J. Vac. Sci. Technol. B 36, 02C108 (2018).

МОЛЕКУЛЯРНО-ПУЧКОВАЯ ЭПИТАКСИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК *h*-GaTe/*m*-GaTe НА ПОДЛОЖКАХ GaAs (001): СТРУКТУРНЫЕ И ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА

С.В. Сорокин^{а*}, И.В. Седова^a, П.С. Авдиенко^a, Д.Д. Фирсов^b, О.С. Комков^{b,a},

А.И. Галимов^а, М.А. Яговкина^а, М.В. Рахлин^а

^а Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук 194021, Санкт-Петербург, Россия

^b Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» 197376, Санкт-Петербург, Россия

> Поступила в редакцию 1 сентября 2022 г., после переработки 1 сентября 2022 г. Принята к публикации 1 октября 2022 г.

Тонкие пленки GaTe выращены методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) на подложках GaAs (001). Методом рентгеновской дифрактометрии подтверждено сосуществование фаз h- и m-GaTe во всех выращенных слоях. Установлена количественная корреляция между условиями МПЭ и фазовым составом формируемых пленок. Экспериментально определен верхний предел температуры МПЭ при выращивании слоев GaTe/GaAs (001). Приведены новые данные, подтверждающие дефектную природу широкой полосы излучения с максимумом $E \sim 1.45$ -1.46 эВ, доминирующей в спектрах низкотемпературной фотолюминесценции слоев GaTe/GaAs (001).

DOI: 10.31857/S0044451022120094 **EDN:** LDEOTR

1. ВВЕДЕНИЕ

Развитие методов выращивания слоистых полупроводников по-прежнему остается в фокусе внимания научного сообщества в связи с их потенциалом для разработки и создания полупроводниковых устройств нового поколения. Свойства слоистых полупроводников могут сильно видоизменяться при уменьшении толщины слоя с возможностью перестройки зонной структуры в монослойном пределе [1], что обеспечивает исследователям дополнительную степень свободы при разработке оптоэлектронных приборов. На сегодняшний день большинство слоев соединений А^{III}В^{VI} и гетероструктур на их основе изготавливают либо методом механической эксфолиации (отслоения) от объемных кристаллов, либо выращивают методами химического (физического) газового транспорта (CVT, PVT) или

химического осаждения из газовой фазы (CVD) [2]. Тем не менее, существует целый ряд публикаций, в которых слои соединений A^{III}B^{VI} были выращены методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ), т. е. методом, потенциально позволяющим изготавливать гетероструктуры на основе слоистых соединений в масштабе пластин большого диаметра [2–6].

Одним из перспективных материалов для создания высокочувствительных фотоприемников, полевых транзисторов, солнечных элементов и термоэлектрических устройств [7–9] является моноклинный теллурид галлия (*m*-GaTe), который относится к группе слоистых монохалькогенидов металлов группы IIIA (соединений типа А^{III}В^{VI}) и является прямозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны, лежащей в красном диапазоне длин волн ($E_q \approx 1.7$ эВ при T = 300 K). Как и другие слоистые полупроводники А^{III}В^{VI}, GaTe состоит из вертикально упорядоченных тетраслоев (ТС) толщиной ~ 8 Å, связанных друг с другом слабыми силами Ван-дер-Ваальса, при этом каждый ТС содержит четыре ковалентно-связанных атомных плоскости в последовательности Те-Ga-Ga-Te. Отличи-

ÉE-mail: sorokin@beam.ioffe.ru

тельной особенностью GaTe является возможность кристаллизоваться в двух фазах: термодинамически устойчивой моноклинной структуре (*m*-GaTe) (точечная группа симметрии C2/m) и метастабильной гексагональной структуре (h-GaTe) (точечная группа симметрии P63/mmc), которая обычно наблюдается в ультратонких слоях [10, 11]. Более того, обе кристаллические структуры могут сосуществовать одновременно, а также и переходить одна в другую [6, 10–12]. В h-GaTe TC укладываются вдоль направления оси c, как и в случае GaSe или InSe [5]. Напротив, *m*-GaTe имеет деформированную структуру TC, в котором каждый слой имеет два варианта ориентации связи Ga-Ga: две трети из них ориентированы перпендикулярно слою, а оставшаяся треть лежит почти в плоскости слоя [2, 10]. В результате *m*-GaTe является сильно анизотропным материалом с низкой пространственной симметрией.

В отличие от моноклинного *m*-GaTe, метастабильный h-GaTe является гораздо менее изученным материалом. В частности, до сих пор не существует единого мнения относительно значения ширины запрещенной зоны (E_q) данного соединения. Так, теоретические расчеты из первых принципов, проведенные в работе [12], предсказывают, что как объемные кристаллы, так и пленки h-GaTe толщиной вплоть до одного ТС должны иметь непрямую структуру зон [7]. Однако в ряде других работ отмечается, что структурные различия между объемными фазами h- и m-GaTe незначительны; при этом на основании экспериментальных данных утверждается, что гексагональный h-GaTe — это прямозонный полупроводник с E_g в диапазоне 1.6-1.8 эВ при Т=300 К [13, 14]. С другой стороны, в относительно недавней работе [6] широкая линия излучения с энергией ~1.46 эВ, наблюдаемая в спектрах фотолюминесценции (ФЛ) тонких пленок GaTe, выращенных методом МПЭ, была интерпретирована, как связанная с около-краевым излучением в *h*-GaTe.

Настоящая работа посвящена исследованию структурных и оптических свойств тонких пленок GaTe, выращенных методом МПЭ на подложках GaAs (001). Подтверждено сосуществование обеих фаз h- и m-GaTe во всех выращенных слоях и определена максимальная температура роста методом МПЭ в системе GaTe/GaAs (001). В работе также представлены новые данные, подтверждающие дефектную природу широкой линии излучения, доминирующей в низкотемпературных спектрах ФЛ выращенных слоев, с максимумом вблизи ~1.45–1.46 эВ.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

Слои GaTe были выращены на подготовленных для эпитаксии ("epi-ready") подложках GaAs (001) при температуре подложки (T_S) в диапазоне 450-550°С с использованием двухкамерной установки МПЭ (SemiTEq, Россия). В качестве источников молекулярных пучков использовались стандартные эффузионные ячейки Ga и Te. Интенсивности потоков определялись посредством измерения эквивалентных давлений в пучках (BEPs — beam equivalent pressures) в положении подложки ионизационным датчиком Байярда-Альперта. Все слои были выращены в условиях слабого обогащения поверхности роста Те: соотношение интенсивностей потоков Te/Ga (BEP) изменялось от 10 до 18 при повышении T_S от 450 до 550°С, соответственно. Рост слоев GaTe инициировался одновременным открытием заслонок Те и Ga на поверхности буферного слоя GaAs толщиной ~ 200 нм, выращенного в отдельной ростовой камере $\mathbf{A}^{\mathrm{III}}\mathbf{B}^{\mathrm{V}},$ и переданного в камеру роста соединений А^{III}В^{VI} через высокий вакуум. Средняя скорость роста (R) всех выращенных слоев GaTe составила 1.5–1.8 нм/мин.

Для контроля *in situ* процесса МПЭ применялся метод дифракции быстрых электронов на отражение (ДБЭО). Исследование структурных свойств выращенных слоев GaTe/GaAs(001) проводилось методом порошковой рентгеновской дифрактометрии (РД) (дифрактометр D2 Phaser). Для измерения фотолюминесценции слоев GaTe/GaAs была задействована экспериментальная установка на базе ИК фурье-спектрометра Vertex 80, описанная в работе [15]. В качестве источника возбуждения использовался фиолетовый диодный лазер SSP-DHS-405 с длиной волны 405 нм. При этом диаметр возбужденной области на образцах достигал нескольких миллиметров, т.е. был значительно больше среднего размера доменов в слоях GaTe. Спектр микро-ФЛ был измерен в проточном гелиевом криостате ST-500-Attocube при T = 8 К при возбуждении лазерным излучением с длиной волны $\lambda = 405$ нм (лазер CUBE, Coherent). Диаметр возбужденной области на образце и спектральное разрешение составили ~ 12 мкм и ~ 80 мкэВ, соответственно. Так как при хранении теллурида галлия в условиях окружающей среды наблюдается постепенная деградация его оптических и структурных свойств за счет окисления [16], в настоящей работе измерения РД и ФЛ проводились на только что выращенных или хранившихся в вакууме образцах.

Образец	T_S , °C	$P_{Te}/P_{Ga}(\text{BEP})$	P_{Ga} (BEP), Topp	R, нм/мин	d, нм
S1	450	11	$4 \cdot 10^{-8}$	~ 1.5	~ 270
$S2^*$	520 (144 нм)	16	$4.3 \cdot 10^{-8}$	~ 1.8	~ 250
	545 (106 hm)				
S3	530	15	$5 \cdot 10^{-8}$	~ 1.8	~ 200
S4	550	18	$4.5 \cdot 10^{-8}$	~ 1.8	~ 210

Таблица. Параметры МПЭ и толщины слоев GaTe/GaAs (001)

*2-stage growth mode.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Параметры МПЭ (температура роста T_S , интенсивность потока Ga (P_{Ga}), соотношение эквивалентных давлений в пучках P_{Te}/P_{Ga}), а также средние значения скоростей роста (R) и толщин (d) выращенных слоев GaTe/GaAs (001) представлены в Таблице.

Как отмечалось ранее, слои GaTe могут кристаллизоваться как в термодинамически стабильной моноклинной фазе (*m*-GaTe), так и метастабильной гексагональной фазе (h-GaTe), которая может переходить в *m*-GaTe при увеличении толщины слоя и/или температуры [4, 10, 12]. Анализ кривых РД подтверждает сосуществование фаз *h*и *m*-GaTe во всех выращенных слоях GaTe/GaAs (001) (рис. 1(a)). На рис. 1(a) кривые РД нормированы на интенсивность пика (-420) *m*-GaTe. Наиболее интенсивный пик, связанный с гексагональной фазой *h*-GaTe ($\sim 21.4^{\circ}$), наблюдается в образце S1, выращенном при наиболее низкой $T_S = 450^{\circ}$ C. В то же время этот пик практически отсутствует в образце S4, выращенном при наиболее высокой $T_S = 550$ °С. На рис. 1(b) представлена зависимость отношения интенсивностей пиков РД (004) h-GaTe и (-420) *m*-GaTe от температуры осаждения слоев GaTe/GaAs (001). Черная штриховая линия на рис. 1(b), аппроксимирующая эту зависимость, проведена для наглядности. Несмотря на некоторые различия в толщине слоев, зависимость носит ярко выраженный экспоненциальный характер. Из зависимости следует, что в образце S4 содержание гексагональной фазы более чем на два порядка по величине меньше, чем в образце S1. Полученный результат подтверждает ранее установленный факт, что именно температура роста является ключевым фактором для фазового контроля слоев GaTe [11, 12]. Чем выше температура осаждения слоя, тем меньше содержание в нем гексагональной фазы h-GaTe. Образец S2, выращенный в двухстадийном режиме МПЭ, представлен на зависимости рис. 1(b) температурой начальной стадии эпитаксиального роста (первые 144 нм GaTe были выращены при $T_S = 520^{\circ}$ C), так как именно продолжительная фаза низкотемпературного роста определяет высокое содержание фазы h-GaTe в этом слое. Это утверждение хорошо согласуется с эволюцией картин ДБЭО образца S2 в процессе МПЭ. Яркость картины ДБЭО постепенно уменьшается по мере роста слоя, при этом полосчатые рефлексы утолщаются и становятся более размытыми. После осаждения ~ 144 нм GaTe температура роста в образце S2 была увеличена до $T_S = 545^{\circ}$ С, при этом дифракционная картина практически не изменилась до самого конца процесса МПЭ. В то же время при выращивании слоев GaTe при более высоких температурах МПЭ (образцы S3, S4) яркость картин ДБЭО сохранялась от начала и до конца процесса эпитаксиального роста [8].

Из-за высокой скорости переиспарения GaTe и, соответственно, проблем с нуклеацией GaTe на поверхности GaAs, нам не удалось вырастить слои GaTe при еще более высоких температурах $(T_S > 550^{\circ}C)$ для выбранной интенсивности потока Ga. Стоит подчеркнуть, что отсутствие зародышеобразования при высоких температурах подложки весьма характерно для роста и других слоистых материалов в режиме эпитаксии Ван-дер-Ваальса [5, 17].

Низкотемпературные (T=11 K) спектры ФЛ слоев GaTe/GaAs (001), выращенных при $T_S > 520^{\circ}$ C (образцы S2, S3 и S4), измеренные при плотности мощности возбуждения $\rho_{exc} = 0.5$ BT/см², представлены на рис. 2(а). В спектрах ФЛ наблюдаются четыре ярко выраженные полосы излучения, максимумы которых соответствуют ~ 1.72–1.77, 1.57, 1.45 и 1.25 эВ. Широкая полоса излучения с E > 1.7 эВ, расположенная вблизи края фундаментального поглощения *m*-GaTe, связана как с рекомбинацией свободных и локализованных на примесях экситонов в



Рис. 1. (а) Кривые РД слоев GaTe/GaAs (001), выращенных при различных температурах T_S . Кривые нормированы на интенсивность пика (-420) *m*-GaTe. (b) Зависимость отношения интенсивностей пиков (004) *h*-GaTe и (-420) *m*-GaTe от температуры осаждения слоя GaTe/GaAs (001)



Рис. 2. (а) Спектры ФЛ слоев GaTe/GaAs (001), выращенных при различных температурах T_S . (b) Температурная зависимость спектров ФЛ для образца S2. Черными точками отмечены положения максимумов доминирующей полосы излучения



Рис. 3. (а) Спектры ФЛ при различных плотностях мощности возбуждения для образца S2. (b) Зависимость интегральной интенсивности двух полос ФЛ (~ 1.76 эВ и ~ 1.45 эВ) от плотности мощности возбуждения для образца S2

m-GaTe, так и с переходами из свободного состояния в связанное (free-to-bound — FB) [18]. В этом случае заметный коротковолновый сдвиг максимума $\Phi \Pi$, а также увеличение интегральной интенсивности этой полосы $\Phi \Pi$ при увеличении температуры эпитаксиального роста вызваны возрастанием вклада рекомбинации свободных и связанных на донорах экситонов в $\Phi \Pi$ за счет уменьшения плотности структурных дефектов в слоях GaTe. При этом важно подчеркнуть, что в спектрах $\Phi \Pi$ (рис. 2(a)) мы наблюдаем широкую полосу излучения вместо набора отдельных линий в связи с большой площадью области возбуждения на образце (несколько квадратных миллиметров).

Слабая широкая полоса излучения с E = 1.57 эВ вызвана рекомбинацией донорно-акцепторных пар в GaTe (DAP) [18, 19], в то время как полоса с энергией E = 1.25 эВ ранее была атрибутирована нами, как связанная с излучением вакансионных Ga комплексов в GaAs, поскольку она наблюдалась и в спектре ФЛ "чистой" подложки GaAs без осажденного на ней слоя GaTe [5]. Тем не менее, весьма вероятно, что эта полоса ФЛ может быть связана с излучением еще не определенных дефектных комплексов в слоях GaTe. Широкая полоса излучения с максимумом $E \sim 1.45$ эВ доминирует в спектрах ФЛ всех



Рис. 4. Спектр микро-ФЛ слоя $m\text{-}\mathsf{GaTe}/\mathsf{GaAs}$ (001) (образец S2) измеренный при $\rho_{exc}\approx 8.8~\mathrm{Bt/cm^2}$ (T=8К). Диаметр возбужденной области на образце составлял $\sim 12~\mathrm{mkm}$, а спектральное разрешение $\sim 80~\mathrm{mksB}$

выращенных образцов (рис. 2(a)). Эта полоса излучения не связана с излучением из подложки GaAs,

так как узкий пик ФЛ от подложки отчетливо наблюдается на коротковолновой стороне этой полосы излучения при большей плотности возбуждения $\rho_{exc} = 2.5 \text{ Bt/cm}^2$ (T = 11 K, образец S2) (см. рис. 2(b)). Из сопоставления данных РД и измеренных спектров ФЛ следует, что при уменьшении содержания фазы h-GaTe в исследуемых образцах (S2, S3 и S4) интенсивность $\Phi \Pi$ (I_{PL}) полосы 1.45 эВ изменяется незначительно. Это служит указанием того, что эта полоса излучения не связана с околокраевым излучением в *h*-GaTe. Более того, спектры $\Phi \Pi$ образца S2, измеренные в диапазоне T = 11-140 К (рис. 2(b)), показывают, что интенсивность экситонной ФЛ в *m*-GaTe быстро спадает с увеличением температуры и полностью исчезает уже при $T \sim 60 \text{ K}$, в то время как полоса излучения с энергией ~ 1.45 эВ продолжает доминировать в спектрах $\Phi \Pi$ вплоть до T = 140 К. При этом температурная зависимость энергетического положения максимума этой полосы носит немонотонный S-образный характер, что характерно для локализованных или связанных с дефектами состояний.

Важно отметить, что в спектре ФЛ образца S1, выращенного при наиболее низкой $T_S = 450^{\circ}$ С, наблюдаются только две очень слабые по интенсивности полосы ФЛ с максимумами ~ 1.45 и 1.25 эВ, причем в спектре ФЛ доминирует именно полоса с E = 1.25 эВ, несмотря на значительное содержание фазы h-GaTe в данном образце. При этом отсутствие полосы излучения с E > 1.7 эВ в образце S1, по всей видимости, связано с низкой температурой эпитаксиального роста, и, соответственно, высокой плотностью структурных дефектов в слое GaTe. Эти наблюдения также дают дополнительные аргументы в пользу того, что полоса ФЛ с энергией ~ 1.45 эВ определяется излучением центров, связанных с дефектами.

Спектры ФЛ для образца S2, измеренные при различной плотности мощности возбуждения, а также зависимости интенсивности интегральной ФЛ для двух полос излучения с энергией $E \sim 1.76$ эВ и $E \sim 1.45$ эВ от плотности мощности возбуждения приведены на рис. 3(а) и рис. 3(b), соответственно. Интенсивность I_{PL} обеих полос демонстрирует сублинейную зависимость от плотности мощности возбуждения с показателем степени k < 1, что указывает на канал рекомбинации с участием дефектов/примесей [20]. Однако в случае слоистых материалов сублинейная степенная зависимость со значениями k < 1 наблюдалась ранее также и для экситонных состояний [21, 22]. Из рис. 3(b) следует, что для полосы ФЛ с E = 1.45 эВ значение показателя степени k = 0.87 оказывается больше, чем для полосы, связанной с экситонными переходами (k = 0.8). Полученные данные хорошо согласуются с работой [23], в которой было экспериментально показано, что степенные коэффициенты для переходов FB из свободного состояния в связанное и переходов DAP могут быть близки к степенным коэффициентам для экситонной рекомбинации.

При уменьшении области возбуждения и увеличении спектрального разрешения (применение метода микро-ФЛ) полоса излучения с энергией E = 1.45 эВ разбивается на набор узких линий, что хорошо коррелирует с атрибуцией этой полосы $\Phi \Pi$, как связанной с рекомбинацией на структурных дефектах в GaTe (зона DEF на рис. 4). Также стоит отметить, что пик $\Phi \Pi$ с близкой энергией (~ 1.47 эВ при T = 4 K) наблюдали ранее в спектрах $\Phi \Pi \phi$ лейков GaTe, синтезированных методом PVT на подложках сапфира [24]. При этом было установлено, что этот пик ФЛ не связан с межзонными переходами второй фазы, а наблюдается только на краях доменов. Соответственно, было высказано предположение, что пик $\Phi\Pi$ с $E \sim 1.47$ эВ связан с излучением эмиссионных центров, локализованных на краях отдельных доменов. Эта интерпретация хорошо соответствует и нашим экспериментальным данным. Высокая плотность структурных дефектов в растущей пленке, возможность образования латеральных гетерофазных h/m гомопереходов и, соответственно, образования доменных границ из-за наличия во всех выращенных слоях GaTe включений фазы h-GaTe, а также большая площадь области возбуждения на образце хорошо согласуется с тем, что интенсивность полосы $\Phi\Pi$ с $E \sim 1.45$ эВ достаточно слабо изменяется от образца к образцу, и эта полоса доминирует в спектрах ФЛ. Также важно отметить, что пики с энергией в этом диапазоне не наблюдаются в спектрах ФЛ слоев GaTe, синтезированных методом Бриджмена (см., например, [18]), так как температура роста в этом случае и, соответственно, структурное совершенство слоев GaTe значительно выше.

Из рис. 4 также следует, что при уменьшении области возбуждения и увеличении спектрального разрешения широкая полоса $\Phi \Pi$ с максимумом ~ 1.76 эВ также расщепляется на набор узких линий, связанных с излучением свободных (FX) и связанных экситонов (BX). При этом можно разрешить линии экситонов, связанных как на донорах (DX), так и на акцепторах (AX). Энергетическое положение этих линий $\Phi \Pi$ хорошо согласуется с имеющимися литературными данными [18, 22]. Кроме того, стоит отметить, что в спектре микро- $\Phi\Pi$ отсутствуют какие-либо линии в диапазоне энергий 1.2-1.3 эВ, в отличие от спектров $\Phi\Pi$, представленных на рис. 2.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в данной работе методами оптической и структурной характеризации были исследованы тонкие пленки GaTe, выращенные методом МПЭ на подложках GaAs (001). Данные, полученные из анализа кривых РД выращенных слоев, подтверждают сосуществование фаз h- и m-GaTe во всех выращенных слоях. Установлена количественная взаимосвязь между условиями МПЭ и фазовым составом выращиваемых слоев GaTe/GaAs (001). Подтверждено, что именно температура роста является ключевым фактором фазового контроля слоев GaTe. Приведены данные, позволяющие заключить, что полоса излучения с энергией $E \sim 1.45$ эB, доминирующая в спектрах низкотемпературной ФЛ слоев GaTe/GaAs (001), выращенных методом МПЭ, связана с излучением эмиссионных центров, локализованных на границах отдельных доменов.

Финансирование. Работа А.И. Г. и М.В. Р. выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-22-20049, https://rscf.ru/project/22-22-20049/) и Санкт-Петербургского Научного фонда (грант в соответствии с соглашением № 21/2022 от 14 апреля 2022 г.).

ЛИТЕРАТУРА

- Z. Yang and J. Hao, Adv. Mater. Technol. 4, 1900108 (2019).
- F. Liu, H. Shimotani, H. Shang et al., ACS Nano, 8, 752 (2014).
- B. Marfoua and J. Hong, Nanotechnology 32, 115702 (2021).
- Y. Liu, X. Wu, W. Guo et al., Nanotechnology 32, 225204 (2021).
- H. Cai, Y. Gu, Y.-C. Lin et al., Appl. Phys. Rev. 6, 041312 (2019).

- X. Yuan, L. Tang, P. Wang et al., Nano Res. 8, 3332 (2015).
- C. J. Bae, J. McMahon, H. Detz et al., AIP Advances
 7, 035113 (2017).
- S.V. Sorokin, P. S. Avdienko, I.V. Sedova et al., Materials 13, 3447 (2020).
- S. H. Huynh, N.Q. Diep, T. V. Le et al., ACS Appl. Nano Mater. 4, 8913 (2021).
- Q. Zhao, T. Wang, Y. Miao et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 18719 (2016).
- Y. Yu, M. Ran, S. Zhou et al., Adv. Funct. Mater. 29, 1901012 (2019).
- M. Liu, S. Yang, M. Han et al., Small 17, 2007909 (2021).
- E. G. Gillan and A. R. Barron, Chem. Mater. 9, 3037 (1997).
- L. C. Muhimmah and C.-H. Ho, Appl. Surf. Science 542, 148593 (2021).
- D. D. Firsov, O. S. Komkov, V. A. Solov'ev et al., J. Phys. D: Appl. Phys. 49, 285108 (2016).
- J. J. Fonseca, S. Tongay, M. Topsakal et al., Adv. Mater. 28, 6465 (2016).
- C. H. Lee, S. Krishnamoorthy, D. J. O'Hara et al., J. Appl. Phys. **121**, 094302 (2017).
- A. Zubiaga, J. A. García, F. Plazaola et al., J. Appl. Phys. 92, 7330 (2002).
- H. S. Güder, B. Abay, H. Efeoglu et al., J. Lumin. 93, 243 (2001).
- T. Schmidt, K. Lischka, and W. Zulehner, Phys. Rev. B 45, 8989-8994 (1992).
- S. Tongay, J. Suh, C. Ataca et al., Sci. Rep. 3, 2657 (2013).
- P. S. Avdienko, I. V. Sedova, D. D. Firsov et al., J. Opt. Soc. Am. B 38, 2579-2586 (2021).
- A. Zubiaga, J. A. García, F. Plazaola et al., Phys. Rev. B 68, 245202 (2003).
- 24. H. Cai, B. Chen, G. Wang et al., Adv. Mater. 29, 1605551 (2017).

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА И ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ ДЕКОРИРОВАННОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ С ФЕРРОМАГНИТНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ПЕРВЫХ СОСЕДЕЙ И АНТИФЕРРОМАГНИТНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ВТОРЫХ

В. А. Мутайламов^{*}, А. К. Муртазаев

Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук 367003, Махачкала, Россия

> Поступила в редакцию 18 апреля 2022 г., после переработки 8 августа 2022 г. Принята к публикации 8 августа 2022 г.

С помощью методов вычислительной физики исследовано статическое критическое поведение двумерной декорированной ферромагнитной модели Изинга на треугольной решетке. Для узловых спинов учитывалось ферромагнитное обменное взаимодействие первых ближайших соседей и антиферромагнитное обменное взаимодействие следующих за ближайшими соседей. Обменное взаимодействие J_d между узловыми спинами и декорированными изменялось в пределах [-3.0; 3.0]. Для различных значений J_d определено основное состояние модели, вычислены критические температуры, построена фазовая диаграмма. Показано, что величина обменного взаимодействия с декорированными спинами влияет на род фазового перехода в парамагнитное состояние.

DOI: 10.31857/S0044451022120100 **EDN:** LDTWSG

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы в современной физике конденсированного состояния возрос интерес к исследованию декорированных структур благодаря разнообразию наблюдаемых в них новых явлений и особенностей по сравнению с исходными недекорированными решетками. Внедрение декорированных спинов в магнитную решетку приводит к появлению конкурирующих взаимодействий, что, в свою очередь, может служить причиной появления большого разнообразия магнитных упорядоченных состояний и фазовых переходов между ними. В частности, декорирование порождает множество фрустрационных эффектов, может приводить как к подавлению фазовых переходов, существующих в недекорированных решетках, так и к возникновению новых фазовых переходов. Кроме того, появляются новые

Понятие декорированная решетка, относящееся к магнитной модели Изинга, впервые предложено в 1951 году в работе Сиози [1]. Суть его заключается во введении дополнительных спинов в промежутки между узлами исходной решетки. Это понятие можно обобщить и на другие типы кристаллических решеток. Фактически, подавляющее большинство реальных структур являются декорированными.

Большого прогресса достигло исследование планарных декорированных структур методами теоретической физики. Так, например, найдены точные решения для декорированных моделей со смешанными спинами на двумерной квадратной решетке [2,3], точное решение для двукратно декорированной модели на квадратной решетке [4]. Исследованы магнитные и магнитокалорические свойства с построением фазовых диаграмм основного состояния модели Изинга со смешанными спинами на треугольной решетке [5]. Изучены декорированные структуры на квадратной решетке с многоспиновым взаимодействием [6,7].

типы частичного упорядочения, а также дополнительные экстремумы теплоемкости.

[•] E-mail: vadim.mut@mail.ru

При изучении критических свойств моделей магнитных материалов, для которых нет точного аналитического решения, успешно применяются методы вычислительной физики. Это, как правило, модели со сложным гамильтонианом, учитывающим влияние дополнительных факторов. Методы вычислительной физики строго математически обоснованы и позволяют исследовать критические свойства пирокого спектра магнитных моделей. Данные методы применялись нами ранее для изучения критических свойств декорированной модели Изинга на квадратной [8,9] и кубической [10] решетках.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Методами численного эксперимента мы исследовали статическое критическое поведение двумерной декорированной модели Изинга на треугольной решетке. В обменном взаимодействии между узловыми спинами учитываются как ближайшие соседи (первые соседи), так и следующие за ближайшими (вторые соседи). Также узловые спины взаимодействуют с ближайшими декорированными спинами, расположенными между узлами решетки. Декорированные спины между собой не взаимодействуют.

Схематически структура решетки приведена на рис. 1. Как видно на рисунке, каждый узловой спин имеет восемнадцать соседей: шесть первых узловых, шесть вторых узловых и шесть декорированных. Каждый декорированный спин имеет лишь два ближайших узловых соседа. На каждую кристаллографическую ячейку приходится один узловой спин и три декорированных.

Гамильтониан исследованной модели может быть представлен в следующем виде:

$$H = -\frac{1}{2}J_1 \sum_{i,j} S_i S_j - \frac{1}{2}J_2 \sum_{k,l} S_k S_l - \frac{1}{2}J_d \sum_{m,n} S_m S_n, \quad S_i = \pm 1, \quad (1)$$

где S_i — изинговский спин в узле решетки *i*, первая сумма учитывает обменное взаимодействие между ближайшими узловыми спинами, вторая — обменное взаимодействие между следующими за ближайшими узловыми спинами, третья — обменное взаимодействие между узловыми и декорированными спинами. В данной работе мы ограничились частным случаем, когда взаимодействие между первыми соседями является ферромагнитным с величиной $J_1 = 1$, а взаимодействие между вторыми соседями



Рис. 1. Декорированная модель Изинга на треугольной решетке (◦ — узловые спины, ● — декорированные)

антиферромагнитным с величиной $J_2 = -1$. Значения J_1 и J_2 не изменялись в ходе моделирования. Обменное взаимодействие между узловыми спинами и декорированными изменялось в широких пределах от антиферромагнитного с величиной $J_d = -3$ до ферромагнитного $J_d = 3$.

Отметим, что соотношение $J_1 = J_2 = 1$ не представляет значительного интереса, так как в этом случае отсутствует конкуренция обменных взаимодействий. И тип упорядочения в основном состоянии будет зависеть от знака обменного взаимодействия между узловыми и декорированными спинами: ферромагнитное при $J_d > 0$ и антиферромагнитное при $J_d < 0$ (все узловые спины направлены в одну сторону, все декорированные в другую).

В процессе исследований мы моделировали решетку с периодическими граничными условиями, содержащую $L \times L$ элементарных ячеек в каждом кристаллографическом направлении. Решетка ориентировалась в пространстве таким образом, чтобы спины лежали в плоскости xy декартовой системы координат, сами спины при этом направлены перпендикулярно этой плоскости.

Для получения температурных зависимостей термодинамических величин, построения фазовой диаграммы и определения равновесных конфигураций спиновой системы при различных значениях температуры T мы применяли репличный вариант алгоритма Метрополиса [11, 12]. Моделировались решетки с линейными размерами L = 24, содержащие $N = 2\,304$ спинов.

В ходе вычислений для приведения спиновой системы в состояние термодинамического равновесия отбрасывался начальный неравновесный участок марковской цепи в 7 · 10⁴ шагов Монте-Карло на спин, заведомо больший, чем время релаксации исследуемой модели. В равновесном состоянии вычислялись средние по ансамблю значения термодинамических величин. Длина равновесного участка составляла $3 \cdot 10^5$ шагов Монте-Карло на спин. Результаты получены в температурном интервале от $T = 10^{-3}$ до T = 5 с шагом от $\Delta T = 10^{-3}$ (температура приведена в единицах обменного интеграла $k_B T/|J_1|$, где k_B — постоянная Больцмана). В отдельных случаях минимальное значение температуры составило $T = 10^{-4}$ с шагом $\Delta T = 10^{-5}$, а линейный размер достигал значения L = 96 ($N = 36\,864$ спинов).

Для определения основного состояния спиновой системы при различных значениях J_d мы использовали метод Ванга–Ландау [13], которым моделировались решетки с линейным размером L = 12, содержащие N = 576 спинов. Также метод Ванга–Ландау использовался для получения температурных зависимостей энтропии. Для построения гистограмм энергии в точке фазового перехода мы применяли стандартный алгоритм Метрополиса метода Монте-Карло [14, 15]. Данным алгоритмом моделировались решетки с линейным размером до L = 96 включительно, содержащие до $N = 36\,864$ спинов. Длина равновесного участка в этом случае составляла до $9 \cdot 10^5$ шагов Монте-Карло на спин.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

3.1. Основное состояние

Для определения основного состояния анализировались спиновые конфигурации, получаемые в ходе моделирования методом Ванга-Ландау, соответствующие минимуму энергии. Исходная недекорированная модель Изинга на треугольной решетке при $J_1 = 1$ и $J_2 = -1$ имеет так называемое страйповое упорядочение спиновой системы, при котором формируются полосовые (страйповые) структуры шириной в два спина. Внутри каждой полосы спины направлены в одну сторону, направление спинов в соседних полосах противоположно друг другу. Полосы направлены случайным образом вдоль одной из кристаллографических осей. Пример страйпового упорядочения недекорированной решетки приведен на рис. 2. Здесь и далее цветом выделены два противоположных направления спинов. Очевидно, что данная структура спиновой системы является антиферромагнитной. Суммарный магнитный момент решетки равен нулю.

Основное состояние декорированной решетки зависит от величины и знака обменного взаимодействия J_d . При значениях $J_d \leq 1$ модель имеет анти-



Рис. 2. Страйповое упорядочение в основном состоянии исходной недекорированной решетки. Цветом выделены два противоположных направления спинов

ферромагнитное упорядочение, а при $J_d > 1$ ферромагнитное. В свою очередь, тип антиферромагнитного упорядочения различается в областях значений $J_d < -1, -1 \le J_d < 0$ и $0 < J_d \le 1$.

При $J_d < -1$ все узловые спины решетки направлены в одну сторону, а все декорированные в другую. Число узловых спинов составляет 1/4 от общего числа спинов, число декорированных 3/4. В результате суммарный магнитный момент оказывается нескомпенсированным на величину 1/2, т.е. модель фактически является ферримагнитной.

При $-1 \leq J_d < 0$ подрешетка узловых спинов и подрешетка декорированных спинов имеют страйповое антиферромагнитное упорядочение. При этом направления узловых и декорированных спинов внутри одной полосы взаимно противоположны. Упорядочение подрешетки узловых спинов такое же, как и в случае недекорированной решетки. Сказанное демонстрирует рис. 3, на котором изображено основное состояние модели при J_d = -0.5. Для наглядности приведено основное состояние как всех спинов (a), так и по отдельности узловых (n) и декорированных (d). Как видно на рисунке, спиновые полосы декорированной подрешетки не имеют четкой границы. Разделительные линии состоят из спинов, направленных случайным образом в разные стороны. Это говорит о том, что в модели присутствует частичное вырождение в основном состоянии. При этом вырождена не вся спиновая система, а только спины, расположенные на границах полос декорированной подрешетки.



Рис. 3. Конфигурация основного состояния всех (a), узловых (n) и декорированных (d) спинов при $J_d = -0.5$

При $0 < J_d \leq 1$ мы также имеем страйповое антиферромагнитное упорядочение, когда спиновые полосы декорированной подрешетки не имеют чет-ких границ, а в модели присутствует частичное вырождение. Отличие от $-1 \leq J_d < 0$ в том, что в

Рис. 4. Конфигурация основного состояния всех (a), узловых (n) и декорированных (d) спинов при $J_d = 0.5$

данном случае направления узловых спинов и декорированных спинов внутри одной полосы совпадают друг с другом (рис. 4).

При значениях $J_d > 1$ система находится в ферромагнитном состоянии: узловые и декорированные



Рис. 5. Зависимость модуля намагниченности от температуры при различных значениях обменного взаимодействия J_d



Рис. 6. Зависимость энергии основного состояния от величины обменного взаимодействия J_d . Линии — значения, рассчитанные из гамильтониана (1); точки — результат численного моделирования

спины направлены в одну сторону.

В частном случае $J_d = 0$ подрешетка узловых спинов имеет страйповое упорядочение, а подрешетка декорированных спинов полностью разупорядочена. Модель вырождена в основном состоянии.

3.2. Термодинамические функции

На рис. 5 представлена зависимость модуля намагниченности M от температуры для различных значений обменного взаимодействия J_d (здесь и далее все величины приведены в относительных единицах). На графике хорошо виден переход из ферромагнитного состояния в парамагнитное при значениях $J_d > 1$ и из антиферромагнитного в парамагнитное при $J_d < -1$. Температуры переходов для Фазовая диаграмма и основное состояние...

одинаковых по модулю значений J_d совпадают между собой. С увеличением величины $|J_d|$ область перехода смещается в сторону более высоких температур. Для всех значений обменного взаимодействия в интервале $|J_d| \leq 1$ кривые намагниченности лежат вблизи нулевого значения и накладываются друг на друга, поэтому на графике для наглядности приведена только одна кривая для случая $J_d = -0.5$.

Обращает на себя внимание резкий спад намагниченности для $|J_d| = 1.40$. По всей видимости, при таких значениях J_d в спиновой системе возрастают фрустрационные эффекты, вызванные конкуренцией обменных взаимодействий. Даже небольшое повышение температуры приводит к выходу спиновой системы из упорядоченного состояния. С дальнейшим уменьшением $|J_d|$ спад намагниченности становится более резким, и в интервале $1 < |J_d| < 1.3$ происходит при температурах $T < 10^{-4}$. К сожалению, более точно определить его границы в этом интервале нам не удалось.

На рис. 6 представлена зависимость энергии основного состояния Е₀ от обменного взаимодействия J_d. Линиями на графике представлено расчетное значение энергии, полученное прямыми вычислениями гамильтониана (1) для спиновых конфигураций, соответствующих минимуму энергии (метод Ванга-Ландау). Точками представлены результаты численного моделирования при $T \rightarrow 0$ (репличный алгоритм Метрополиса). На рисунке наглядно виден кроссовер из антиферромагнитного основного состояния в страйповое антиферромагнитное при $J_d = -1$ и дальнейший кроссовер в ферромагнитное при $J_d = 1$. Результаты численного эксперимента точно совпадают с расчетными значениями за исключением области 1 < $|J_d|$ < 1.3. В этой области результаты моделирования показывают значение E_0 несколько больше расчетного, что подтверждает предположение о том, что спиновая система выходит из упорядоченного состояния при очень малых значениях температур $T < 10^{-4}$.

Отметим, что в точке $J_d = -1.0$ антиферромагнитная конфигурация спинов и страйповая антиферромагнитная конфигурация имеют одинаковое значение минимальной энергии E_0 . Теоретически это означает, что при такой величине обменного взаимодействия могут наблюдаться оба типа основного состояния. Но на практике мы наблюдали только страйповое упорядочение. Вероятная причина этого в том, что страйповое антиферромагнитное состояние является вырожденным и вероятность появления любой из множества его конфигураций намного выше, чем антиферромагнитного состояния.



Рис. 7. Зависимость энтропии от температуры при различных значениях обменного взаимодействия J_d

Аналогичная ситуация наблюдалась и при $J_d = 1.0$.

Температурные зависимости энтропии S приведены на рис. 7. Кривые энтропии для равных по модулю значений J_d точно накладываются друг на друга. Как следует из графика, энтропия в основном состоянии $S_0 \to 0$ при $T \to 0$ для значений обменного интеграла $|J_d| > 1$. При $|J_d| \le 1$ энтропия в основном состоянии отлична от нуля, что также указывает на наличие вырождения. В интервале $0 < |J_d| \le 1$ для линейного размера L = 12 значение энтропии в основном состоянии составило $S_0 = 0.18(1)$. При $J_d = 0$ степень вырождения больше (вырождено большее количество спинов) и энтропия в основном состоянии увеличивается до $S_0 = 0.52(1)$. С ростом температуры энтропия для всех значений обменного взаимодействия стремится к величине $S = \ln(2)$.

На рис. 8 представлена зависимость теплоемкости С от температуры для различных значений обменного взаимодействия $|J_d| < 1$. Как и в случае с энтропией, графики для равных по модулю значений J_d накладываются друг на друга. Из графика следует, что в этом диапазоне температура перехода в парамагнитное состояние слабо зависит от величины обменного взаимодействия J_d . При $|J_d| = 0.2$ заметен второй максимум теплоемкости при низких температурах. Он имеет более широкую форму и меньше по высоте, чем максимум, приходящийся на температуру перехода в парамагнитное состояние. С ростом |J_d| низкотемпературный максимум смещается в сторону более высоких температур, его высота уменьшается, а форма становится более широкой. После $|J_d| = 0.5$ обнаружить его не удалось. Появление низкотемпературного максимума в этой области связано с особенностями упорядочения магнитных подрешеток исследуемой модели.



Рис. 8. Зависимость теплоемкости от температуры при различных значениях обменного взаимодействия $|J_d| < 1$

Исследование равновесных спиновых конфигураций при различных температурах в интервале значений обменных взаимодействий $0 < |J_d| < 1$ показало, что подрешетка узловых спинов и подрешетка декорированных спинов приходят в разупорядоченное состояние при разных температурах. Подрешетка узловых спинов сохраняет свое страйповое упорядочение вплоть до области перехода в парамагнитное состояние. Подрешетка декорированных спинов переходи в разупорядоченное состояние. Подрешетка декорированных спинов переходит в разупорядоченное состояние при более низких температурах. Это связано с тем, что обменное взаимодействие с декорированным спинами $|J_d|$ меньше, чем с узловыми $|J_1| = |J_2|$. И чем меньше $|J_d|$, тем раньше декорированная подрешетка приходит в разупорядоченное.

Переход в разупорядоченное состояние сопровождается ростом флуктуаций, что и приводит к появлению максимумов теплоемкости. Первый по температуре максимум соответствует разупорядочению подрешетки декорированных спинов, второй соответствует разупорядочению подрешетки узловых спинов. Таким образом, спиновая система сначала переходит из упорядоченной фазы в частично разупорядоченную, а затем только в парамагнитную. На графиках энтропии при $|J_d| = 0.25$ и $|J_d| = 0.50$ можно увидеть два характерных излома, приходящихся на температуру этих переходов (рис. 7).

Частично разупорядоченное состояние представлено на рис. 9, где изображена равновесная спиновая конфигурация для $J_d = 0.5$ при температуре T = 1.49. Основное состояние для этой же величины J_d было ранее представлено на рис. 4. На рисунках наглядно видно, что подрешетка узловых спинов сохраняет свое упорядоченное состояние при T = 1.49. Лишь два узловых спина из-за тепловых флуктуаций при данной температуре ориентированы «неправильно». При этом подрешетка декорированных спинов полностью разупорядочена. Отметим, что для $J_d = 0.5$ переход из упорядоченной фазы в частично разупорядоченную в нашем численном эксперименте происходил при температуре T = 0.85(1), а переход в парамагнитную фазу при T = 1.74(1).

Зависимость теплоемкости от температуры в области $1 < |J_d| < 1.3$ приведена на рис. 10. Здесь также заметны дополнительные максимумы при низких температурах. Анализ наших результатов показывает, что при отрицательных значениях J_d в этой температурной области происходит переход из антиферромагнитной в страйповую антиферромагнитную фазу, в которой направления узловых и декорированных спинов внутри полосы взаимно противоположны. Соответственно, при положительных значениях J_d происходит переход из ферромагнитной в страйповую антиферромагнитную фазу, в которой направления узловых и декорированных спинов внутри полосы совпадают. Нам не удалось выяснить, почему с ростом тепловых флуктуаций энергетически более выгодной становится страйповая фаза. Максимумы теплоемкости на рис. 10 при более высоких температурах приводят к переходу из страйповой фазы в парамагнитную.

При значениях $|J_d| > 1.4$ дополнительных максимумов теплоемкости не наблюдается (рис. 11). Модель переходит из ферромагнитного и антиферромагнитного состояния сразу в парамагнитное. Наблюдается значительная зависимость температуры перехода от величины обменного взаимодействия J_d .

3.3. Фазовая диаграмма

Температурные зависимости теплоемкости для различных значений обменного взаимодействия J_d использовались нами для построения фазовой диаграммы. Границы фаз определялись по положению максимумов теплоемкости. Итоговая фазовая диаграмма исследуемой модели для линейного размера L = 24 приведена на рис. 12. Страйповая антиферромагнитная фаза, в которой узловые и декорированные спины внутри полосы направлены во взаимно противоположных направлениях, условно обозначена на рисунке как ST_1 . Соответственно, страйповая антиферромагнитная фаза, в которой узловые и декорированные спины внутри полосы направлены в одном направлении, условно обозначена как ST₂. Остальные фазы расшифрованы в подписи к рисунку.



Рис. 9. Равновесная конфигурация всех (a), узловых (n) и декорированных (d) спинов для $J_d = 0.5$ при температуре T = 1.49

Исследование равновесных спиновых конфигураций при различных температурах в интервале $0.5 < |J_d| < 1$ показало, что декорированная подрешетка также переходит в разупорядоченное состоя-



Рис. 10. Зависимость теплоемкости от температуры при различных значениях обменного взаимодействия $1 < |J_d| < 1.3$



Рис. 11. Зависимость теплоемкости от температуры при различных значениях обменного взаимодействия $|J_d| > 1.4$



Рис. 12. Фазовая диаграмма, построенная по максимумам теплоемкости для линейного размера L = 24. AF — антиферромагнитная фаза, F — ферромагнитная, ST — страйповая антиферромагнитная, PD — частично разупорядоченная, P — парамагнитная



Рис. 13. Зависимость энергии от температуры для различных линейных размеров L при значении обменного взаимодействия $|J_d| = 0.1$

ние раньше узловой подрешетки, как и в интервале $0 < |J_d| \leq 0.5$. Но переход этот происходит более плавно, явно выраженных максимумов теплоемкости не наблюдается, определить точную температуру перехода не удалось. Поэтому границы между страйповыми и частично разупорядоченной фазой в этой области обозначены пунктирной линией. Очевидно, что предел этой границы будет наблюдаться в точке $|J_d| = 1$, где все три обменных взаимодействия равны по модулю друг другу. В этой точке и узловая подрешетка, и декорированная переходят в разупорядоченное состояние при одинаковой температуре.

Также пунктиром проведены границы раздела между страйповыми и парамагнитной фазами в интервале $1.3 < |J_d| < 1.4$. Ярко выраженных вторых максимумов теплоемкости в этом интервале мы не обнаружили. Но на рис. 5 видно, что намагниченность при $|J_d| = 1.4$ имеет два характерных изгиба, соответствующих двум фазовым переходам при разных температурах. Аналогичное поведение намагниченности наблюдалось и при других значениях обменного взаимодействия J_d из этого интервала. Это позволяет предположить, что границы раздела фаз в этой области приходят примерно так, как это изображено на рисунке пунктирной линией.

По всей видимости упомянутые выше погрешности в определении фазовых границ связаны с малыми линейными размерами исследованной модели. С увеличением линейных размеров следует ожидать появления вторых максимумов теплоемкости в интервалах обменного взаимодействия $0.5 < |J_d| < 1$ и $1.3 < |J_d| < 1.4$.

3.4. Род фазового перехода

На рис. 13 приведена температурная зависимость полной энергии спиновой системы E для различных линейных размеров L при значении обменного взаимодействия $|J_d| = 0.1$. Из графика видно, что при температуре перехода модели в парамагнитное состояние энергия изменяется скачком. С увеличением линейных размеров скачок становится более выраженным и происходит во все более узком температурном интервале. Такое поведение теплоемкости характерно для фазовых переходов первого рода. Для уточнения типа перехода мы дополнительно использовали производную логарифма плотности состояний по энергии и гистограммы энергии.

Производная логарифма плотности состояний g(E) по энергии E позволяет получить зависимость обратной температуры от энергии. В случае фазового перехода первого рода эта зависимость имеет характерную S-образную форму, симметричную относительно горизонтальной линии, соответствующей обратной температуре фазового перехода $1/T_c$ [16]. В случае фазового перехода второго рода график производной имеет горизонтальный участок, приходящийся на значение $1/T_c$.

Моделирование алгоритмом Метрополиса генерирует ненормализованное каноническое распределение при заданной температуре. В случае фазового перехода первого рода распределение при температуре фазового перехода будет иметь два максимума, расположенных симметрично относительно равновесного значения энергии [17]. В случае фазового перехода второго рода должен наблюдаться один максимум, приходящийся на равновесное значение энергии. Форму канонического распределения воспроизводит гистограмма энергии, которая показывает, сколько раз в процессе моделирования выпадало то или иное энергетическое состояние спиновой системы.

Зависимость производной логарифма плотности состояний от энергии для линейного размера L = 12 при величине обменного взаимодействия $J_d = -0.1$ приведена на рис. 14. Нормированная на максимальное значение гистограмма энергии для различных линейных размеров при $J_d = -0.1$ приведена на рис. 15. Оба графика подтверждают предположение о наличие фазового перехода первого рода при $J_d = -0.1$. Аналогичная картина наблюдалась на-



Рис. 14. Зависимость производной логарифма плотности состояний от энергии, L = 12, $J_d = -0.1$



Рис. 15. Гистограмма энергии для различных линейных размеров $L, J_d = -0.1$

ми в интервале значений обменного взаимодействия $0 \leq |J_d| \leq 1$. При $|J_d| > 1.4$ признаков фазового перехода первого рода не обнаружено: отсутствует скачок энергии; не наблюдается S-образная форма производной логарифма плотности состояний; на гистограмме энергии присутствует только один максимум.

Таким образом, наши результаты показывают, что для исследованных линейных размеров переход в парамагнитное состояние в интервале значений обменного взаимодействия $0 \le |J_d| \le 1$ является фазовым переходом первого рода, а в области $|J_d| > 1$ фазовым переходом второго рода. Отметим, что в исходной недекорированной модели Изинга при $J_1 = 1$ и $J_2 = -1$ переход в парамагнитное состояние является фазовым переходом первого рода.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Добавление декорированных спинов в ферромагнитную модель Изинга на треугольной решетке может в значительной степени изменять свойства модели. От величины и знака обменного взаимодействия между узловыми спинами и декорированными зависит тип упорядочения в основном состоянии, появляются фрустрационные эффекты, возникают дополнительные экстремумы теплоемкости, изменяется род фазового перехода в парамагнитную фазу. Добавление декорированных спинов меняет род фазового перехода исходной решетки в том случае, когда модуль величины обменного взаимодействия с декорированными спинами становится больше модуля величины обменного взаимодействия узловых спинов.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. I. Syozi, Prog. Theor. Phys. 35, 306 (1951).
- J. Strečka, M. Rebič, O. Rojas, and S. M. de Souza, J. Mag. Magn. Mater. 469, 655 (2019).
- J. Strečka, O. Rojas, and S. M. de Souza, Phys. Lett. A 383, 2451 (2019).
- H. Čenčariková, J. Strečka, and M. L. Lyra, J. Mag. Magn. Mater. 401, 1106 (2016).

- 5. L. Gálisová and J. Strečka, Physica E 99, 244 (2018).
- M. Jaščur, V. Štubňa, K. Szałowski et al., J. Mag. Magn. Mater. 417, 92 (2016).
- V. Štubňa and M. Jaščur, J. Mag. Magn. Mater. 442, 364 (2017).
- Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин, А. К. Муртазаев и др., ФТТ 62, 683 (2020).
- V. A. Mutailamov and A. K. Murtazaev, Low Temper. Phys. 46, 1016 (2020).
- В. А. Мутайламов, А. К. Муртазаев, ЖЭТФ 160, 119 (2021).
- K. Hukushima, H. Takayama, and K. Nemoto, Int. J. Mod. Phys. C 7, 337 (1996).
- M. Hagen, B. Kim, P. Liu, et al., J. Phys. Chem. B 111, 1416 (2007).
- D. P. Landau, Shan-Ho Tsai, and M. Exler, Am. J. Phys. 72, 1294 (2004).
- 14. D. P. Landau, Physica A 205, 41 (1994).
- 15. К. Биндер, Методы Монте-Карло в статистической физике, Мир, Москва (1982).
- 16. Y. Komura and Y. Okabe, Phys. Rev. E 85, 010102(R) (2012).
- 17. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E 64, 056101 (2001).

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЧЕТЫРЕХКОМПОНЕНТНОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА НА ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ МЕТОДОМ ВАНГА–ЛАНДАУ С КОНТРОЛИРУЕМОЙ ТОЧНОСТЬЮ

М. А. Фадеева^{а*}, Л. Н. Щур^{b,a**}

^а Научно-исследовательский университет «Высшая школа экономики», 101100, Москва, Россия

^b Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук 142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

> Поступила в редакцию 8 июня 2022 г., после переработки 8 июня 2022 г. Принята к публикации 4 июля 2022 г.

Численно исследуется критическое поведение четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке. Использован модифицированный метод Ванга–Ландау с контролем точности оценки плотности состояний. Конечномерный анализ полученных результатов подтверждает наличие фазового перехода второго рода с критическими показателями, соответствующими классу универсальности двумерной четырехкомпонентной модели Поттса.

DOI: 10.31857/S0044451022120112 **EDN:** LDVPKK

1. ВВЕДЕНИЕ

Теория фазовых переходов второго рода предсказывает классификацию моделей статистической физики с ферромагнитным взаимодействием по набору признаков, таких как пространственная размерность системы, размерность параметра порядка и симметрия основного состояния (см., например, [1]). Гипотеза универсальности является следствием подхода к критическим явлениям — теории ренормализационой группы, в которой детали гамильтониана не влияют на значения критических показателей и на масштабные преобразования функций [2]. Результаты, полученные с применением этой теории, получили подтверждение в рамках таких общих теорий, как конформная теория поля [3, 4] и стохастическая теория эволюции Шрамма–Левнера [5,6]. Имеется большое число численных исследований, которые воспроизводят критические индексы с достаточной надежностью и не противоречат гипотезе универсальности. Более того, результаты исследования неравновесных систем также формулируются на языке универсальности [7]. Таким образом, многочисленные системы с разнообразными деталями гамильтониана и отличиями на малых масштабах хорошо классифицируются набором критических индексов, зависящим лишь от глобальных свойств гамильтониана. Технически это можно выразить так, что амплитуда корреляционной длины зависит от локальных свойств, но ее убывание на больших расстояниях в окрестности фазового перехода не зависит от локальных свойств и поведение на больших расстояниях описывается универсальной функцией.

Следует заметить, что не все величины являются универсальными. Например, значения критических амплитуд универсальных функций не являются универсальными сами по себе, а лишь их некоторые комбинации оказываются не зависящими от деталей гамильтониана [1]. Следует также с осторожностью трактовать универсальность в системах с ограниченными размерами, в которых конечность системы в одном из направлений может давать явную зависимость как от размера системы, так и от типа граничных условий. Конечно, эти эффекты также являются следствием глобальных влияний, поскольку размер системы и тип граничных условий ограничивают расходимость корреляцион-

^{*} E-mail: mafadeeva@hse.ru

^{**} E-mail: lev@landau.ac.ru

ной длины, за счет чего зависимость от размера системы будет явной. Замечательный пример, это выражение для корреляционной длины в модели Изинга на бесконечной полоске конечной ширины L со свободными граничными условиями на краях полоски, полученное в статье [8] с помощью конформной теории поля [3] $\xi(L) \propto L/\pi$, с явной зависимостью корреляционной длины вдоль полоски от ее ширины. Эта зависимость является универсальной при оговорке ширины полоски и типа граничных условий.

Еще одно уточнение универсальности происходит от анизотропии системы [9]. Например, для модели Изинга на треугольной решетке с константой J' взаимодействия спинов вдоль одного из направлений решетки и константой взаимодействия вдоль двух других направлений J значение кумулянта Биндера, которое является некоторой универсальной комбинацией критических амплитуд, зависит явно от параметра анизотропии — отношения констант взаимодействия q = J'/J [10]. Заметим однако, что анизотропия взаимодействия — это глобальная характеристика гамильтониана.

Заметим также, что в некоторых случаях даже введение примесей может не менять класс универсальности. Это можно увидеть на примере хорошо изученной аналитически и численно двумерной модели Изинга, в которой корреляционная длина приобретает аддитивную логарифмическую поправку за счет примесей [11], что приводит к логарифмическим поправкам термодинамических наблюдаемых, однако их зависимость от корреляционной длины остается той же функцией, что и в случае отсутствия примесей. При этом сохраняется и универсальность отношения критических амплитуд — их численные значения также характеризуют класс универсальности [12]. Таким образом, при относительно малой концентрации примесей не нарушаются глобальные свойства и модель демонстрирует поведение в классе универсальности двумерной модели Изинга. При таком подходе можно также увидеть, что изменение универсального поведения в этой модели может произойти только в окрестности точки перколяционного фазового перехода — большая концентрация примесей может привести к реализациям перколяционного геометрического кластера, что изменит критические свойства системы, при концентрации примесей более 10 процентов проявляется отклонение от универсального поведения модели Изинга за счет смешивания влияния двух критических областей [12]. Это также проявление влияния глобальной характеристики — геометрической перколяции, которая описывается другим набором критических индексов и другой функциональной зависимостью корреляционной длины.

В последние годы появились работы, утверждения которых, основанные на численном моделировании, находятся в противоречии с описанной выше картиной универсальности. В частности, в статье [13] на основе численного моделирования четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке сделано утверждение, что система испытывает фазовый переход первого рода. Известно, что модель Поттса с локальным взаимодействием испытывает фазовый переход второго рода, что показано аналитически [14,15], численно [16] и, что особо важно, экспериментально [17].

В разд. 3 мы приводим результаты численного анализа четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке с применением метода прямой оценки плотности состояний (DOS), аналогично использованному в статье [13]. Отличие состоит в том, что мы использовали для оценки DOS не прямой метод Ванга-Ландау [18, 19], а его модификацию [20], потенциально обладающую большей точностью оценки DOS. Кроме того, мы использовали для оценки степени сходимости вычислений DOS предложенный нами ранее метод [21]. Мы приводим результаты оценки критических индексов, которые указывают на то, что четырех компонентная модель Поттса на гексагональной решетке не демонстрирует отклонения от ожидаемого универсального поведения в классе универсальности четырехкомпонентной модели Поттса. Обратное и ошибочное утверждение статьи [13] основано, по-видимому, на отсутствии сходимости оценки DOS к требуемому в силу известных дефектов прямого метода Ванга-Ландау, а также в силу использования качественного метода анализа, не обладающего надлежащей точностью.

В разд. 2 мы подробно излагаем детали модифицированного метода, использованного нами для проведения численного исследования.

2. МОДИФИЦИРОВАННЫЙ МЕТОД ВАНГА–ЛАНДАУ С КОНТРОЛЕМ СХОДИМОСТИ

Метод Ванга–Ландау [18] получил широкое распространение благодаря простоте его реализации для классических систем с дискретным спектром энергии. Метод дает возможность прямой численной оценки плотности состояний (точнее, напрямую оценивается энтропия, как будет видно из формулировки метода). Он основан на остроумной эвристической идее оценки принятия перехода между состояниями моделируемой системы пропорционально отношению текущих плотностей состояний, зависящих от начальной и конечной энергий. Эту вероятность перехода мы называем вероятностью Ванга– Ландау. Статистическая сумма систем с дискретным спектром может быть представлена в виде

$$Z = \sum_{k=1}^{N_E} g(E_k) e^{-E_k/k_B T} , \qquad (1)$$

где $g(E_k)$ — число состояний (DOS) с энергией E_k , $(k = 1, 2, ..., N_E), N_E$ — число уровней энергии, k_B — постоянная Больцмана и T — температура. Заметим, что сама DOS не зависит от температуры, но ее знание дает возможность получить значения свободной энергии как функции температуры. Производные свободной энергии по температуре дают наблюдаемые термодинамические величины, например, внутреннюю энергию системы и теплоемкость. Для получения зависимости свободной энергии от других параметров гамильтониана, например магнитного поля, необходимо расширенное представление статсуммы с плотностью состояний, зависящей также от магнитного поля. Метод достаточно общий. Он может быть применен также в задачах оптимизации [22], допускающих представление целевой функции в виде, аналогичном выражению (1).

2.1. Алгоритм Ванга–Ландау

Алгоритм состоит из следующих шагов: 1) инициируется вспомогательная функция $H(E_k) = 0$ и текущее значение логарифма DOS $\lg(E_k) = 1$, $(k = 1, 2, ..., N_E)$, задается произвольная конфигурация системы и вычисляется ее энергия, задается начальное значение параметра $f = \exp(1)$ (его назначение будет пояснено ниже); 2) любым методом Монте-Карло разыгрывается возможный переход в другое состояние (чаще всего используется метод Метрополиса [19]); 3) переход из состояния с энергией E_k в состояние с энергией E_m принимается с вероятностью Ванга–Ландау

$$P_{WL}(E_k, E_m) = \min\left(1, \frac{\tilde{g}(E_k)}{\tilde{g}(E_m)}\right), \qquad (2)$$

где используется текущая оценка DOS $\tilde{g}(E_k) = \exp \lg(E_k)$ и происходит увеличение значения вспомогательной функции принятого состояния $H(E_k) = H(E_k) + 1$ и функции $\lg(E_k) = \lg(E_k) + 1$; шаги 2 и 3 повторяются до тех пор, пока вспомогательная функция $H(E_k)$ не станет "плоской"

с некоторой процентной погрешностью, например 5% [18]; 4) после этого рекомендуется [18] сбросить значения вспомогательной функции $H(E_k) = 0$, уменьшить текущее значение параметра $f = \sqrt{f}$, откалибровать текущие значения логарифма DOS $\lg(E_k) = f \lg(E_k), \ (k = 1, 2, ..., N_E),$ и перейти к шагу 2. Процесс завершается по достижении некоторого выбранного значения параметра f, например $f = \exp(10^{-8})$.

2.2. Модификация: 1/t-алгоритм

Для большинства спиновых моделей с дискретным спектром энергии такая процедура приводит к неплохой оценке плотности состояний и алгоритм используется в огромном числе исследований¹⁾. Тем не менее, уже в ранних применениях авторами метода было отмечено, что он приводит к некоторой конечной точности оценки DOS в несколько процентов [23]. Соответственно, для систем относительно большого размера результаты для термодинамических функций могут иметь существенные погрешности, в том числе в критической области.

Способ преодолеть такой дефект был предложен позднее в работе Беллардинелли и Пирелли [20] — 1/t-алгоритм. Теоретическое обоснование сходимости при применении 1/t-алгоритма было получено в работе Лианга с соавторами [22], основанной на применении теории стохастической аппроксимации.

Модификация с применением 1/t-алгоритма основана на изменении калибровочного коэффициента f не по закону квадратного корня, а обратно пропорционально времени вычисления $f \propto 1/t$, измеренного в шагах Монте-Карло. Коэффициент пропорциональности выбирается из расчета непрерывности сшивки двух законов после некоторого числа шагов 2-3-4 исходного алгоритма Ванга–Ландау.

2.3. Критерий сходимости DOS

При применении модифицированного метода Ванга–Ландау в принципе возможно получение оценки DOS с произвольной точностью. Однако для этого приходится платить астрономическим объемом вычислений, поскольку процесс схождения оценки к ожидаемой логарифмически медленный.

¹⁾ О распространенности применения метода Ванга– Ландау свидетельствует, например, такой факт, что на момент написания текста нашей статьи на официальном сайте издательства APS указан список цитирований из более чем 2140 статей.

Кроме того, заведомо неизвестна оценка сходимости DOS.

Решение этой проблемы было предложено в нашей статье [21]. Дополнительно вводится в анализ матрица $T(E_k, E_m)$ с элементами $T(E_k, E_m)$, которые равны частоте переходов между состояниями с энергиями E_k и E_m . Для ее оценки на каждом шаге основного алгоритма Ванга-Ландау добавляется счетчик числа переходов $T(E_k, E_m)$ между состояниями с энергией E_k и E_m . Результат статьи [22] дает основания полагать, что асимптотически $T(E_k, E_m)$ приближает $T(E_k, E_m)$. Это предположение проверено путем численного моделирования моделей Поттса с числом компонент 2, 3 и 4 и ХУ-модели в размерностях решеток 1, 2 и 3 и сравнением с точными результатами в ряде случаев, а также с аккуратными численными экспериментами с применением других методов Монте-Карло. Для одномерной модели Изинга матрица была вычислена точно [21].

Во всех случаях аналитических и численных исследований было замечено, что искомая матрица $T(E_k, E_m)$ является дважды стохастической. Ее старшее собственное значение равно единице. Таким образом, отклонение модуля разницы старшего собственного значения оценочной матрицы $T(E_k, E_m)$ от единицы может быть использовано как критерий приближения к желаемой DOS. Вопрос однозначности такого значения DOS остается открытым. Однако удивительный факт того, что начальный этап оригинального метода Ванга-Ландау для систем с дискретным спектром приводит к неплохой начальной оценке DOS и доказанный факт того, что в таком случае 1/t-алгоритм приведет к желаемой DOS, позволяют полагать такой метод контроля точности оценки DOS достаточно надежным. Более того, в приложении статьи [21] доказано утверждение о том, что если оценочная матрица $T(E_k, E_m)$ близка к стохастической, то оценочная DOS близка к желаемой. Доказательство основано на том факте, что на этапе 2 алгоритма Ванга-Ландау мы генерируем случайное блуждание в конфигурационном пространстве, которое удовлетворяет условию детального баланса. При этом каждый элемент матрицы переходов $T(E_k, E_m)$ является произведением вероятности Ванга-Ландау на вероятность случайного блуждания в конфигурационном пространстве из состояния с энергией E_k в состояние с энергией E_m (формула (2) статьи [21]). Дополнительно, в статье [21] на примере одномерной модели Изинга аналитически показано, что если при построении матрицы $T(E_k, E_m)$ использовать точные значения



Рис. 1. (В цвете онлайн) Зависимость параметра f и критерия точности $\delta = |1 - \lambda_1|$ от шага Монте-Карло t для расчета четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке с линейным размером L = 16. Синий цвет соответствует значениям параметра f, а зеленый — значениям критерия точности δ



Рис. 2. (В цвете онлайн) Зависимость параметра f и критерия точности $\delta=|1-\lambda_1|$ от шага Монте-Карло tдля расчета четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке с линейным размером L=60. Синий цвет соответствует значениям параметра f, а зеленый — значениям критерия точности δ

DOS, то матрица переходов будет дважды стохастической.

На рис. 1, 2 показаны примеры изменения параметра f и критерия сходимости $\delta = |1 - \lambda_1|$ от шага Монте-Карло t для двух размеров решетки. На первом этапе параметр f убывает по экспоненциальному закону метода Ванга–Ландау [18,19], далее включается степенное убывание по закону 1/t [20]. Критерий сходимости δ также убывает по степенному закону на заключительной стадии вычислений, хотя и не всегда равномерно.

2.4. Оценки характерных времен алгоритма: время туннелирования и время перемешивания

Характерные времена алгоритма Ванга–Ландау — это время туннелирования (tunelling time) и время перемешивания (mixing time).

Время туннелирования связано с начальным этапом алгоритма и характеризует типичное время при использовании критерия ровности гистограммы. Формально его можно определить как время первого достижения одного края энергетического спектра при старте моделирования с другого края спектра [24]. Это время также называют временем первого пересечения (first passage time) [25]. По сути, алгоритм Ванга-Ландау основан на случайном блуждании по спектру энергии. Если бы мы не использовали для принятия каждого перехода вероятность Ванга–Ландау P_{WL} (см. выражение (2)), то у нас было бы случайное блуждание по спектру энергии, т.е. по одномерной решетке с числом узлов L^2 . В этом случае время достижения противоположного конца спектра (время туннелирования) было бы пропорционально квадрату числа уровней энергии, которое на двумерной решетке растет пропорционально L^2 . Иными словами, свободное случайное блуждание по энергетическому спектру нашей модели дает время туннелирования пропорционально четвертой степени размера решетки L⁴. Отличие вероятности Ванга–Ландау *Р*_{WL} от единицы приводит в нашем случае к более выраженному росту времени туннелирования, и численные оценки приводят к еще более быстрому росту времени туннелирования с увеличением размера решетки, и для двумерной модели Изинга $t_{tun} \propto L^{4.8(4)}$.

Второе характерное время, время перемешивания, важно на заключительном этапе алгоритма при приближении к искомому DOS. Оно определяется [26] разницей первого и второго собственных значений матрицы переходов $T(E_k, E_m)$,

$$t_{mix} \propto \frac{1}{|\lambda_2 - \lambda_1|},\tag{3}$$

т.е. щелью в спектре (spectral gap).

Численный эксперимент показывает, что время перемешивания растет с размером решетки L по степенному закону $t_{mix} \propto L^{4.28(4)}$ для двумерной модели Изинга.

Эти оценки показывают, что метод Ванга– Ландау требует гигантского количества исполнения шагов Монте-Карло для достижения требуемого результата, что можно увидеть из масштабов горизонтальной оси приведенных выше графиков зависимости критерия сходимости, рис. 1, 2. Предварительные оценки характерных времен для исследуемой нами модели не сильно отличаются от времен для модели Изинга. Нам важно, что характерные времена растут быстрее, чем четвертая степень линейного размера решетки L.

2.5. Детали численного эксперимента

Вычисление собственных значений λ_1 и λ_2 матрицы переходов случайного блуждания с вероятностью Ванга–Ландау $T(E_n, E_m)$ проводилось с помощью функции dgeev() пакета Intel® oneAPI Math Kernel Library LAPACK [27].

Для случайного выбора спина на шаге 2 алгоритма использовался генератор псевдослучайных чисел MT19937 из библиотеки [28].

Количество шагов между проверкой гистограммы H(E) на равномерность заполнения 10^6 .

Каждый 1/t—шаг алгоритма выполнялся до тех пор, пока на третьем шаге выполнения алгоритма не будет совершенно как минимум $N_E \cdot 10^8 \approx 10^8 \cdot L^2$ шагов.

Термодинамические функции (см. выражения (5)-(8)) вычислялись программой Mathematica.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Гамильтониан модели Поттса имеет вид

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{nn} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}, \qquad (4)$$

где суммирование проводится по всем ближайшим соседям и множитель 1/2 учитывает, что каждая пара спинов входит в сумму дважды, δ — символ Кронекера. В нашем случае σ_i принимает четыре возможных значения.

Вычисление плотности состояний $g(E_K)$ $(k = 1, 2, ..., N_E)$ проводилось на гексагональных решетках с линейным числом узлов L = 6, 8,12, 16, 24, 30, 36, 48, 54, 60, 62 и 72 (см. рис. 3), на которой реализуются значения энергии в диапазоне от $-3/2L^2$ до нуля.

При применения методики, описанной в разделе 2, был получен набор численных данных для плотности состояний $g(E_k)$ четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке. Эти данные были использованы для вычисления энергии E, теплоемкости C и кумулянта Биндера B_E [29] как



Рис. 3. (В цвете онлайн) Пример используемой при моделировании гексагональной решетки с линейным размером L = 4. Желтым цветом обозначены дополнительные узлы для демонстрации организации периодических граничных условий



Рис. 4. (В цвете онлайн) Температурная зависимость удельной энергии для нескольких размеров решетки

функции обратной температуры $\beta=1/k_BT$ по формулам

$$E(\beta) = \langle E \rangle = \frac{\sum_{i=0}^{N_E} E_i g(E_i) e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=0}^{N_E} g(E_i) e^{-\beta E_i}},$$
(5)

$$\langle E^2 \rangle = \frac{\sum_{i=0}^{N_E} E_i^2 g(E_i) e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=0}^{N_E} g(E_i) e^{-\beta E_i}},$$
(6)

$$C(\beta) = \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2), \tag{7}$$

$$B_E(\beta) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle}{3 \langle E^2 \rangle^2}.$$
(8)

Графики энергии E/N и теплоемкости C/N на один узел, а также графики кумулянта Биндера приведены соответственно на рис. 4, 5, 6. Число узлов $N = L^2$.

Полученные результаты позволяют оценить значения критических амплитуд. На рис. 7 приведена



Рис. 5. (В цвете онлайн) Температурная зависимость удельной теплоемкости для нескольких размеров решетки



Рис. 6. (В цвете онлайн) Температурная зависимость кумулянта Биндера для нескольких размеров решетки

зависимость максимума удельной теплоемкости от линейного размера *L*.

Хорошо известно, что модели в этом классе универсальности демонстрируют мультипликативные логарифмические поправки к теплоемкости [30]. Конечномерный анализ [31] указывает на такую зависимость максимума теплоемкости от размера системы L,

$$C_{max} \propto \frac{L^b}{(\ln L)^{3/2}} \left[1 + \ldots\right] \tag{9}$$

с показателем степени $b = \alpha/\nu = 1$ и сложной комбинацией логарифмических членов в квадратной скобке²⁾. Здесь α и ν — критические показатели теплоемкости и корреляционной длины [1]. Результат аппроксимации численных данных по этой формуле, приведенный в работе [31], при анализе модели на квадратной решетке дает значение показателя b = 1.044(8), что неплохо согласуется с аналитическим значением. В нашем случае, аналогично, результат аппроксимации максимума теплоемкости хорошо соответствует формуле (9) со значением показателя b = 1.042(15). В статье [31] также приводится результат наивной аппроксимации дан-

²⁾ Мы не приводим громоздких выражений в скобках. Детали можно найти в статье [31].


Рис. 7. Максимум теплоемкости как функция размера системы. Пунктирная линия — аппроксимация численных данных

ных степенным законом без логарифмических поправок, что дает степень b = 0.770(8). Аналогичная аппроксимация в нашем случае дает близкое значение b = 0.75(1).

Также из полученных нами данных для теплоемкости можно определить зависимость сдвига положения максимума теплоемкости. Известно, что этот сдвиг зависит от размера решетки [32]

$$\Delta T \propto L^{-1/\nu} \tag{10}$$

и определяется показателем корреляционной длины ν . Аппроксимация полученных нами данных для сдвига максимума теплоемкости по формуле (10) дает оценку степени 0.672(11), что близко к точному результату $\nu = 2/3 \approx 0.667$. Близкий результат был получен в работе [31] из численной оценки критического индекса корреляционной длины.

Таким образом, численное исследование критического поведения теплоемкости четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке модифицированным методом Ванга–Ландау приводит к результатам, аналогичным численному исследованию критического поведения четырехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке кластерным методом [31]. Этого следовало ожидать, как и было отмечено в разд. 1.

Положение минимума кумулянта Биндера также может быть использовано для оценки показателя корреляционной длины, но оно затруднено несингулярными поправками к восприимчивости [16].

Мы также провели анализ функции распределения энергии при различных температурах и не нашли указаний на сосуществование фаз, на основании которого в статье [13] был сделан вывод о фазовом переходе первого рода в исследуемой модели.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы показали, что метод Ванга–Ландау в модифицированным варианте с оценкой точности вычислений может быть с успехом применен к извлечению численных значений критических индексов модели Поттса с четырехкратным вырожденным основным состоянием. Также мы показали, что такая модель на гексагональной решетке демонстрирует критическое поведение, аналогичное ранее детально численно исследованной модели на квадратной решетке в классе универсальности [31], получившем имя модели.

Существенно, что для оценки плотности состояний были использованы два дополнительных ингредиента. Первый из них, 1/t-метод, позволяет избежать искажений в оценке DOS [20]. Второй, метод оценки степени отклонения матрицы переходов от стохастической, позволяет контролировать приближение оценки DOS к ожидаемой [21]. Также важен учет логарифмических поправок к критическому поведению [16, 31] при конечномерном анализе критического поведения термодинамических наблюдаемых.

После завершения исследования мы обнаружили в текущем номере ЖЭТФ статью [33] авторов из того же коллектива, что и статья [13], в которой на основании анализа этой же модели с помощью кластерного метода Монте-Карло сделан вывод о фазовом переходе второго рода. При этом результаты ранней работы [13] с противоположным выводом о фазовом переходе первого рода не обсуждаются.

В отличие от этих работ, в которых выводы сделаны на основании качественного анализа распределения энергии, нами проведена численная оценка критических индексов и сравнение с результатами анализа других авторов [31]. В статье приведены и подробно описаны все необходимые детали исследования, что предоставляет возможность верификации представленных нами результатов.

Благодарности. Вычисления плотности состояний проводились на кластере Manticore (НЦЧ РАН) и суперкомпьютере сНАRISMa (НИУ ВШЭ).

Финансирование. Работа М.А.Ф. выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант «аспиранты» 20-37-90084).

ЛИТЕРАТУРА

- V. Privman, P.C. Hohenberg, and A. Aharony, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 14, ed. by C. Domb and J.L. Lebowitz, Academic, New York (1991).
- 2. M. Fisher, Rev. Mod. Phys. 46, 597 (1974).
- A.A. Belavin, A.M. Polyakov, and A.B. Zamolodchikov, Nucl. Phys. B 241, 333 (1984).
- Vl. S. Dotsenko and V. A. Fateev, Phys. B 240, 312 (1984).
- 5. O. Schramm, Isr. J. Math. 118, 221 (2000).
- 6. S. Smirnov, Compt. Rend. Ser 1 333, 239 (2001).
- 7. G. Ódor, Rev. Mod. Phys. 76, 663 (2004).
- 8. J.L. Cardy, J. Phys. A: Math. Gen. 17, L385 (1984).
- 9. V. Dohm, Phys. Rev. E 77, 061128 (2008).
- W. Selke and L.N. Shchur, Phys. Rev. E 80, 042104 (2009).
- Вик.С. Доценко, Вл.С. Доценко, ЖЭТФ 83, 727 (1982).
- L.N. Shchur and O.A. Vasilyev, Phys. Rev. E 65, 016107 (2001).
- А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Мазагаева, М. А. Магомедов, ЖЭТФ 156, 502 (2019).
- 14. R.B. Potts, Math. Proc. Camb. Phil. Soc. 48, 106 (1952).
- F.Y. Wu, The Potts model, Rev. Mod. Phys. 54, 235 (1982).
- 16. L.N. Shchur, B. Berche, and P. Butera, Nucl. Phys. B 811, 491 (2009).
- M. Sokolowski and H. Pfnür, Phys. Rev. B 49, 7716 (1994).

- 18. F. Wang and D.P. Landau, Phys. Rev. Lett. 86, 2050 (2001).
- 19. F. Wang and, D.P. Landau, Phys. Rev. E 64, 056101 (2001).
- 20. R. E. Belardinelli and V. D. Pereyra, Phys. Rev. E 75, 046701 (2007).
- L.Yu. Barash, M.A. Fadeeva, and L.N. Shchur, Phys. Rev. E 96, 043307 (2017).
- 22. F. Liang, C. Liu, and R.J. Carroll, J. Amer. Stat. Ass. 102, 305 (2007).
- 23. D.P. Landau, private communication.
- 24. L. N. Shchur, J. Phys.: Conf. Ser. 1252, 012010 (2019).
- **25.** S. Redner, *A Guide to First-Passage Processes*, Cambridge Univ. press, Cambridge (2001).
- M. Fadeeva and L.N. Shchur, J. Phys.: Conf. Ser. 955, 012028 (2018).
- 27. M. Krainiuk, M. Goli, and V.R. Pascuzzi, 2021 International Workshop on Performance, Portability and Productivity in HPC (P3HPC), p. 22.
- 28. M.S. Guskova, L.Yu. Barash, and L.N. Shchur, Comp. Phys. Commun. 200, 402 (2016).
- 29. K. Binder, Z. für Physik B. Conden. Matt. 43, 119 (1981).
- 30. J.L. Cardy, M. Nauenberg, and D.J. Scalapino, Phys. Rev. B 22, 2560 (1980).
- 31. J. Salas and A. Sokal, J. Stat. Phys. 88, 567 (1997).
- 32. A.E. Ferdinand and M.E. Fisher, Phys. Rev. 185, 832 (1969).
- 33. A.K. Муртазаев, Α.Б. Бабаев, ЖЭΤΦ 161, 847 (2022).

УРАВНЕНИЯ ДВУХСКОРОСТНОЙ ГИДРОДИНАМИКИ ДЛЯ ПОЛЯРНОЙ ФАЗЫ СВЕРХТЕКУЧЕГО ³НЕ В НЕМАТИЧЕСКОМ АЭРОГЕЛЕ

Е. В. Суровцев*

Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук 119334, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 6 июля 2022 г., после переработки 8 июля 2022 г. Принята к публикации 11 июля 2022 г.

Проведен последовательный вывод полной системы уравнений гидродинамики для полярной фазы сверхтекучего ³Не в нематическом аэрогеле без учета диссипативных процессов. При выводе уравнений предполагалось отсутствие проскальзывания между нормальной компонентой ³Не и каркасом аэрогеля, что позволило ограничиться двухскоростным описанием движения. По сравнению с классическим случаем системы гидродинамических уравнений для сверхтекучего ⁴Не, полученная система содержит дополнительные уравнения: уравнение сохранения массы аэрогеля, уравнение движения орбитального вектора параметра порядка полярной фазы, а также вектора, описывающего отклонение орбитального вектора от мгновенного направления локальной анизотропии аэрогеля. Из-за взаимодействия ³Не и аэрогеля тензор потока импульса, входящий в уравнение сохранения полного импульса системы, включает в себя компоненты тензора напряжений аэрогеля. Показано, что в длинноволновом пределе учет движения орбитального вектора параметра порядка полярной фазы приводит к превышению точности.

DOI: 10.31857/S0044451022120124 **EDN:** LDWAQE

1. ВВЕДЕНИЕ

Нематический аэрогель с высокой степенью анизотропии (нафен, мулитовый аэрогель), помещенный в ³Не, позволяет наблюдать новые фазы сверхтекучего ³Не, которые возникают в объеме, ограниченном аэрогелем, из-за изменения симметрии системы. Одной из таких фаз является сверхтекучая полярная фаза, которая впервые была обнаружена в экспериментах по ядерному магнитному резонансу [1]. Интерес представляет изучение сверхтекучих свойств рассматриваемой системы, которые проявляются в экспериментах по колебанию аэрогеля в ячейке со сверхтекучим ³He [2, 3]. В рассматриваемой серии экспериментов наблюдалось две моды колебаний, одна из которых возникает только после перехода ³Не внутри аэрогеля из нормального состояния в сверхтекучее (полярную фазу, как в статье

917

[2]). В связи с этим возникла необходимость в выводе и решении гидродинамических уравнений для рассматриваемой составной системы (нематический аэрогель + сверхтекучий ³Не в полярной фазе).

Первое гидродинамическое рассмотрение сверхтекучей жидкости с внесенными в нее примесями было проведено Халатниковым [4]. Существенным для нас является то, что в цитируемой работе примеси были нескоррелированы (газ примесей). Наличие корреляций в расположении и ориентации примесей приводит к возникновению у системы дополнительной упругости, которая дает вклад в энергию системы и, как следствие, в другие термодинамические величины. Гидродинамические уравнения для простейшего случая изотропной сверхтекучей жидкости (случай ⁴He) в изотропном аэрогеле были впервые записаны в работе [5], но получены они были эвристически без какого-либо вывода и не учитывали сдвиговую упругость аэрогеля. В работе [6] авторы использовали результат работы [5] для описания эксперимента по распространению звука в кремниевом аэрогеле заполненном сверхтекучим ³Не. Особенностью данной задачи является то, что сверхтекучие фазы ³Не описывают-

E-mail: e.v.surovtsev@gmail.com

ся нетривиальным параметром порядка. Гидродинамика анизотропной сверхтекучей жидкости существенно зависит от вида параметра порядка, так как гидродинамическими переменными помимо сверхтекучей скорости могут являться и другие пространственные градиенты величин, описывающих нарушение симметрии сверхтекучей фазы. Феноменологический вывод линейных гидродинамических уравнений для сверхтекучих полярной, А-фазы и Вфазы ³Не в нематическом аэрогеле был проведен в работе Плайнера и Бранта [7]. Аналогичный вывод для β-фазы, возникающей в рассматриваемой системе в сильных магнитных полях, был рассмотрен теми же авторами в работе [8]. Несмотря на идейно правильный подход, найденная в статье система уравнений получилась неоправданно громоздкой и содержащей некоторые неточности, связанные со спецификой рассматриваемой системы. В частности, в написанной системе уравнений отсутствует уравнение сохранения массы примесей (аэрогеля). Как следствие, химический потенциал, который входит в уравнение сохранения потенциальности движения, вычисляется как производная энергии по полной плотности системы (с учетом массы аэрогеля), что противоречит смыслу сверхтекучей скорости, как отдельного движения жидкости. Авторы также не вполне корректно ввели в уравнения тензор упругости аэрогеля, что привело к появлению в их рассмотрении лишних феноменологических коэффициентов. Помимо этого, уравнения сильно усложняются при учете неоднородностей орбитальной части параметра порядка. Учет данных неоднородностей приводит к превышению точности рассматриваемого авторами линейного приближения. Наконец, уравнение изменения энтропии написано с очевидной ошибкой (нулевой ток энтропии в бездиссипативном режиме). Таким образом, представленный в статье вывод не является вполне обоснованным и требует уточнения.

В настоящей работе будет проведен последовательный вывод полной системы гидродинамических уравнений для полярной фазы сверхтекучего ³Не в нематическом аэрогеле без учета процессов затухания. Идейно предложенный вывод будет соответствовать тому, как это делается для нематических и смектических кристаллов в книге [9] и для обычной сверхтекучей жидкости [10]. Для всех гидродинамических переменных, возникающих в задаче, будут написаны либо уравнения непрерывности (для сохраняющихся величин), либо феноменологические уравнения движения (для оставшихся векторых величин). Выражения для потоков, входящих в уравнения непрерывности, будут получены посредством выделения полной дивергенции в выражении для частной производной энергии единицы объема по времени. Однозначность процедуры задается с помощью галилеевского преобразования энергии, импульса и потока импульса для рассматриваемой системы. В конце статьи будет рассмотрен вопрос о линеаризации полученных уравнений в случае малых деформаций.

2. ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЕ ПЕРЕМЕННЫЕ И ОБОБЩЕННЫЕ СИЛЫ

Прежде всего выпишем гидродинамические переменные, которые есть у рассматриваемой системы, и соответствующие им термодинамические силы. Будем рассматривать аэрогель как упругую сплошную среду с равновесной плотностью ρ_a^0 . Ось анизотропии аэрогеля (усредненное направление нитей аэрогеля) определим вектором $\nu_i^{(0)}$ (противоположные направления эквиваленты). Изменение положения аэрогеля в пространстве и его деформацию определим векторным полем локальных смещений $u_i(\mathbf{r},t)$ и тензором деформаций $u_{ij} = 1/2(\partial_i u_j + \partial_j u_i + 2\partial_i u_k \partial_j u_k)$, который в случае малых деформаций упрощается до вида $u_{ij} = 1/2(\partial_i u_j + \partial_j u_i)$. Изменения вектора **u** имеет смысл рассматривать только на расстояниях, гораздо больших характерных микромасштабов в системе (к примеру, расстояние между нитями аэрогеля, длина когерентности сверхтекучей фазы). Если ³Не внутри аэрогеля находится в нормальном состоянии, гидродинамическими переменными являются плотность жидкости ρ_l , плотность аэрогеля ρ_a , энтропия единицы объема s, плотность потока вещества **ј** и тензор деформации аэрогеля u_{ij} . При переходе ³Не внутри аэрогеля в сверхтекучее состояние у системы появляются дополнительные гидродинамические переменные, связанные с пространственными градиентами величин, описывающих спонтанное нарушение симметрии системы. Параметром порядка полярной фазы является комплексная матрица 3×3 вида $A_{\mu i} \sim e^{i\varphi} d_{\mu} m_i$, где d_{μ}, m_i — единичные векторы в спиновом и орбитальном пространствах соответственно, поэтому дополнительными гидродинамическими переменными будут сверхтекучая скорость $(v_s)_i \sim \nabla_i \varphi$ и градиент спинового вектора параметра порядка $\nabla_i d_j$, который мы в дальнейшем, однако, рассматривать не будем, считая связь с другими гидродинамическими переменными слабой (пренебрежение слабым спинорбитальным взаимодействием). Особенностью полярной фазы, возникающей в нематических аэрогелях, является то, что направление орбитального вектора т задается направлением оси анизотропии аэрогеля, поэтому у системы нет непрерывного вырождения по направлению т. В силу указанного взаимодействия, а также того, что градиентная энергия сверхтекучей фазы является функцией не только $\nabla_i m_i$, но и направления m_i , необходимо включить в рассмотрение обе данные переменные: $\nabla_i m_i$ и m_i . Для описания энергии анизотропии, возникающей в сверхтекучем состоянии из-за указанного выше взаимодействия с аэрогелем, удобно ввести дополнительную переменную $\delta_i = m_i - \nu_i$, где мы предположили, что в равновесии направления $\nu(\mathbf{r})$ и $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ совпадают. Рассмотрение в качестве независимой переменной градиента вектора локальной анизотропии аэрогеля $\nu(\mathbf{r})$ привело бы к учету пространственных производных следующих порядков от поля локальных смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r},t)$. Указанный набор переменных полностью описывает состояние системы.

Определим обобщенные силы, связанные с введенными выше переменными, через дифференциал энергии единицы объема тела в лабораторной системе отсчета:

$$d\varepsilon = Tds + \mu_l d\rho_l + \mu_a d\rho_a + (v_n)_i dj_i + + (g_s)_i d(v_s)_i + \sigma_{ik} d(u_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}u_{ll}) + \Delta_i d\delta_i + + X_i dm_i + L_{ij} d\nabla_i m_j, \quad (1)$$

где T — температура системы, μ_l — химический потенциал ³He, отнесенный к массе атома ³He, μ_a химический потенциал аэрогеля, отнесенный к массе одной нити аэрогеля, σ_{ij} — бесследовая часть тензора напряжений аэрогеля, $(v_n)_i$ — скорость, сопряженная к полному потоку вещества, $(g_s)_i$ — поток массы, сопряженный к сверхтекучей скорости, Δ_i , X_i и L_{ij} — обобщенные силы, сопряженные соответственно к δ_i , m_i и $\nabla_i m_j$.

В гидродинамике введенная выше величина \mathbf{v}_n определяется как импульс единицы массы вещества, которая в рассматриваемой задаче складывается из массы жидкости и аэрогеля в соответствующих пропорциях. Отметим также, что энергия предполагается функцией только двух скоростей v_n и v_s . Скорость \dot{u}_i , которая определяет усредненную по некоторому объему скорость нитей аэрогеля, связана с $(v_n)_i$ соотношением

$$\dot{u}_i = (v_n)_i + \left(\eta_{\perp}\delta_{ij} + (\eta_{\parallel} - \eta_{\perp})\nu_i^{(0)}\nu_j^{(0)}\right)N_j, \quad (2)$$

где вектор N_i является линейной комбинацией величин $\nabla_i T$, $\nabla_k \sigma_{ik}$, Δ_i и т.д. и определяет скорость проскальзывания аэрогеля относительно жидкости, а коэффициенты *п* зависят от вязкости гелия. Градиенты обобщенных сил, входящих в выражение для N_i , инвариантны относительно инверсии времени, поэтому второй член в уравнении (2) связан с диссипативными процессами в жидкости, которыми мы в рассматриваемом приближении пренебрегаем. Применимость нашего приближения ограничивается малыми частотами, при которых можно считать, что аэрогель полностью увлекает нормальную компоненту жидкости при движении. Можно сформулировать последнее условие как малость среднего расстояния между нитями аэрогеля по сравнению с вязкой глубиной проникновения ³Не для рассматриваемых характерных частот движения.

Выпишем некоторые очевидные соотношения, определяющие обобщенные силы для рассматриваемой системы. В системе отсчета, где сверхтекучая компонента жидкости покоится, плотность потока массы можно записать в виде

$$j_i^{(0)} = (\rho_a \delta_{ij} + (\rho_n)_{ij})((v_n)_j - (v_s)_j), \qquad (3)$$

где тензор $(\rho_n)_{ii}$ определяет величину нормальной компоненты плотности жидкости в направлении соответствующего движения. Определение нормальной плотности жидкости следует уточнить. Заметим, что в силу неоднородности системы, связанной с нитями аэрогеля, компоненты тензора $(\rho_n)_{ii}$ для направлений, перпендикулярных оси анизотропии аэрогеля, не стремятся к нулю при стремлении к нулю температуры. Данное утверждение остается верным даже при условии, что нити аэрогеля не подавляют амплитуду параметра порядка. Это является следствием того, что из-за потенциальности сверхтекучей скорости движение нитей аэрогеля через сверхтекучую жидкость приводит к возникновению у нитей присоединенной массы. Вклад присоединенный массы в определение тензора нормальной компоненты при нуле температур будет порядка $\rho_l d/\xi_a$, где d — средний диаметр нитей, ξ_a — среднее расстояние между нитями аэрогеля. Далее, используя преобразование Галилея для импульса, получим выражение для полного тока:

$$j_{i} = (\rho_{a}\delta_{ij} + (\rho_{n})_{ij})(v_{n})_{j} + (\rho_{s})_{ij}(v_{s})_{j}, \qquad (4)$$

$$(\rho_n)_{ij} + (\rho_s)_{ij} = \rho_l \delta_{ij}, \qquad (5)$$

где $(\rho_s)_{ij}$ — тензор сверхтекучей плотности, который обращается в нуль в точке сверхтекучего перехода внутри аэрогеля. Ток, сопряженный сверхтекучей скорости, является галилеевским инвариантом и

получается из последнего выражения при переходе в систему покоя нормальной компоненты жидкости и аэрогеля:

$$(g_s)_i = (\rho_s)_{ij} w_j, \tag{6}$$

где $w_j = (v_s)_j - (v_n)_j$ — скорость движения сверхтекучей компоненты по отношению к нормальной.

Для дальнейшего будет полезно выделить в химических потенциалах части $\mu_l^{(0)}$, $\mu_a^{(0)}$, относящиеся к системе отсчета, где жидкость (ее сверхтекучая компонента) покоится:

$$\mu_l = \mu_l^{(0)} + \frac{v_s^2}{2} - v_s v_n,$$

$$\mu_a = \mu_a^{(0)} + \frac{v_s^2}{2} - v_s v_n.$$
(7)

Оставшиеся обобщенные силы выведем, используя феноменологические представления об энергии системы, как функции от δ_i , m_i , $\nabla_i m_j$, u_{ij} . Обобщенную силу Δ_i легко получить из энергии анизотропии, которая для малых углов отклонения имеет вид

$$\delta F_a = -\kappa_a(T)(\nu_i m_i)^2, \qquad (8)$$

 $\kappa_a > 0$ для нематического аэрогеля. Заметим, что

$$\delta F_a = \frac{1}{2} \kappa_a \delta_i \delta_i - \kappa_a,$$

поэтому

$$\Delta_i = \kappa_a \delta_i. \tag{9}$$

Для того чтобы найти обобщенные силы X_i и L_{ij} , необходимо написать градиентную энергию сверхтекучего ³Не, связанную с неоднородностью вектора **m**, и кинетическую энергию в системе отсчета, где нормальная компонента покоится. Последнее утверждение следует из требования галилеевской инвариантности рассматриваемых сил. Итак,

$$\delta F_{grad}^{(0)} = (\rho_s)_{ij} \frac{w_i w_j}{2} + \frac{1}{2} [c_1 (\nabla_i m_i)^2 + c_2 (\nabla_i m_j \nabla_i m_j) + c_3 (e_{ijk} m_i \nabla_j m_k)^2], \quad (10)$$

где первый член соответствуют энергии сверхтекучего тока, а второй — энергии текстуры вектора **m**. Тензор сверхтекучей плотности для полярной фазы дается выражением

$$(\rho_s)_{ij} = \rho_s^{\perp} \delta_{ij} + (\rho_s^{\parallel} - \rho_s^{\perp}) m_i m_j, \ \rho_s^{\parallel} > \rho_s^{\perp}.$$
(11)

Энергия текстуры вектора **m** по форме совпадает с градиентной энергией нематика. Отметим, что в области применимости теории Гинзбурга–Ландау коэффициенты $c_{1,2} \sim N_F \Delta_P^2 \xi_s^2$, где N_F — плотность

состояний на поверхности Ферми, Δ_P — амплитуда параметра порядка, ξ_s — длина когерентности сверхтекучего ³He, а $c_3 \sim N_F \Delta_P^2 \xi_s^2 \Delta_P^2 / T_c^2$, т.е. имеет следующий порядок малости по амплитуде параметра порядка, и поэтому член с c_3 может быть опущен. Таким образом, в интересующей нас области температур (удельных энтропий) можно записать

$$X_i = \frac{\partial F_{grad}^{(0)}}{\partial m_i} = (\rho_s^{\parallel} - \rho_s^{\perp}) w_i w_j m_j, \qquad (12)$$

$$L_{ij} = \frac{\partial F_{grad}^{(0)}}{\partial \nabla_i m_j} \approx c_1 (\nabla_k m_k) \delta_{ij} + c_2 \nabla_i m_j.$$
(13)

Тензор напряжений аэрогеля в линейном по тензору деформаций приближении определим через квадратичную форму вида

$$\delta F_d = \mu_{ijkl} \frac{u_{ij} u_{kl}}{2},\tag{14}$$

где тензор μ_{ijkl} имеет симметрию $\mu_{ijkl} = \mu_{jikl} = \mu_{ijlk} = \mu_{klij}$ и обладает свойством $\mu_{iikl} = \mu_{ijkk} = 0$. В нашем случае он содержит три феноменологические константы:

$$\mu_{ijkl} = \frac{\gamma_2}{2} \left(\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \delta_{kl} \right) + + \gamma_4 \left(\frac{1}{4} [\delta_{ik} \nu_j^{(0)} \nu_l^{(0)} + \delta_{jl} \nu_i^{(0)} \nu_k^{(0)} + + \delta_{jk} \nu_i^{(0)} \nu_l^{(0)} + \delta_{il} \nu_j^{(0)} \nu_k^{(0)}] - \nu_i^{(0)} \nu_j^{(0)} \nu_k^{(0)} \nu_l^{(0)} \right) + + \gamma_5 \left(\nu_i^{(0)} \nu_j^{(0)} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right) \left(\nu_k^{(0)} \nu_l^{(0)} - \frac{1}{3} \delta_{kl} \right).$$
(15)

Коэффициенты γ_i являются функциями ρ_a , ρ_l и s. Индексы "1" и "3" у коэффициентов γ зарезервированы для инвариантов $\delta_{ij}\delta_{kl}$ и ($\delta_{ij}\nu_k\nu_l + \delta_{kl}\nu_i\nu_j$), которые исключаются из рассмотрения из-за условия $\mu_{iikl} = \mu_{ijkk} = 0$. Помимо рассмотренного вклада, есть еще линейный по деформации вклад в энергию, $\alpha u_{ij} \left(\nu_i^{(0)} \nu_j^{(0)} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right)$. Таким образом,

$$\sigma_{ij} = \mu_{ijkl} u_{kl} + \alpha \left(\nu_i^{(0)} \nu_j^{(0)} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right), \qquad (16)$$

где второй член приводит к переопределению недеформированного состояния, т.е. описывает изменение равновесной формы аэрогеля при изменении удельной энтропии. Коэффициент α также является функцией *s*, ρ_a и ρ_l . Положим в дальнейшем $\alpha = 0$ для начального состояния равновесия, так чтобы в нем $\sigma_{ij} = 0$. Наконец, заметим, что линейный по деформации член вида $\sim \tilde{u}_{ij}m_im_j$ рассматривать не нужно, так как влияние локальной оси анизотропии на направление вектора **m** уже было учтено в (8).

3. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ

Уравнения сохранения имеют для рассматриваемой системы стандартный вид:

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \nabla_i s(v_n)_i = 0, \qquad (17)$$

$$\frac{\partial \rho_a}{\partial t} + \nabla_i \rho_a \dot{u}_i = 0, \tag{18}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_i j_i = 0, \tag{19}$$

$$\frac{\partial j_i}{\partial t} + \nabla_j \Pi_{ij} = 0, \qquad (20)$$

$$\frac{\partial(v_s)_i}{\partial t} + \nabla_j \phi_{ij} = 0, \qquad (21)$$

$$\frac{\partial\varepsilon}{\partial t} + \nabla_i Q_i = 0, \qquad (22)$$

где первое уравнение — это закон сохранения энтропии (в отсутствие затухания), второе и третье выражают законы сохранения массы аэрогеля и полной массы в произвольном объеме системы соответственно, четвертое уравнение — закон сохранения импульса, пятое — закон сохранения сверхтекучей скорости, шестое — закон сохранения энергии. Последнее уравнение должно удовлетворяться автоматически. Вместо уравнения сохранения полной массы можно пользоваться уравнением сохранения массы жидкости, которое получается при вычитании (18) из (19) при условии равенства \dot{u}_i и $(v_n)_i$:

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \nabla_i ((\rho_s)_{ij} (v_s)_j + (\rho_n)_{ij} (v_n)_j) = 0.$$
(23)

Тензоры потока импульса и сверхтекучей скорости Π_{ij} и ϕ_{ij} , а также вектор потока энергии мы найдем далее с помощью стандартной процедуры. Помимо законов сохранения нам необходимы будут уравнения, описывающие движение остальных переменных: тензора деформаций и векторов m_i и δ_i .

Для того чтобы найти уравнение, описывающее изменение тензора деформации во времени, заметим следующее: при рассмотрении статических деформаций в теории упругости используется тензор деформаций (упругости) записываемый в координатах Лагранжа, т.е. в координатах, соответствующих недеформированному телу. В то же время в гидродинамике используются эйлеровы координаты, поэтому в нашем случае необходимо писать и тензор деформации в них же. Для начала введем тензор скоростей деформаций согласно определению

$$v_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right), \tag{24}$$

где $v_i \equiv \partial u_i / \partial t$. Учитывая формулу перехода от лагранжевых координат к эйлеровым, можно получить следующее соотношение [11]:

$$\frac{\partial u_{ij}}{\partial t} + v_k \frac{\partial u_{ij}}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} u_{jk} + \frac{\partial v_k}{\partial x_j} u_{ki} = v_{ij}.$$
 (25)

Заметим теперь, что в рассматриваемом приближении мы считаем, что $v_i \equiv \dot{u}_i = (v_n)_i$, и поэтому $v_{ij} = (v_n)_{ij}$. Таким образом, уравнение (25) можно рассматривать как уравнение движения для тензора деформаций.

Уравнение движения для вектора **m** запишем аналогично тому, как это делается для директора в нематической фазе жидких кристаллов. Без учета релаксационного члена имеем

$$\frac{\partial m_i}{\partial t} + (v_n)_j \nabla_j m_i = \Omega_{ij} m_j + \\
+ \lambda_m (\delta_{ij} - m_i m_j) m_k (v_n)_{jk},$$
(26)

где

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial (v_n)_i}{\partial x_j} - \frac{\partial (v_n)_j}{\partial x_i} \right)$$

описывает скорость локального поворота системы, а λ_m — феноменологический коэффициент, имеющий кинематическую природу [9]. Наконец, последнее необходимое уравнение движения — это уравнение для вектора δ_i , который определяет разницу между направлением локальной анизотропии аэрогеля и направлением орбитальной части параметра порядка. Для получения необходимого уравнения запишем сначала уравнение, аналогичное уравнению для **m**, только для направления локальной анизотропии аэрогеля:

$$\frac{\partial \nu_i}{\partial t} + (v_n)_j \nabla_j \nu_i =$$

= $\Omega_{ij} \nu_j + \lambda_{\nu} (\delta_{ij} - \nu_i \nu_j) \nu_k (v_n)_{jk}.$ (27)

Здесь λ_{ν} — феноменологический коэффициент, аналогичный λ_m . При написании данного уравнения мы опять учли приближение отсутствия проскальзывания, т.е. что скорость \dot{u}_i равна скорости $(v_n)_i$. Используя уравнения (26) и (27), получим уравнение для вектора δ_i . Для этого вычтем из (26) уравнение (27) и умножим полученное равенство на $m_i - \nu_i$, тогда после очевидных преобразований имеем

$$\partial_t (m - \nu)_j^2 / 2 + (v_n)_i \nabla_i (m - \nu)_j^2 / 2 = = -\lambda_m (\nu_j - m_j (\nu_l m_l)) (v_n)_{jk} m_k - -\lambda_\nu (m_j - \nu_j (\nu_l m_l)) (v_n)_{jk} \nu_k.$$
(28)

Поскольку введение вектора δ_i оправдано только для малых отклонений из равновесия, правую часть последнего равенства можно упростить до вида

$$\partial_t \frac{\delta_j \delta_j}{2} + (v_n)_i \nabla_i \frac{\delta_j \delta_j}{2} = (\lambda_m - \lambda_\nu) \delta_j (v_n)_{jk} \nu_k^0.$$
(29)

Таким образом, в отсутствие затухания динамика вектора δ_i возникает только при условии различия кинематических коэффициентов λ_m и λ_{ν} и определяется уравнением

$$\partial_t \delta_j + (v_n)_i \nabla_i \delta_j = (\lambda_m - \lambda_\nu) (v_n)_{jk} \nu_k^0.$$
(30)

Отметим, что линеаризованное по малым отклонениям уравнение имеет решение

$$\delta_i = (\lambda_m - \lambda_\nu) u_{ik} \nu_k^0, \tag{31}$$

где мы учли, что в отсутствие деформации $\delta_i = 0$.

4. ЗАМЫКАНИЕ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ

Для того чтобы система уравнений (17)–(21), (25), (26), (30) была замкнутой, необходимо найти выражения для потоков Π_{ij} и ϕ_{ij} через введенные переменные и соответствующие им обобщенные силы. Для дальнейшего вывода нам потребуется определение давления как частной производной полной энергии системы по объему в системе отсчета, где жидкость покоится:

$$p = -\left(\frac{\partial(V\varepsilon^{(0)})}{\partial V}\right)_{M_l,M_a,S,\mathbf{P}^{(0)},m_i,\delta_i,\tilde{u}_{ik},\nabla_i m_k} =$$

$$= -V\left(\frac{\partial(\varepsilon^{(0)})}{\partial V}\right)_{M_l,M_a,S,\mathbf{P}^{(0)},m_i,\delta_i,\tilde{u}_{ik},\nabla_i m_k} - \varepsilon_0.$$
(32)

Здесь M_a — масса аэрогеля, M_l — масса ³Не внутри аэрогеля, S — полная энтропия, $\mathbf{P}^{(0)}$ — полный импульс в системе покоя жидкости, $\tilde{u}_{ik} = u_{ik} - (1/3)\delta_{ik}u_{ll}$. Из постоянства массы M_a следует, что $-V\partial(\rho_a)/\partial V = \rho_a$ и т.п., откуда следует выражение для давления вида

$$p = -\varepsilon^{(0)} + Ts + \mu_a^{(0)}\rho_a + \mu_l^{(0)}\rho_l - j_i^{(0)}w_i, \qquad (33)$$

а для дифференциала давления имеем соответственно

$$dp = sdT + \rho_a d\mu_a^{(0)} + \rho_l d\mu_l^{(0)} - j_i^{(0)} dw_i - \sigma_{ij} d\tilde{u}_{ij} - X_i dm_i - \Delta_i d\delta_i - L_{ij} d\nabla_i m_j.$$
(34)

Найдем теперь явные выражения для тензоров потока импульса, сверхтекучей скорости и потока энергии. Для этого воспользуемся стандартной процедурой, согласно которой необходимо свести частную производную энергии единицы объема к полной дивергенции потока энергии. Используя соотношение (1), запишем частную производную энергии по времени и подставим вместо частных производных переменных их выражения из уравнений (17)–(21), (25), (26), (30):

$$\begin{split} \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} &= T \frac{\partial s}{\partial t} + \mu_a \frac{\partial \rho_a}{\partial t} + \mu_l \frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \\ &+ (v_n)_i \frac{\partial j_i}{\partial t} + (g_s)_i \frac{\partial (v_s)_i}{\partial t} + \\ &+ \sigma_{ik} \frac{\partial \tilde{u}_{ik}}{\partial t} + \Delta_i \frac{\partial \delta_i}{\partial t} + X_i \frac{\partial m_i}{\partial t} + L_{ij} \frac{\partial \nabla_i m_j}{\partial t} = \\ &= T(-\nabla_i s(v_n)_i) + \mu_a (-\nabla_i (\rho_a (v_n)_i)) + \\ &+ \mu_l (-\nabla_i (\rho_l (v_n)_i + (\rho_s)_{ij} w_j) + \\ &+ \sigma_{ij} [(v_n)_{ij} - (v_n)_k \frac{\partial u_{ij}}{\partial x_k} - \frac{\partial (v_n)_k}{\partial x_i} u_{jk} - \frac{\partial (v_n)_k}{\partial x_j} u_{ki}] + \\ &\quad (v_n)_i (-\nabla_j \Pi_{ij}) + (\rho_s)_{ik} w_k (-\nabla_j \phi_{ij}) + \\ &+ \Delta_i [(\lambda_m - \lambda_\nu) (v_n)_{ij} \nu_j^0 - (v_n)_j \nabla_j \delta_i] + \\ &+ X_i [\Omega_{ij} m_j + \lambda_m (\delta_{ij} - m_i m_j) m_k (v_n)_{jk} - (v_n)_j \nabla_j m_i] + \\ &+ L_{ij} \nabla_i [\Omega_{jk} m_k + \lambda_m (\delta_{jk} - m_j m_k) m_p (v_n)_{kp} - \\ &- (v_n)_k \nabla_k m_j], \end{split}$$

где при подстановке частной производной тензора деформаций мы воспользовались тем, что

$$\sigma_{ik}\frac{\partial \tilde{u}_{ik}}{\partial t} = \sigma_{ik}\frac{\partial u_{ik}}{\partial t}.$$

Выделим теперь в написанном выражении полную производную вида

$$- \nabla_{i} [(Ts + \mu_{a}\rho_{a} + \mu_{l}\rho_{l})(v_{n})_{i} + + \phi_{ij}(\rho_{s})_{jk} [(v_{s})_{k} - (v_{n})_{k}] - - (\rho_{s})_{ij} [(v_{s})_{j} - (v_{n})_{j}](v_{n})_{k}(v_{s})_{k} + \Pi_{ij}(v_{n})_{j} - - L_{ij} [\Omega_{jk}m_{k} + \lambda_{m}(\delta_{jk} - m_{j}m_{k})m_{p}(v_{n})_{kp}]].$$
(35)

Оставшиеся члены сначала сгруппируем следующим образом:

$$\begin{split} \nabla_{j}(g_{s})_{i}[(-\mu_{l}^{(0)}-\frac{v_{s}^{2}}{2})\delta_{ij}+\phi_{ij}]-\\ &-(\rho_{s})_{ij}w_{j}\nabla_{i}[(v_{s})_{k}(v_{n})_{k}]+\\ &+(v_{n})_{i}[s\nabla_{i}T+\rho_{a}\nabla_{i}\mu_{a}^{(0)}+\rho_{l}\nabla_{i}\mu_{l}^{(0)}+\\ &+(\rho_{a}\delta_{jk}+(\rho_{n})_{jk})w_{k}\nabla_{i}w_{j}-\\ &-\sigma_{jk}\nabla_{i}\tilde{u}_{jk}-\Delta_{j}\nabla_{i}\delta_{j}-X_{j}\nabla_{i}m_{j}-L_{jk}\nabla_{i}\nabla_{j}m_{k}]+\\ &+(v_{n})_{i}\{(\rho_{a}+\rho_{l})\nabla_{i}(\frac{v_{s}^{2}}{2}-(v_{s})_{j}(v_{n})_{j})-\\ &-(\rho_{a}\delta_{jk}+(\rho_{n})_{jk})w_{k}\nabla_{i}w_{j}\}+\\ &+\nabla_{i}(v_{n})_{j}[\Pi_{ij}+\sigma_{ij}-u_{ik}\sigma_{jk}-u_{jk}\sigma_{ik}+ \end{split}$$

$$+\frac{1}{2}(\lambda_m - \lambda_\nu)\left(\Delta_i\nu_j^0 + \Delta_j\nu_i^0\right) + \frac{1}{2}(\tilde{X}_im_j - \tilde{X}_jm_i) + \frac{1}{2}\lambda_m(\tilde{X}_im_j + \tilde{X}_jm_i) - \lambda_m(\tilde{X}_km_k)m_im_j - L_{ik}\nabla_jm_k], \quad (36)$$

где $\tilde{X}_i = X_i - \nabla_j L_{ji}$. Для химических потенциалов была использована формула (7). Далее можно легко показать, что симметричный тензор $\nabla_i(v_s)_k$ в выражении (36) сворачивается с антисимметричным тензором $(\rho_s)_{kj} w_j (v_n)_i - (\rho_s)_{ij} w_j (v_n)_k$, а оставшиеся члены, пропорциональные тензору $\nabla_i (v_n)_j$, приводятся к виду

$$- \nabla_{i}(v_{n})_{j} \Big\{ (\rho_{s})_{ik}(v_{s})_{k}(v_{s})_{j} + \{\rho_{a}\delta_{jk} + (\rho_{n})_{jk}\}(v_{n})_{k}(v_{n})_{i} - (\rho_{s})_{ik}(v_{n})_{k}(v_{s})_{j} + (\rho_{s})_{jk}(v_{n})_{k}(v_{s})_{i} \Big\}.$$

Согласно (34) выражение, на которое умножается $(v_n)_i$ в (36), равно $\nabla_i p$. Выделим из данного члена полную дивергенцию, и заметим, что поскольку рассматриваются только обратимые процессы, коэффициенты перед $\nabla_j (v_n)_i$ и $\nabla_j (g_s)_i$ должны тождественно обратиться в нуль. Из данных двух уравнений мы в итоге получим выражения для тензоров Π_{ij} и ϕ_{ij} :

$$\phi_{ij} = (\mu_l^{(0)} + \frac{v_s^2}{2})\delta_{ij},\tag{37}$$

$$\Pi_{ij} = p\delta_{ij} + (\rho_s)_{ik}(v_s)_k(v_s)_j + + (\rho_a\delta_{jk} + (\rho_n)_{jk})(v_n)_k(v_n)_i - - (\rho_s)_{ik}(v_n)_k(v_s)_j + (\rho_s)_{jk}(v_n)_k(v_s)_i - - \sigma_{ij} + \tilde{u}_{ik}\sigma_{jk} + \tilde{u}_{jk}\sigma_{ik} - - \frac{1}{2}(\lambda_m - \lambda_\nu) \left(\Delta_i \nu_j^0 + \Delta_j \nu_i^0\right) - - \frac{1}{2}(\tilde{X}_i m_j - \tilde{X}_j m_i) - \frac{1}{2}\lambda_m (\tilde{X}_i m_j + \tilde{X}_j m_i) + + \lambda_m (\tilde{X}_k m_k) m_i m_j + L_{ik} \nabla_j m_k.$$
(38)

Тензор Π_{ij} можно привести к симметричному виду, так как у полярной фазы нет вектора, описывающего спонтанный орбитальный момент. В рассматриваемом в задаче приближении (имеется в виду вид тензора L_{ij} вблизи T_c , выражения для силы X_i и тензора сверхтекучей плотности $(\rho_s)_{ij}$) данное действие можно проделать непосредственно. Легко показать, что антисимметричную часть тензора Π_{ij} можно представить в виде дивергенции от тензора третьего ранга, антисимметричного по двум оставпимся индексам:

$$\Pi_{ij} - \Pi_{ji} = \nabla_k (m_i L_{kj} - m_j L_{ki}), \tag{39}$$

тогда, воспользовавшись стандартной процедурой симметризации [9], в итоге получим

$$\Pi_{ik} = \Pi_{ik}^{0} + j_{i}^{(0)}(v_{s})_{k} + j_{k}^{(0)}(v_{s})_{i} + \\ + (\rho_{l} + \rho_{a})(v_{s})_{i}(v_{s})_{k},$$

$$\Pi_{ij}^{0} = p\delta_{ij} - \sigma_{ij} + \tilde{u}_{ik}\sigma_{jk} + \tilde{u}_{jk}\sigma_{ik} - \sigma_{ij}^{m} - \\ - \frac{\kappa_{a}}{2}(\lambda_{m} - \lambda_{\nu})\left(\delta_{i}\nu_{j}^{0} + \delta_{j}\nu_{i}^{0}\right) + \\ + \{\rho_{a} + \rho_{l}\}w_{i}w_{j} + \\ + \frac{1}{2}(1 - \lambda_{m})(\rho_{s}^{\parallel} - \rho_{s}^{\perp})w_{k}m_{k}\{w_{i}m_{j} + w_{j}m_{i}\} + \\ + \lambda_{m}(\rho_{s}^{\parallel} - \rho_{s}^{\perp})(w_{k}m_{k})^{2}m_{i}m_{j},$$

$$(40)$$

где σ^m_{ij} — симметричный тензор вида

$$\sigma_{ij}^{m} = -\frac{1}{2} (L_{jk} \partial_{i} m_{k} + L_{ik} \partial_{j} m_{k}) - \frac{1}{2} \partial_{k} [(L_{ij} + L_{ji}) m_{k} - L_{jk} m_{i} - L_{ik} m_{j}], \quad (41)$$

а выражение для X_i было подставлено из (12). Как и должно было быть, тензор потока импульса при галилеевском преобразовании меняется аналогично случаю изотропной сверхтекучей жидкости. Взаимодействие сверхтекучей системы с аэрогелем заключается в появлении дополнительной плотности ρ_a в определении $j_i^{(0)}$, а также в появлении в выражении для потока импульса тензора напряжений аэрогеля. Отметим также, что согласно введенному определению давление включает в себя зависимость от плотности аэрогеля (аналог парциального давления в смеси газов). Наконец, итоговое выражение для потока энергии имеет вид

$$Q_{i} = (Ts + \mu_{a}\rho_{a} + \mu_{l}\rho_{l} - p)(v_{n})_{i} + \mu_{l}(g_{s})_{i} + \Pi_{ij}(v_{n})_{j} - L_{ij}[\Omega_{jk}m_{k} + \lambda_{m}(\delta_{jk} - m_{j}m_{k})m_{p}(v_{n})_{kp}].$$
(42)

После определения тензоров Π_{ij} и ϕ_{ij} можно говорить о замкнутой системе нелинейных уравнений (17)–(21), (25), (26), (30), которая описывает совместные движения аэрогеля, нормальной и сверхтекучей компонент жидкости. В случае малых деформаций уравнения могут быть существенно упрощены. Во-первых, в выражении для потока импульса можно пренебречь членами $\tilde{u}_{ik}\sigma_{jk}$, $\tilde{u}_{jk}\sigma_{ik}$. Вовторых, заметим, что левые части уравнений (26), (30) можно линеаризовать по параметру u/L, где L

— характерный масштаб пространственного изменения гидродинамичесих переменных, u — характерная амплитуда смещения. Тогда δ_i становится линейной функцией деформации, а член в потоке импульса, содержащий данную переменную, приводится к виду

$$\frac{\kappa_a}{2}(\lambda_m - \lambda_\nu)^2 \left(u_{ik}\nu_k^0\nu_j^0 + u_{jk}\nu_k^0\nu_i^0 \right),\,$$

который имеет ту же тензорную структуру, что и член, пропорциональный γ_4 , в σ_{ij} . Данная перенормировка коэффициента γ_4 возникает при переходе в полярную фазу, так как $\kappa_a \sim \Delta_P^2$. Также покажем, что в рассматриваемом приближении учет неоднородности вектора **m** в энергии приводит к превышению точности. Действительно, из линеаризованного уравнения (26),

$$\frac{\partial m_i}{\partial t} = \Omega_{ij} m_j^{(0)} + \lambda_m (\delta_{ij} - m_i^0 m_j^{(0)}) m_k^{(0)} v_{jk}, \quad (43)$$

следует, что

$$\partial_{j}m_{i} = \frac{1}{2}\partial_{j} (\partial_{i}u_{k} - \partial_{k}u_{i}) m_{k}^{(0)} + \lambda_{m}(\delta_{il} - m_{i}^{0}m_{l}^{(0)})m_{k}^{(0)}\partial_{j}u_{lk}.$$
 (44)

В теории упругости рассматриваются только длинноволновые возмущения, поэтому в рассматриваемом приближении $\partial_j m_i$ является малой величиной следующего порядка по пространственному градиенту вектора смещения. Из сравнения соответствующих градиентных членов в выражении для энергии следует, что малым параметром разложения является $\frac{N_f \Delta_P^2}{\rho_a c_a^2} \frac{\xi_s^2}{L^2}$, где c_a — скорость звука в аэрогеле. Заметим, что здесь малой величиной помимо отношения длин является еще и величина $\frac{N_f \Delta_P^2}{\rho_a c_a^2}$, которая показывает, что вкладом в жесткость системы сверхтекучей компоненты можно пренебречь. Из сказанного выше следует, что в выражениях для потока импульса и потока энергии можно пренебречь членами с σ_{ij}^m , поэтому уравнения (26).

В качестве граничных условий к написанным уравнениям можно использовать требование непрерывности потоков через границу аэрогеля:

$$j_i^{in} n_i = j_i^{out} n_i, \tag{45}$$

$$\phi_{ij}^{in} n_j = \phi_{ij}^{out} n_j, \tag{46}$$

$$\Pi_{ij}^{in} n_j = \Pi_{ij}^{out} n_j, \tag{47}$$

где n_i — внешняя нормаль к поверхности аэрогеля, а все потоки вычисляются в системе, где аэрогель покоится. В линейном приближении, а также учитывая, что между аэрогелем и нормальной компонентой жидкости нет проскальзывания, получим следующие условия непрерывности на границе аэрогеля:

$$(g_s)_i n_i = \text{const},\tag{48}$$

$$\mu_l = \text{const},\tag{49}$$

$$(p\delta_{ij} - \sigma_{ij})n_j = \text{const.}$$
 (50)

Заметим, что в работе [12] было показано, что при потенциальном обтекании аэрогеля сверхтекучей жидкостью фаза параметра порядка является непрерывной функцией на границе аэрогеля в случае слабой неоднородности модуля параметра порядка в этой области, что не противоречит условию (49). Из непрерывности потока энтропии следует также, что

$$(v_n)_i^{out} n_i = (v_n)_i^{in} n_i.$$
(51)

При сделанных предположениях уравнение непрерывности потока энергии выполняется автоматически. Дополнительно отметим, что при выводе уравнений делалось предположение о сохранении полной массы жидкости, заключенной внутри аэрогеля. Поэтому, так как в рассматриваемом приближении нормальная компонента жестко связана с каркасом аэрогеля, сверхтекучие токи на границе аэрогеля должны удовлетворять дополнительному условию

$$\oint (g_s)_i n_i dS = 0,$$

где dS — элемент поверхности аэрогеля.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подытожим полученные результаты: нами получена система гидродинамических уравнений для полярной фазы сверхтекучего ³Не в одноосном нематическом аэрогеле, которая включает в себя уравнения для переменных $s, \rho_a, \rho_l, v_s, j_i, u_{ij}, m_i$ и δ_i . В линейном приближении движение орбитального вектора m_i , определяющего направление орбитальной части параметра порядка, не входит в уравнения для остальных гидродинамических переменных, а переменная δ_i становится линейной функцией тензора деформаций, что приводит к перенормировке коэффициента γ_4 в тензоре напряжений системы. Таким образом, в этом приближении гидродинамические уравнения для полярной фазы по форме ничем не отличаются от уравнений для изотропной сверхтекучей жидкости в том же аэрогеле за исключением замены сверхтекучей плотности (скаляра) в изотропном случае на тензор сверхтекучей плотности в случае полярной фазы. Так как в рассматриваемом приближении отсутствует проскальзывание между нормальной компонентой ³Не и аэрогелем, то плотность тока массы является линейной функцией от производной по времени от вектора смещения \dot{u}_i и сверхтекучей скорости $(v_s)_i$. Поэтому в качестве независимых переменных можно рассматривать s, ρ_a, ρ_l, v_s и u_i , причем уравнение сохранения импульса является уравнением второго порядка по пространственным и временным производным вектора смещения u_i . Отметим, что из-за взаимодействия аэрогеля и ³Не сохраняется полный импульс системы, т.е. происходит передача импульса от аэрогеля к ³He. Данный факт отражен в том, что тензор потока импульса содержит компоненты тензора напряжений аэрогеля. Таким образом, колебательный спектр системы должен включать в себя совместные колебания каркаса аэрогеля и сверхтекучего ³He. Исследование данного вопроса требует отдельного рассмотрения.

Отметим также еще одну деталь, которая отличает данную задачу от рассмотренной Халатниковым: помимо того, что тензор потока импульса содержит компоненты тензора напряжений аэрогеля, химический потенциал жидкости $\mu_l^{(0)}$ будет теперь зависеть не только от s, ρ_l и ρ_a , но и от компоненты *u*_{zz} тензора деформаций аэрогеля, что обеспечивает дополнительную возможность связи между различными колебательными степенями свободы в системе. Граничные условия к написанным уравнениям включают в себя требования непрерывности потоков рассмотренных гидродинамических величин. Поэтому при решении задачи о колебаниях аэрогеля внутри сверхтекучей жидкости необходимо также добавить в рассмотрение задачу о движении сверхтекучей жидкости вокруг аэрогеля с заданными граничными условиями на бесконечности. **Благодарности.** Автор признателен Л.А. Мельниковскому, И.А. Фомину и А.Н. Юдину за полезные комментарии.

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №18-12-00384).

ЛИТЕРАТУРА

- V. V. Dmitriev, A. A. Senin, A. A. Soldatov, and A. N. Yudin, Phys. Rev. Lett. **115**, 165304 (2015).
- В. В. Дмитриев, М. С. Кутузов, А. А. Солдатов,
 Е. В. Суровцев, А. Н. Юдин, Письма в ЖЭТФ 112, 820 (2020).
- V. V. Dmitriev, M. S. Kutuzov, A. A. Soldatov, and A. N. Yudin, Phys. Rev. Lett. **127**, 265301 (2021).
- 4. И. М. Халатников, ЖЭТФ 23, 169 (1952).
- M. J. McKenna, T. Slawecki, and J. D. Maynard, Phys. Rev. Lett. 66, 1878 (1991).
- A. Golov, D. A. Geller, and J. M. Parpia, Phys. Rev. Lett. 82, 3492 (1999).
- H. R. Brand and H. Pleiner, Phys. Rev. B 102, 094510 (2020).
- H. R. Brand and H. Pleiner, Phys. Rev. B 105, 174508 (2022).
- 9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (2005).
- **10**. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Гидродинамика*, Наука, Москва (2005).
- М. Э. Эглит, Лекции по основам механики сплошных сред, Ленанд, Москва (2020).
- **12**. Ε. Β. Суровцев, ЖЭΤΦ **160**, 553 (2021).

ТЕРМОМАГНИТНАЯ КОНВЕКЦИЯ ФЕРРОЖИДКОСТИ В ВЕРТИКАЛЬНОМ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОМ КОНТУРЕ: ИНТЕНСИФИКАЦИЯ ТЕПЛООБМЕНА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

М. А. Косков^{*}, А. Ф. Пшеничников^{**}

Институт механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук 614013, Пермь, Россия

> Поступила в редакцию 1 августа 2022 г., после переработки 9 августа 2022 г. Принята к публикации 9 августа 2022 г.

Для прояснения вопроса о влиянии магнитного поля на конвективный теплообмен в феррожидкости проведены эксперименты с замкнутым гидродинамическим контуром, расположенным в вертикальной плоскости и нагреваемым сбоку (конвективной петлей). Контур изготовлен из трубы круглого сечения и обдувается потоком термостатированного воздуха, обеспечивающим постоянство коэффициента теплоотдачи на поверхности труб. Для исключения конкуренции между гравитационными и термомагнитными течениями длина контура выбрана большой по сравнению с его внутренним диаметром. Показано, что в режиме стационарной конвекции вдоль контура устанавливается экспоненциальное распределение температуры. Определенный в опытах показатель экспоненты использовался для получения информации о расходе жидкости через поперечное сечение трубки и безразмерном интегральном тепловом потоке — числе Нуссельта. Опыты проведены с керосином и четырьмя образцами феррожидкости типа магнетит-керосин-олеиновая кислота, различающимися концентрацией магнитной фазы. Часть опытов проведена в нулевом магнитном поле (в условиях гравитационной конвекции), другая часть — в режиме смешанной (гравитационной и термомагнитной) конвекции. В последнем случае неоднородное магнитное поле с амплитудой 23 кА/м накладывалось на участок контура вблизи нагревателя. Результаты опытов приведены в безразмерных переменных — в виде зависимости числа Нуссельта Nu от теплового числа Рэлея Ra. Показано, что в нулевом магнитном поле функциональная зависимость Nu = Nu(Ra) одинакова для керосина и всех феррожидкостей. Включение магнитного поля вызывает термомагнитную конвекцию (сонаправленную с гравитационной), которая увеличивает конвективный теплообмен в три и более раз в зависимости от теплового числа Рэлея и концентрации магнитной фазы.

DOI: 10.31857/S0044451022120136 **EDN:** LDYMCG

1. ВВЕДЕНИЕ

Как известно [1–4], феррожидкости (магнитные жидкости) представляют собой коллоидные растворы с наноразмерными частицами ферро- или ферримагнетиков в обычных жидкостях, обладающие высокой чувствительностью к внешним магнитным полям. Обычно их магнитная восприимчивость имеет порядок нескольких единиц СИ, но при высокой концентрации магнитной фазы и низкой температуре может достигать сотни единиц [5,6]. Отметим, для сравнения, что восприимчивость типичных диаили парамагнитных жидкостей на четыре-шесть порядков меньше. Высокая чувствительность феррожидкости к внешнему полю и наличие вращательных степеней свободы коллоидных частиц приводят к сильной зависимости тензора напряжений и объемной пондеромоторной силы от напряженности магнитного поля, намагниченности жидкости и времени релаксации магнитных моментов частиц. Как результат наблюдаются новые гидродинамические явления, отсутствующие в обычной жидкости. Речь идет о зависимости гидростатического давления от напряженности магнитного поля и о магнитном скачке давления на границе феррожидкости [1–4], о левитации магнитных и немагнитных

^{*} E-mail: koskov.m@icmm.ru

^{**} E-mail: pshenichnikov@icmm.ru

тел [7–9], об анизотропном увеличении вязкости коллоидного раствора в постоянном магнитном поле и ее уменьшении в переменном поле подходящей частоты вплоть до смены знака [2, 3, 10, 11], о ротационном эффекте — вихревом течении феррожидкости во вращающемся поле, связанном с тангенциальными магнитными напряжениями на ее границах и объемными силами, возникающими из-за пространственной неоднородности жидкости и конечного времени релаксации намагниченности [12–16].

Еще одна важная особенность феррожидкости существование двух независимых механизмов тепловой конвекции. Первый механизм традиционный — это плавучесть вследствие теплового расширения жидкости. Интенсивность конвективных потоков тепла при этом определяется тепловым числом Рэлея [17]

$$Ra = \frac{g\beta_1 \rho h^3}{\eta a} \Delta T, \qquad (1)$$

где g — ускорение свободного падения, β_1 — коэффициент теплового расширения жидкости, ρ плотность, h — характерный размер сосуда, ΔT характерный перепад температуры, η — динамическая вязкость, a — температуропроводность. Второй механизм связан с температурной зависимостью намагниченности M. В неоднородном магнитном поле это приводит к возникновению некомпенсированной гидростатическим давлением пондеромоторной силы, вызывающей конвективное движение,

$$\mathbf{F}_m = -\mu_0 \frac{\partial M}{\partial T} T' \nabla H, \qquad (2)$$

где $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \, \Gamma \text{H/M}, T'$ — возмущение температуры. Роль гравитации в этом случае играет градиент напряженности *H* магнитного поля, а интенсивность тепловых потоков определяется магнитным числом Рэлея [2–4, 18, 19]:

$$\operatorname{Ra}_{m} = \frac{\mu_{0} M \beta_{2} |\nabla H| h^{3}}{\eta a} \Delta T, \qquad (3)$$

где $\beta_2 = -M^{-1} (\partial M/\partial T)$ — температурный коэффициент намагниченности. Несложные оценки показывают, что при одинаковых геометриях сосуда и равных перепадах температур магнитное число Рэлея может превышать тепловое на порядок и более. Эти оценки дают надежду на интенсификацию теплообмена в охлаждающих устройствах путем замены обычного теплоносителя феррожидкостью и наложения градиентного магнитного поля.

В последнее время опубликовано большое число работ по исследованию механического равновесия или слабых течений феррожидкости в замкнутых полостях, помещенных в однородное внешнее поле. Рассматривалась, например, термомагнитная конвекция в плоских горизонтальном [18-21] и вертикальном [22, 23] слоях, кубе [24, 25] и шаре [26]. Во всех этих случаях неоднородность магнитного поля в жидкости возникала из-за неоднородности температуры, поэтому интенсивность термомагнитной конвекции была сопоставима с интенсивностью гравитационной. Дальнейшая интенсификация теплообмена возможна, очевидно, только при использовании внешнего неоднородного поля. В этом случае градиент магнитного поля, входящий в числитель правой части формулы (3), становится независимым параметром и может изменяться в эксперименте в широких пределах.

Проблема интенсификации теплообмена с помощью феррожидкости исследуется экспериментально и численно, начиная, по-видимому, с работы [27], в которой предложено охлаждающее устройство, работающее без дополнительного насоса. Феррожидкость использовалась в качестве теплоносителя, а постоянный магнит — в качестве источника магнитного поля. По данным работы [28] применение магнитной жидкости для охлаждения небольших электродвигателей позволяет (при прочих равных условиях) повысить их мощность на 20-25 %. Для оценки вклада термомагнитной конвекции в теплоотдачу нагретых тел в работе [29] экспериментально исследована смешанная (гравитационная и термомагнитная) конвекция феррожидкости от немагнитного горизонтального цилиндра, погруженного в магнитную жидкость в однородном и неоднородном внешних полях. Авторы надеялись на аддитивность вкладов двух типов конвекции в теплоотдачу, но результаты опытов оказались отрицательными. Вклад термомагнитной конвекции оказался намного ниже ожидаемого. В качестве причины такого неожиданного результата рассматривается неблагоприятное для термомагнитной конвекции распределение магнитного поля вблизи цилиндра. В работе [30] численно решена задача о конвекции феррожидкости в прямоугольной полости в неоднородном поле с индукцией до 0.8 Тл при подогреве снизу. Сделан вывод об усилении теплопередачи в поле магнита как минимум на 50%. Аналогичный результат получен авторами работ [31, 32] на примере трубчатого солнечного коллектора. Замена немагнитного теплоносителя на слабоконцентрированную феррожидкость (объемная доля частиц Mn–ZnFe₂O₄ до 1%) и наложение внешнего магнитного поля с индукцией до 1.2 Тл увеличивает эффективность работы коллектора на 48.5%. В работе [33] численно исследована тепловая конвекция в цилиндрическом контейнере с феррожидкостью на маслянной основе и нагретым соленоидом, расположенным в центре контейнера. В зависимости от объемной доли частиц в феррожидкости и наличия в соленоиде ферромагнитного сердечника наблюдалось усиление теплоотдачи до 15%.

Обобщая результаты исследований [27–33] и подобных им, можно сделать вывод о том, что термомагнитная конвекция приводит к относительно слабому эффекту — интенсивность теплоотдачи возрастает на несколько десятков процентов по сравнению с гравитационной конвекцией. Эффект, безусловно, полезный, но он на порядок меньше того, что можно было бы ожидать из прямого сравнения теплового (1) и магнитного (3) чисел Рэлея.

Это бросающееся в глаза расхождение было отмечено ранее [3] на примере смешанной (гравитационной и термомагнитной) конвекции около горизонтального ферромагнитного цилиндра. Авторы объясняют его вихревой структурой термомагнитных потоков, распространяющихся в радиальном направлении на расстояние порядка диаметра цилиндра. Такое течение препятствует формированию теплового пограничного слоя с азимутальным течением — необходимого условия интенсификации конвективного теплообмена. По нашему мнению, это объяснение вполне подходит и для термомагнитной конвекции в произвольной односвязной полости с сосредоточенным источником магнитного поля. Напряженность магнитного поля убывает с расстоянием обратно пропорционально кубу расстояния или медленнее (как в двумерной задаче), захватывает большую часть пространства и препятствует формированию классического пограничного слоя.

Ситуация может измениться качественно при термомагнитной конвекции в замкнутом контуре (конвективной петле), если поперечные размеры трубы, образующей контур, и неоднородность поля в радиальном направлении будут достаточно малы. В этом случае радиальное течение становится невозможным, а осевая компонента пондеромоторной силы (2) будет сонаправленной с силами гравитации и приведет к интенсификации теплообмена. Разумеется, нагреватель и источник магнитного поля должны быть расположены при этом на одном и том же вертикальном участке контура. Конвективная петля с феррожидкостью рассматривается обычно как простейший вариант охлаждающего устройства, в котором феррожидкость, циркулирующая под действием пондеромоторной силы, непрерывно переносит тепло от нагревателя к холодильнику.

Экспериментальные работы по термомагнитной конвекции в замкнутом контуре, вышедшие за последние полтора десятилетия [34-38], демонстрируют одновременно прикладную перспективность конвективной петли с феррожилкостью и высокую чувствительность интенсивности теплообмена к большому числу параметров задачи. Речь идет о выборе дисперсионной среды и материала наночастиц, ориентации и месте приложения магнитного поля, агрегировании частиц в феррожидкости, появлении вторичных течений, оседании коллоидных частиц на стенках трубы и др. Эта чувствительность является, по-видимому, главной причиной большого разброса экспериментальных данных, касающихся интенсификации теплообмена за счет термомагнитной конвекции в замкнутом контуре. Так, в работе [36] конвективная петля с феррожидкостью использовалась для отвода тепла от электронного чипа. Обнаружено, что включение термомагнитного механизма конвекции снижает температуру охлаждаемой поверхности примерно на 10 °C. Это весьма скромный результат. Эксперименты [37] с тороидальной петлей предсказывают уже 100-процентное увеличение скорости течения феррожидкости в магнитном поле, а результаты численного моделирования [39] предсказывают двух — четырехкратное повышение «эффективности теплообмена».

Цель настоящей работы — прояснение ситуации с теплообменом при термомагнитной конвекции в замкнутом гидродинамическом контуре. Предлагается создание условий, максимально способствующих термомагнитной конвекции и обеспечивающих одновременно однозначную интерпретацию результатов. Наиболее значимыми для этой цели кажутся три фактора: геометрия установки, включая расположение источника магнитного поля относительно нагревателя; ориентация и напряженность магнитного поля; размер и концентрация магнитных наночастиц в коллоидном растворе. Предварительные результаты, полученные на черновом варианте установки, были опубликованы ранее [40]. В настоящей работе внимание сфокусировано на стабилизации теплообмена на внешней поверхности конвективной петли, реологии и физических свойствах феррожидкости, концентрации частиц и их распределении по размерам. Результаты опытов с четырьмя образцами феррожидкости, различающимися концентрацией магнитной фазы, приведены в виде безразмерной зависимости конвективного теплопотока (числа Нуссельта) от теплового числа Рэлея.



Рис. 1. Схема гидродинамического контура для исследования термомагнитной конвекции и локальная система координат с началом в центре нагревателя: 1 — стеклянная трубка с феррожидкостью; 2 — электрический нагреватель; 3 — постоянный магнит

2. СХЕМА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ УСТАНОВКИ

Замкнутый гидродинамический контур (конвективная петля овальной формы) был изготовлен из боросиликатной стеклянной трубки круглого сечения с внутренним радиусом $r_1 = 2.6$ мм и внешним радиусом $r_2 = 3.6$ мм (рис. 1). Компенсатор теплового расширения жидкости, выполненный из стеклянного капилляра, располагался в верхней части контура (на рисунке не показан). Длина контура по осевой линии составила $L = 35 \,\mathrm{cm}$, так что отношение внутреннего радиуса трубки к ее длине, равное 0.0074, можно было считать малым параметром с хорошей степенью точности. Тепло к контуру подводилось на небольшом вертикальном участке, охваченном градиентным магнитным полем. Электрический нагреватель сопротивлением 344 Ом при комнатной температуре был выполнен из бифилярно намотанной нихромовой проволоки диаметром 0.09 мм (рис. 2). Обмотка располагалась на внутренней поверхности эбонитового цилиндра, вставленного в разрез контура, и заливалась тонким слоем эпоксидной смолы. Внутренний диаметр нагревателя равнялся внутреннему диаметру стеклянной трубки. Для питания нагревателя использовался стабилизированный источник постоянного тока НҮЗООЗД-2.

В отличие от предыдущих работ, охлаждение контура осуществлялось по всей его длине, т. е. без использования дополнительного радиатора. С этой



Рис. 2. Вертикальное сечение нагревателя: 1 — стеклянная трубка; 2 — эбонитовый цилиндр; 3 — бифилярная спираль из нихромовой проволоки высотой $\ell = 18$ мм



Рис. 3. Схема воздушного термостата: 1 — пенопластовая камера; 2 — диффузор; 3 — вентилятор; 4 — радиатор; 5 — трубы для подачи тосола из жидкостного термостата Тегтех КРИО ВТ 12; 6 — конвективный контур; 7 — одна из термопар; 8 — Тегтоdat 25 Мб

целью конвективный контур помещался в камеру воздушного термостата размерами 500×350×300 мм (рис. 3) и обдувался воздухом с помощью лопастного вентилятора с фиксированной скоростью вращения лопастей. Как будет показано ниже, в режиме стационарной конвекции вдоль контура устанавливается экспонециальное распределение температуры. Определенный в опытах показатель экспоненты используется для получения информации о расходе жидкости через поперечное сечение трубки и безразмерном интегральном тепловом потоке — числе Нуссельта.



Рис. 4. Источник неоднородного магнитного поля и локальная система координат (вид сверху): 1 — ферритовый магнитопровод; 2 — постоянный магнит; 3 — нагреваемый участок контура

Температурные измерения проводились с погрешностью не выше 0.2 °C при помощи миниатюрных медь-константановых термопар с толщиной проводников 0.1 мм. ТермоЭДС измерялась в режиме реального времени милливольтметром Termodat 25 M6. Горячие спаи термопар располагались вдоль контура на поверхности стеклянной трубки, а холодные монтировались на термостатированном радиаторе 4 (рис. 3). Для улучшения теплового контакта между горячими спаями термопар и поверхностью стекла и для уменьшения систематической погрешности, связанной с оттоком тепла вдоль проводов, спаи термопар припаивались к полоскам медной фольги в форме полуцилиндра, которые наклеивались на поверхность трубки. Максимальный перепад температур ΔT на контуре, определяющий интенсивность тепловой конвекции, измерялся дополнительной термопарой, горячий и холодный спаи которой находились на верхнем и нижнем концах нагретого участка контура, соответственно.

Неоднородное магнитное поле создавалось системой, состоящей из постоянного магнита 2 типа неодим-железо-бор и ферритового магнитопровода 1 с плоскими полюсными наконечниками сечением 14×14 мм (рис. 4). Постоянный магнит имеет то очевидное преимущество по сравнению с короткой катушкой с током, часто используемой в опытах по термомагнитной конвекции, что он не нагревается в процессе работы. Включение или выключение магнитного поля не влияет на температурное поле в окружающем пространстве и не вызывает проблем с интерпретацией результатов температурных измерений. Напряженность магнитного поля измерялась тесламером Ш1-15-УЗ в среднем сечении xz рабоче-



Рис. 5. Горизонтальная компонента напряженности поля в рабочем зазоре намагничивающей системы. Вертикальные линии соотвествуют границе феррожидкости в канале

го зазора. Максимальное значение напряженности в отсутствие жидкости оказалось равным $23 \,\mathrm{kA/m}$. По результатам измерений, методом конечных разностей, оценивалась величина градиента поля. Выбранная геометрия магнитного поля обеспечивала условие $H_y^2 \gg H_x^2 \sim H_z^2$ внутри стеклянной трубки, поэтому при расчете градиента напряженности учитывалась только *y*-компонента поля.

Пространственное распределение напряженности поля и ее градиента приведены на рис. 5 и 6. Как видно на рис. 6, в месте размещения нагревателя градиент напряженности поля по порядку величины равен 10^6 A/m^2 . Его преимущественная ориентация вдоль оси трубки с феррожидкостью обеспечивает такую же ориентацию пондеромоторной силы (2) и наилучшие условия для термомагнитной конвекции.

3. ПРИГОТОВЛЕНИЕ И СВОЙСТВА ФЕРРОЖИДКОСТИ

В экспериментальной части работы наше внимание было сфокусировано на получении образцов магнитной жидкости, отвечающих, вообще говоря, противоречивым требованиям: малая энергия межчастичных магнитодипольных взаимодействий и относительно небольшая концентрация частиц в коллоидном растворе должны сочетаться с достаточно высоким температурным коэффициентом намагниченности. Рассмотрим эти условия более подробно.



Рис. 6. Модуль градиента напряженности магнитного поля в рабочем зазоре намагничивающей системы. Вертикальные линии соответствуют границе феррожидкости в канале

1) Параметр агрегирования (coupling parameter)

$$\kappa = \frac{\mu_0 m^2}{4\pi d^3 k_B T},\tag{4}$$

т. е. отношение энергии магнитодипольных взаимодействий к энергии теплового движения частиц должен быть достаточно мал ($\kappa < 1$), чтобы избежать появления в растворе крупных агрегатов [2]. Здесь m — магнитный момент частицы, T — абсолютная температура, $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \,\text{Дж/K}, d$ диаметр частицы вместе с защитной оболочкой из молекул ПАВ. При $\kappa > 1$ в феррожидкости появляются наноразмерные агрегаты в виде колец, цепочек и клубков [41, 42], а при $\kappa > 3$ наблюдается магнитно-чувствительный фазовый переход первого рода: феррожидкость спонтанно расслаивается на слабо- и сильноконцентрированные фазы [43–47]. Концентрированная фаза представлена капельными агрегатами с характерными размерами несколько десятков микрометров в отсутствие поля, начальной магнитной проницаемостью свыше сотни единиц и содержит наиболее крупные частицы [45]. На границе капельного агрегата с окружающей средой существует поверхностное натяжение, величина которого в нулевом поле имеет порядок 10^{-7} H/м [48]. Под действием магнитного поля капельный агрегат вытягивается в длинную нить, а при выключении поля принимает сферическую форму. Очевидно, что в опытах с термомагнитной конвекцией появление капельных агрегатов недопустимо. Они будут концентрироваться в области с максимальной напряженностью поля вследствие магнитофореза, частично или

полностью перекроют канал и приведут к ослаблению или полной блокировке конвективного движения.

Для контроля качества феррожидкости параметр агрегирования, усредненный по ансамблю частиц, рассчитывался нами по алгоритму, предложенному в работе [49], т. е. путем решения системы уравнений

$$\chi = \chi_L \left(1 + \frac{\chi_L}{3} + \frac{\chi_L^2}{144} \right), \quad \chi_L = 8\kappa\varphi, \qquad (5)$$

где χ и φ — измеряемые в эксперименте начальная магнитная восприимчивость жидкости и объемная концентрация коллоидных частиц с учетом защитных оболочек, соответственно, $\chi_L = \mu_0 \langle m^2 \rangle n/3k_BT$ — восприимчивость, вычисленная в ланжевеновском приближении, n — числовая плотность частиц в растворе. Угловые скобки $\langle \ldots \rangle$ означают усреднение по ансамблю частиц. Для всех образцов параметр агрегирования был одинаков $\kappa = 0.68 \pm 0.03$, так что образование крупных агрегатов в феррожидкости можно было исключить.

2) Поиск некоторой «оптимальной» концентрации магнитных наночастиц в коллоидном растворе. Предельные случаи слабо- и сильноконцентрированных растворов следует исключить из рассмотрения. В случае малых концентраций частиц магнитное число Рэлея (3) мало из-за малой намагниченности, а в пределе больших концентраций (более 50% по объему, включая защитные оболочки) оно мало из-за высокой вязкости раствора.

В опытах использовались четыре образца феррожидкости, различающиеся концентрацией частиц, но с одинаковым распределением частиц по размеру. Они были получены путем разбавления керосином базовой концентрированной феррожидкости керосин-магнетит-олеиновая кислота. Коллоидный магнетит для базового образца синтезирован стандартным методом химического осаждения [1], а желаемое распределение частиц по размерам — вариацией условий синтеза (концентрация используемых растворов солей железа и аммиака, pH среды, температуры, скорости подачи растворов и интенсивности перемешивания) [50]. Физические свойства образцов приведены в таблице.

Плотность ρ образцов жидкостей измерялась пикнометром при комнатной температуре. Объемная доля кристаллического магнетита φ_s рассчитывалась в предположении, что плотность защитной оболочки из молекул олеиновой кислоты на поверх-

№ обр.	$ ho,$ г/см 3	φ_s	$M_\infty,$ к ${ m A/M}^{*)}$	χ	$\langle x \rangle$, нм	$\langle m \rangle, 10^{-19} \mathrm{A\cdot m^2}$	$\eta, 10^{-3} \Pi \mathbf{a} \cdot \mathbf{c}$	φ
1	0.96	0.040					1.63	0.134
2	1.05	0.060	21.0	1.56	7.44	1.66	2.25	0.209
3	1.13	0.078		_	_		2.72	0.248
4	1.22	0.099	_			_	3.75	0.306
Базовый	1.43	0.145	52.0	5.13	7.38	1.61		0.471

Таблица. Физические свойства образцов феррожидкости

*) M_{∞} — намагниченность насыщения феррожидкости.

ности частиц мало отличается от плотности дисперсионной среды:

$$\varphi_s = \frac{\rho - \rho_k}{\rho_s - \rho_k},\tag{6}$$

где $\rho_k = 0.78 \, \mathrm{r/cm^3}$ — плотность керосина, $\rho_s = 5.24 \, \mathrm{r/cm^3}$ — плотность кристаллического магнетита.

Удельная теплоемкость C феррожидкости рассчитывалась по формуле, отражающей ее аддитивность:

$$C = \frac{C_k \rho_k \left(1 - \varphi_s\right) + C_s \rho_s \varphi_s}{\rho}$$

где $C_k = 2.0 \, \mathrm{K} \ \mathrm{Z} \ \mathrm{K} \ \mathrm{K}, \ C_s = 0.59 \, \mathrm{K} \ \mathrm{Z} \ \mathrm{Z} \ \mathrm{Z} \ \mathrm{K} \ \mathrm{K} \ \mathrm{K}$ удельные теплоемкости керосина и магнетита, соответственно. Коэффициент теплопроводности λ_1 вычислялся по формуле [4]

$$\lambda_{1} = \lambda_{k} \left[1 - \frac{3 \left(\lambda_{k} - \lambda_{s} \right) \varphi_{s}}{2 \lambda_{k} + \lambda_{s} + \left(\lambda_{k} - \lambda_{s} \right) \varphi_{s}} \right]$$

где $\lambda_k = 0.11 \,\mathrm{Bt/m} \cdot \mathrm{K}, \ \lambda_s = 5.3 \,\mathrm{Bt/m} \cdot \mathrm{K} \ [51, 52]$ — теплопроводности керосина и массивного магнетита при комнатной температуре. При вычислении коэффициента объемного теплового расширения β_1 феррожидкости тепловым расширением магнетита пренебрегалось:

$$\beta_1 = \frac{\beta_k \rho_k \left(1 - \varphi_s\right)}{\rho},$$

где $\beta_k = 9.6 \cdot 10^{-4} \,\mathrm{K}^{-1}$ — коэффициент объемного расширения керосина [51].

Магнитные моменты частиц и распределение частиц по диаметрам магнитных ядер определялись в процессе обработки экспериментальной кривой намагничивания. Использовался вариант магнитогранулометрического анализа, при котором расчет параметров распределения проводится по начальному участку кривой намагничивания и асимптотике намагниченности в сильных полях [53]. Намагниченность раствора определялась методом дифференциальной прогонки, при котором непосредственно измеряется дифференциальная магнитная восприимчивость $\chi = \chi(H)$ жидкости, а кривая намагничивания находится численным интегрированием:

$$M(H) = \int_{0}^{H} \chi(H) \,\mathrm{d}H$$

Дисперсный состав частиц аппроксимировался гамма-распределением:

$$f(x) = \frac{x^{\sigma} \exp\left(-x/x_{0}\right)}{x_{0}^{\sigma+1} \Gamma(\sigma+1)},$$
(7)

которое хорошо зарекомендовало себя и многократно использовалось ранее при анализе магнетитовых коллоидов. Здесь x — диаметр магнитного ядра коллоидной частицы, $\Gamma(...)$ — гамма-функция, x_0 и σ — параметры распределения, подлежащие определению из экспериментальной кривой намагничивания M(H). Для сферических частиц, подчиняющихся распределению (7), средний диаметр магнитного ядра частицы и относительная ширина распределения равны соответственно $\langle x \rangle = x_0 (\sigma + 1)$ и $\delta_x = 1/\sqrt{\sigma + 1}$. Результаты магнитных измерений приведены в таблице, а распределение частиц по размерам — на рис. 7.

Динамическая вязкость η образцов измерялась ротационным вискозиметром Anton Paar в режиме осцилляций в диапазоне температур от 25 до 42 °C в нулевом магнитном поле. Реологические кривые (рис. 8) демонстрируют ньютоновское поведение феррожидкостей во всем диапазоне исследованых концентраций и скоростей сдвига. Так как опыты по термомагнитной конвекции проводились в поле напряженностью до 23 кА/м, встает вопрос об анизотропном увеличении вязкости феррожидкости в результате частичной блокировки вращательных степеней свободы частиц [1–4]. В случае магнитожестких частиц с броуновским механизмом релаксации магнитных моментов и разбавленных растворов



Рис. 7. Распределение колоидных частиц по размерам магнитных ядер согласно формуле (7). Использованы усредненные параметры распределения: $\sigma = 4.84$, $x_0 = 1.28$ нм



Рис. 8. Реологические кривые феррожидкостей с различной концентрацией магнетита

полевая зависимость эффективной вязкости описывается известной формулой [2]

$$\frac{\Delta\eta}{\eta_0} = \frac{3}{2}\varphi \frac{\xi - \mathrm{th}\,\xi}{\xi + \mathrm{th}\,\xi} \sin^2\psi,$$

где $\xi = \mu_0 m H/k_B T$ — параметр Ланжевена — отношение энергии взаимодействия магнитного момента **m** частицы с внешним полем к энергии теплового движения, η_0 — вязкость дисперсионной среды, ψ угол между напряженностью поля и локальной завихренностью жидкости. По оценкам [54] в магнетитовых коллоидах на основе керосина к частицам с броуновской релаксацией намагниченности относятся частицы с диаметром магнитного ядра больше 16–18 нм. Как видно на рис. 7, в образцах феррожидкости, использованных в данной работе, процентное содержание таких крупных частиц было несущественным, поэтому магнитовязкий эффект не учитывался. Дополнительным аргументом в пользу такого подхода служило то обстоятельство, что магнитное поле было приложено только к короткому участку конвективного контура. Основной вклад в вязкое трение вносила та часть контура, на которой магнитное поле отсутствовало.

Согласно известной аппроксимации Chow [55], динамическая вязкость устойчивой суспензии на основе ньютоновской жидкости, какой является феррожидкость, очищенная от избытка стабилизатора, является однозначной функцией доли φ частиц с учетом защитных оболочек и вязкости η_0 дисперсионной среды:

$$\frac{\eta}{\eta_0} = \exp\left(\frac{2.5\varphi}{1-\varphi}\right) + \frac{A\varphi^2}{1-A\gamma_m\varphi^2},\tag{8}$$

где A = 4.67, а γ_m — коэффициент предельной упаковки, определение которого представляет некую проблему. Как показано в работе [56], вязкость феррожидкостей хорошо описывается формулой (8) в широком диапазоне концентраций при $\gamma_m = 0.605$. Это значение коэффициента упаковки соответствует предельной концентрации частиц, при которой еще возможно вязкое течение суспензии [57,58]. Из формулы и экспериментов [1, 59] следует, что вязкость высококонцентрированных феррожидкостей может на два-три порядка превышать вязкость дисперсионной среды, что делает их непригодными для устройств с термомагнитной конвекцией. Формула (8) использовалась для расчета гидродинамической «концентрации» φ частиц, включающей объемы магнитных ядер частиц, тонких приповерхностных слоев на кристаллах магнетита, не вносящих вклад в намагниченность феррожидкости [49], и защитных оболочек из молекул олеиновой кислоты (см. таблицу).

В отличие от экспоненциально быстрого роста вязкости феррожидкости с концентрацией частиц, рост намагниченности в сильных полях происходит более медленно — по линейному закону. По этой причине (как будет показано ниже) увеличение объемной концентрации частиц выше 25–30 % является неоправданным, так как приводит к уменьшению магнитного числа Рэлея (3) и интенсивности конвективного теплообмена.

4. УСЛОВИЯ ОХЛАЖДЕНИЯ КОНТУРА И РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ОХЛАЖДАЕМОМ УЧАСТКЕ

Магнитное поле и источники тепла локализованы на активном участке контура длиной около 30 мм (см. рис. 5, 6), на котором и возникает пондеромоторная сила, вызывающая термомагнитную конвекцию феррожидкости. За пределами активного участка магнитное поле и источники тепла отсутствуют. Нагретая жидкость движется при этом вдоль канала, постепенно отдавая тепло через его стенки и формируя затухающее с продольной координатой распределение температуры. В условиях стационарной конвекции коэффициент затухания зависит от интенсивности течения и может быть использован для определения осевого теплопотока.

Рассмотрим задачу о ламинарном течении нагретой жидкости вдоль охлаждаемого канала подробнее, используя локальную систему координат, начало которой расположено в центре нагревателя, а ось z направлена вертикально вверх (см. рис. 1). Так как внутренний радиус канала мал по сравнению с его длиной и радиусом кривизны контура $(r_1/L = 0.0074)$, радиальной компонентой скорости можно пренебречь, полагая $\mathbf{u} = \{0, 0, u(r)\}$. Задача становится осесимметричной, и профиль скорости можно аппроксимировать параболой [60,61]:

$$u(r) = u_0 \left(1 - \frac{r^2}{r_1^2}\right),$$
 (9)

где u_0 — скорость потока жидкости на оси канала. С учетом осевой симметрии задачи уравнение стационарного конвективного теплопереноса упрощается и в цилиндрических координатах принимает вид

$$u(r)\frac{\partial T}{\partial z} = a \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right]$$

Учитывая аппроксимацию (9), запишем его в безразмерном виде:

$$U_0 \left(1 - R^2\right) \frac{\partial \Theta}{\partial Z} = \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left(R \frac{\partial \Theta}{\partial R}\right) + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial Z^2}.$$
 (10)

За единицу измерения расстояния принят внутренний радиус канала r_1 ; температуры — ΔT ; скорости — a/r_1 ; $a = \lambda_1/\rho C$. Здесь и в дальнейшем температура воздуха, охлаждающего контур, принята за начало отсчета. Уравнение (10) допускает разделение переменных с экспоненциальным затуханием температуры с продольной координатой, $\Theta(R, Z) = \theta(R) \exp(-KZ)$, где $\theta(R)$ описывается уравнением

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial \theta}{\partial R} + K U_0 \left(1 - R^2 \right) \theta(R) = 0.$$
(11)

Последнее слагаемое в правой части уравнения (10), ответственное за молекулярный поток тепла вдоль контура, квадратично по малому параметру $r_1/L \approx 10^{-2}$ и в уравнении (11) отсутствует.

Уравнение (11) допускает точное решение в виде суперпозиции функций Куммера, являющихся решением вырожденного гипергеометрического уравнения [62, 63]. Тем не менее чрезмерная громоздкость промежуточных преобразований и невозможность получения простых аналитических формул для обработки экспериментальных результатов делает более привлекательным приближенное решение уравнения (11) методом Галёркина [64]. Как будет показано ниже, в этом случае достаточно использовать единственную базисную функцию в виде

$$\theta(R) = \theta_1 + (\theta_0 - \theta_1) \left(1 - R^2\right), \qquad (12)$$

где θ_0 и θ_1 — температуры на оси канала и на его внутренней стенке, соответственно. Подстановка аппроксимации (12) в уравнение (11) дает невязку в виде

$$\delta(R) = -4 \left(\theta_0 - \theta_1\right) + KU_0 \left(1 - R^2\right) \left[\theta_1 + \left(\theta_0 - \theta_1\right) \left(1 - R^2\right)\right],$$

а условие ортогональности базисной функции к невязке,

$$\int_{0}^{1} \theta(R)\delta(R)R\,\mathrm{d}R = 0,$$

определяет безразмерную амплитуду скорости жид-кости

$$KU_0 = \frac{24\left(\theta_0^2 - \theta_1^2\right)}{2\theta_0^2 + \left(\theta_0 + \theta_1\right)^2}.$$
 (13)

Распределение температуры в стенке канала изменяется по логарифмическому закону, а интегральный поток тепла q в радиальном направлении однороден по радиусу. В размерном виде они описываются известными формулами [17]

$$T(r, z) = \left[\theta_1 - \frac{\theta_1 - \theta_2}{\ln(r_2/r_1)} \ln(r/r_1)\right] \times \\ \times \Delta T \exp(-kz),$$
(14)

$$q = \left[2\pi\lambda_2 \frac{\theta_1 - \theta_2}{\ln(r_2/r_1)}\right] \Delta T \exp\left(-kz\right).$$

где λ_2 и θ_2 — теплопроводность материала стенки и безразмерная температура на ее внешней поверхности, соответственно, $k = K/r_1$ — размерный коэффициент затухания. Граничное условие на внешней поверхности задается в виде закона Ньютона – Рихмана для теплоотдачи от твердой поверхности, контактирующей с газовой средой:

$$q = 2\pi r_2 \alpha \theta_2 \Delta T \exp\left(-kz\right),\tag{15}$$

где α — коэффициент теплоотдачи, подлежащий определению в дополнительных опытах. В стационарных условиях радиальный поток тепла через внутреннюю границу канала,

$$q = -2\pi\lambda_1 r_1 \frac{\partial T}{\partial r} \bigg|_{r_1} = 4\pi\lambda_1 \left(\theta_0 - \theta_1\right) \Delta T \exp\left(-kz\right),$$

должен совпадать с потоками (14) и (15). Это условие приводит к двойному равенству

$$2\left(\theta_0 - \theta_1\right) = \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \frac{\left(\theta_1 - \theta_2\right)}{\ln\left(r_2/r_1\right)} = \operatorname{Bi}\theta_2, \qquad (16)$$

где $\operatorname{Bi} = \alpha r_2 / \lambda_1 -$ число Био.

Определим теперь число Нуссельта Nu как отношение конвективного теплопотока вдоль контура к молекулярному. Конвективный теплопоток равен

$$Q_{conv} = 2\pi\rho C \int_{0}^{r_{1}} T(r)u(r)r \, dr =$$

= $\frac{\pi}{6}\rho C\Delta T u_{0}r_{1}^{2} \left(2\theta_{0} + \theta_{1}\right)\exp\left(-kz\right),$

а молекулярный —

$$Q_{mol} = \frac{\pi}{2} \lambda_1 r_1^2 k \Delta T \left(\theta_0 + \theta_1\right) \exp\left(-kz\right).$$

С учетом формулы (13) для безразмерной амплитуды скорости, двойного равенства (16) и малости параметра $\lambda_1 \lambda_2^{-1} \ln (r_2/r_1) \approx 0.05$ по сравнению с единицей получаем

$$Nu = \frac{Q_{conv}}{Q_{mol}} = \frac{4Bi(3+Bi)}{K^2(6+4Bi+0.75Bi^2)}.$$
 (17)

Как видно из формулы (17), число Нуссельта однозначно определяется числом Био и коэффициентом затухания температуры с увеличением расстояния от нагревателя. Проведенное нами сравнение приближенной формулы (17) с результатами точного решения уравнения (11) обнаружило систематическую погрешность в сторону завышения числа Нуссельта на 2–3 % в области Bi < 1. Эта погрешность, однако, никак не влияет на интерпретацию экспериментальных результатов, так как мала по сравнению с обнаруженными эффектами (усилением теплоотдачи в магнитном поле на 200–300%) и одинаково влияет на результаты опытов с обычными и намагничивающимися жидкостями.

Измерение коэффициента теплоотдачи α на поверхности контура проводилось в независимом эксперименте. В камеру воздушного термостата помещался стержневой нагреватель в виде длинной стеклянной трубки с внешним радиусом 3.5 мм и длиной 151 мм, имитирующей часть конвективного контура. Внутри трубки находился электрический нагреватель из манганиновой проволоки, питающийся от стабилизированного источника постоянного тока. Температурные измерения проводились при помощи медь-константановых термопар, идентичных термопарам, описанным ранее. Коэффициент теплоотдачи а вычислялся по тепловой мощности нагревателя и установившейся разности температур между поверхностью нагревателя и охлаждающим воздухом. Измерения проводились при мощностях нагрева в диапазоне 0.15-0.71 Вт и различных ориентациях нагревателя. Среднее значение коэффициента теплоотдачи оказалось равным $20 \pm 1 \,\mathrm{Br/m}^2 \cdot \mathrm{K}$.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ КОНВЕКТИВНЫХ ОПЫТОВ И АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Каждый образец феррожидкости использовался в двух сериях измерений. В первой серии исследовалась гравитационная конвекция в нулевом магнитном поле. В этой же серии проведены опыты с керосином, который рассматривался как предельный случай феррожидкости с нулевой концентрацией коллоидных частиц. Во второй серии исследовалась смешанная гравитационная и термомагнитная конвекция при наложении градиентного магнитного поля (с напряженностью до 23 кА/м в отсутствие феррожидкости) на участок контура вблизи нагревателя. Во всех опытах температура воздушного термостата была равна 27 °С. Стационарное распределение температуры в контуре достигалось через несколько десятков минут после включения нагревателя. Примеры установления стационарной конвекции феррожидкости с объемной долей магнетита $\varphi_s = 0.060$ приведены на рис. 9. Небольшой «дребезг» термопарных показаний связан, по-видимому, с дискретностью цифрового прибора. Для исключения его влияния на результаты



Рис. 9. Установление стационарного режима в конвективных опытах с образцом № 2 ($\varphi_s = 0.060$). T_1 , T_3 , T_5 — показания трех термопар, удаленных от середины нагревателя на расстояния z = 30, 160, 290 мм, соответственно, в зависимости от времени работы нагревателя: a — опыт в нулевом магнитном поле; b — в градиентном поле

измерений проводились накопление данных, снимаемых в течение 60 мин с интервалом в 30 с, и последующее усреднение. Во всех опытах среднеквадратичное отклонение температуры оказалось пренебрежимо малым по сравнению с приборной погрешностью $\delta T = 0.2$ °C, которая и принималась в итоге за ошибку температурных измерений. По полученным средним значениям строились профили температуры $T_i = T(z_i)$ вдоль охлаждаемого участка контура ($i = 1, \ldots, 5$ — номер термопары).

Типичные примеры распределения температуры вдоль контура приведены на рис. 10 в полулогарифмическом масштабе. Профили температуры аппроксимировались экспоненциальными кривыми по стандартному алгоритму метода наименьших квадратов с весовыми коэффициентами $w_i = T_i/\delta T$. Использование весовых коэффициентов позволяло компенсировать зависимость относительной погрешности измерений от продольной координаты z. Как видно на рис. 10, экспериментальные точки в пределах погрешности ложатся на аппроксимирующие кривые, показанные сплошными линиями. Это обстоятельство является важным аргументом в пользу формулы (17) для определения числа Нуссельта в опытах с конвективной петлей.

Согласно формуле (17), вклад термомагнитной конвекции в интегральный тепловой поток (число Нуссельта) можно оценить по изменению величины K^{-2} после включения магнитного поля. Такие изменения хорошо видны на рис. 11, где величина K^{-2} представлена в зависимости от перепада температуры ΔT на нагревателе: при фиксированной раз-

ности температур вклад термомагнитной конвекции в тепловой поток превосходил вклад гравитационной. Так, в опытах с образцом №1 (с концентрацией магнетита 0.040) тепловой поток при включении термомагнитной конвекции усиливался в 2-2.4 раза, а для образца №4 (с концентрацией 0.099) — в 3.7 раза. Здесь необходимо отметить, что разность температур ΔT в описываемых опытах не является независимым параметром, она сама устанавливается в процессе конвекции (см., например, рис. 9). Поэтому было бы правильнее говорить, о влиянии термомагнитной конвекции на перепад температуры при фиксированной величине К, т.е. фиксированном теплопотоке. В рамках такого подхода можно утверждать, что при фиксированной мощности нагревателя термомагнитная конвекция уменьшает перепад температур на нагревателе в 2–3.5 раза.

Стандартное представление результатов по конвективной теплопередаче в виде зависимости Nu = Nu(Ra) приведено на рис 12. Как и следовало ожидать, результаты всех опытов в нулевом поле (включая опыты с керосином) ложатся на одну универсальную кривую. Различие состоит лишь в том, что менее вязкие образцы жидкостей при прочих равных условиях позволяют получить бо́льшие числа Рэлея. Слабая зависимость числа Нуссельта от числа Прандтля $\Pr = \eta C/\lambda_1$, потенциально возможная с учетом известных данных по теплопередаче [17], здесь незаметна, так как при переходе от одного образца к другому число Прандтля изменяется в относительно небольшом диапазоне ($\Pr = 19-38$).



Рис. 10. Распределение температуры вдоль охлаждаемого участка контура для феррожидкости с минимальной $\varphi_s = 0.040$ (*a*) и максимальной $\varphi_s = 0.099$ (*b*) концентрациями частиц при различной мощности нагревателя. Темными символами обозначены результаты опытов в градиентном магнитном поле, светлыми — в нулевом поле. Сплошные линии соответствуют затухающим экспонентам



Рис. 11. Величина K^{-2} в зависимости от перепада температуры ΔT на нагревателе. Темные символы соотвествуют опытам в градиентном магнитном поле, светлые в нулевом поле. Линии тренда — результат линейной аппроксимации

Наложение магнитного поля запускает механизм термомагнитной конвекции, которая увеличивает конвективный тепловой поток (число Нуссельта) в 2.5–3.5 раз. Характерная скорость термомагнитного течения определяется уравнением (13) и в условиях проводившихся опытов имела порядок нескольких мм/с. Поскольку с ростом концентрации коллоидных частиц в растворе увеличивается намагниченность феррожидкости, увеличивается и наклон соответствующих кривых Nu = Nu(Ra). Тем не менее если ориентироваться на термомагнитную конвекцию с максимальной интенсивностью, то оказывается, что наилучшие результаты достигаются на растворах с умеренной концентрацией магнетита в диапазоне $\varphi_s = 0.04-0.06$. При меньших концентрациях магнетита интенсивность конвекции уменьшается за счет уменьшения намагниченности, а при бо́льших за счет увеличения вязкости раствора. В диапазоне концентраций $\varphi_s = 0.04-0.06$ эти два конкурирующие механизма компенсируют друг друга.

При движении феррожидкости сквозь неоднородное магнитное поле его напряженность, его градиент и намагниченность изменяются в широких пределах от нуля до некоторых значений. Это означает, что при вычислении магнитного числа Рэлея в формуле (3) должны стоять некие усредненные по координатам величины. Алгоритм усреднения может быть получен в результате решения сопряженной краевой задачи о неизотермическом течении феррожидкости на участке канала с неоднородным магнитным полем, но к настоящему времени остается неясным. По этой причине в работе проведены только грубые оценки магнитных чисел Рэлея [40]. Эти оценки показали, что в условиях проводившихся опытов тепловые и магнитные числа Рэлея совпадают по порядку величины, а гравитационный и термомагнитный механизмы конвекции «работают» вполне независимо друг от друга. Это означает также, что в условиях пониженной гравитации следует ожидать примерно такой же интенсивности термомагнитной конвекции, как и в наземных условиях.



Рис. 12. Число Нуссельта в зависимости от теплового числа Рэлея. Темные символы соответствуют конвективным опытам в градиентном магнитном поле, светлые — в нулевом поле

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе экспериментально исследована тепловая конвекция феррожидкости в подогреваемом сбоку замкнутом гидродинамическом контуре при наложении на нагретый участок градиентного магнитного поля. Цель работы определить степень влияния термомагнитной конвекции на интенсивность теплообмена в системе нагреватель-жидкость в наиболее благоприятных условиях. Эти «благоприятные» условия подразумевают, во-первых, оптимальную геометрию экспериментальной установки (в виде замкнутого контура, длина которого велика по сравнению с внутренним диаметром), исключающую разнонаправленность и конкуренцию гравитационных и термомагнитных течений. Немаловажную роль при этом играют простота и надежность температурных измерений. Во-вторых, выбор феррожидкости, которая должна удовлетворять, вообще говоря, противоречивым требованиям. Ее высокая термодинамическая и седиментационная устойчивость, исключающая образование крупных агрегатов, должна сочетаться с достаточно высокой намагниченностью и малой вязкостью раствора. Эта цель была достигнута подбором дисперсного состава и вариацией концентрации коллоидных частиц. Опыты проведены с четырьмя образцами феррожидкости, различающимися концентрацией частиц (см. таблицу), и с керосином, который являлся дисперсионной средой для всех образцов. Наконец, в-третьих, стабильные контролируемые условия теплоотдачи на внешних границах контура. Конвективный контур помещался в воздушный

термостат, что обеспечивало постоянство и однородность коэффициента теплоотдачи на его внешней поверхности.

Решение задачи о распределении температуры внутри канала в режиме стационарной гравитационной и/или термомагнитной конвекции показало, что безразмерный поток тепла (число Нуссельта) однозначно выражается через число Био (параметр, отражающий интенсивность теплообмена канала с окружающей средой) и пространственный декремент затухания температуры. Опыты в условиях стационарной конвекции подтвердили экспоненциальное распределение температуры вдоль контура в хорошем согласии с предположениями при выводе формул (11)–(17). Показатель экспоненты использовался для расчета числа Нуссельта в соответствии с формулой (17). В работе исследован диапазон тепловых чисел Рэлея $Ra = 10^3 - 10^4$, которому соответствует достаточно интенсивная гравитационная конвекция, при которой конвективный теплоперенос на три порядка превышал молекулярный (Nu $\sim 10^3$). Как и следовало ожидать, результаты всех опытов в нулевом поле, представленные в безразмерных координатах, укладываются на одну универсальную кривую Nu = Nu(Ra), несмотря на большое различие в теплофизических свойствах использованных жидкостей (см. рис. 12). Развитая гравитационная конвекция феррожидкости, таким образом, ничем не отличается от конвекции гомогенной жидкости. Слабая зависимость числа Нуссельта от числа Прандтля, потенциально возможная с учетом известных данных по теплопередаче [17], здесь оказалась незаметной.

Включение неоднородного магнитного поля вызывает термомагнитную конвекцию с характерными скоростями в несколько мм/с, приводящую к интенсификации теплообмена. В условиях проводившихся экспериментов (фиксированная мощность нагревателя и фиксированный интегральный теплопоток) термомагнитная конвекция уменьшает перепад температуры на нагревателе примерно в 2-3.5 раза (см. рис. 11). Примерно такой же эффект следует ожидать в опытах с фиксированным числом Рэлея. Согласно рис. 12, интегральный теплопоток должен увеличится в 2.5-3.5 раза в зависимости от концентрации частиц. С ростом концентрации частиц увеличиваются намагниченность ферожидкости, магнитное число Рэлея и наклон кривой Nu = Nu(Ra). Что касается увеличения вязкости феррожидкости с концентрацией частиц, то она учитывается в этих координатах автоматически при вычислении чисел Рэлея. Как видно на рис. 12, наибольшие значения

числа Нуссельта достигаются при объемной доле магнетита около 6 %.

Напряженность магнитного поля, его градиент и намагниченность изменяются с координатами в широких пределах от нуля до некоторых максимальных значений. Это означает, что при вычислении магнитного числа Рэлея в формуле (3) должны стоять некие усредненные по координатам величины. Так как алгоритм усреднения неизвестен, в работе приведены только грубые оценки магнитных чисел Рэлея. Эти оценки показали, что в условиях проводившихся опытов тепловые и магнитные числа Рэлея совпадают по порядку величины, а гравитационный и термомагнитный механизмы конвекции «работают» вполне независимо друг от друга. Это означает также, что в условиях пониженной гравитации следует ожидать примерно такой же интенсивности термомагнитной конвекции, как и в наземных условиях.

В заключение отметим, что полученные здесь результаты находятся в хорошем согласии с данными численного моделирования [39] конвективной петли с характерным размером 1 м и мощностью нагревателя 10–1000 Вт с магнитной жидкостью в качестве теплоносителя. Авторы работы [39] предсказали усиление теплообмена за счет термомагнитной конвекции в 2–4 раза.

Благодарности. Авторы благодарят заведующего лаборатории «Динамика дисперсных систем» ИМСС УрО РАН А. С. Иванова за интерес к работе и помощь в синтезе базового образца феррожидкости, старшего научного сотрудника ИМСС УрО РАН А. В. Лебедева, любезно предоставившего результаты магнитогранулометрического анализа, и доцента кафедры «Физики фазовых переходов» ПГНИУ В. Г. Гилёва за помощь в реологических измерениях.

Финансирование. Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований Российской академии наук (рег. № АААА-А20-120020690030-5).

ЛИТЕРАТУРА

- Р. Розенцвейг, Феррогидродинамика, Мир, Москва (1989).
- 2. М.И.Шлиомис, УФН 112, 427 (1974).

- **3**. Э. Я. Блум, М. М. Майоров, А. О. Цеберс, *Маг*нитные жидкости, Рига, Зинатне (1989).
- Б. М. Берковский, В. Ф. Медведев, М. С. Краков, Магнитные экидкости, Москва, Химия (1989).
- H. Mamiya, I. Nakatani, and T. Furubayashi, Phys. Rev. Lett. 84, 6106 (2000).
- A. F. Pshenichnikov and A. V. Lebedev, J. Chem. Phys. 121, 5455 (2004).
- 7. R. E. Rosensweig, Nature 210, 613 (1966).
- А. С. Квитанцев, В. А. Налетова, В. А. Турков, Изв. РАН, сер. МЖГ № 3, 12 (2002).
- A. S. Ivanov, A. F. Pshenichnikov, and C. A. Chokhryakova, Phys. Fluids 32, 112007 (2020).
- M. I. Shliomis and K. I. Morozov, Phys. Fluids 6, 2855 (1994).
- M. Zahn and L. L. Pioch, J. Magn. Magn. Mater. 201, 144 (1999).
- R. E. Rosensweig, J. Popplewell, and R. J. Johnston, J. Magn. Magn. Mater. 85, 171 (1990).
- A. V. Lebedev and A. F. Pshenichnikov, J. Magn. Magn. Mater. 122, 227 (1993).
- 14. F. Gazeau, C. Baravian, J.-C. Bacri et al., Phys. Rev. E 56, 614 (1997).
- 15. A.F. Pshenichnikov and A.V. Lebedev, Magnetohydrodyn. 36, 254 (2000).
- 16. M. I. Shliomis, Phys. Rev. Fluids 6, 043701 (2021).
- 17. В. П. Исаченко, В. А. Осипова, А. С. Сукомел, *Теплопередача*, Москва, Энергия (1975).
- M. I. Shliomis and B. L. Smorodin, J. Magn. Magn. Mater. 252, 197 (2002).
- 19. P. Matura and M. Lücke, Phys. Rev. E 80, 026314, (2009).
- 20. N.V. Kolchanov and G.V. Putin, Int. J. Heat and Mass Transfer 89, 90 (2015).
- 21. H. Rahman and S. Suslov, J. Fluid Mech. 764, 316 (2015).
- 22. A. Gui, L. Khan, S. Shafie et al., PLoS ONE 10, e0141213 (2015).
- 23. S. A. Suslov, Phys. Fluids 20, 084101 (2008).
- 24. M. S. Krakov, I. V. Nikiforov, and A. G. Reks, J. Magn. Magn. Mater. 289, 272 (2005).
- 25. H. Yamaguchi, X. D. Niu, X. R. Zhang et al., J. Magn. Magn. Mater. **321**, 3665 (2009).

- 26. M. T. Krauzin, A. A. Bozhko, P. V. Krauzin et al., J. Magn. Magn. Mater. 431, 241 (2017).
- 27. H. Matsuki, K. Yamasawa, and K. Murakami, IEEE Trans. on Magn. 13, 1143 (1977).
- 28. В. А. Старовойтов, Вестник КузГТУ 2, 20 (2005).
- 29. E. Blums, A. Mezulis, and G. Kronkalns, J. Phys.: Condens. Matter 20, 204128 (2008).
- D. Zablockis, V. Frishfelds, and E. Blums, Magnetohydrodyn. 45, 371 (2009).
- E. Shojaeizadeh, F. Veysi, H. Habibi et al., Renewable Energy 176, 198 (2021).
- 32. E. Shojaeizadeh, F. Veysi, and K. Goudarzi, Appl. Thermal Eng. 164, 114510 (2020).
- 33. R. Zanella, C. Nore, F. Bouillault et al., J. Magn. Magn. Mater. 469, 52 (2019).
- K. Fumoto, H. Yamagishi, and M. Ikegawa, Nanoscale and Microscale Thermophys. Eng. 11, 201 (2007).
- 35. W. Lian, Y. Xyan, and Q. Li, Energy Conversion and Management 50, 35 (2009).
- 36. Y. Xyan and W. Lian, Appl. Therm. Eng. 31, 1487 (2011).
- 37. M. Bahirael and M. Handi, Appl. Therm. Eng. 107, 700 (2016).
- 38. M. H. Buschmann, Int. J. Therm. Sci. 157, 106426 (2020).
- 39. E. Aursand, M. A. Gjennestad, K. Y. Lervåg et al., J. Magn. Magn. Mater. 417, 148 (2016)
- 40. М. А. Косков, А. Ф. Пшеничников, Вестник Пермского университета. Физика 2, 14 (2021).
- 41. A. F. Pshenichnikov and V. V. Mekhonoshin, Eur. Phys. J. E 6, 399 (2001).
- 42. Z. Wang, C. Holm, and H. W. Müller, Phys. Rev. E 66, 021405 (2002).
- 43. A.O. Tsebers, Magnetohydrodyn. 18, 137 (1982).
- 44. C. F. Hayes, J. Colloid Interface Sci. 52, 239 (1975).
- 45. А. Ф. Пшеничников, И. Ю. Шурубор, Изв. АН СССР, сер. физ. 51, 1081 (1987).

- 46. Yu. A. Buyevich and A. O. Ivanov, Physica A 190, 276 (1992).
- 47. A. Yu. Zubarev and L. Yu. Iskakova, Physica A 335, 325 (2004).
- 48. A.S. Ivanov, Phys. Fluids 31, 052001 (2019).
- 49. А. Ф. Пшеничников, А. В. Лебедев, Коллоид. ж.
 67, 218 (2005).
- 50. N. M. Gribanov, E. E. Bibik, O. V. Buzunov et al., J. Magn. Magn. Mater. 85, 7 (1990).
- 51. Н. Б. Варгафтик, Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей, Наука, Москва (1972).
- 52. Н. Б. Дортман, Физические свойства горных пород и полезных ископаемых (Петрофизика): Справочник геофизика, Недра, Москва (1980).
- 53. А. Ф. Пшеничников, А. В. Лебедев, А. В. Радионов и др., Коллоид. ж. 77, 207 (2015).
- 54. А. Ф. Пшеничников, А. В. Лебедев, ЖЭТФ 95, 869 (1989).
- 55. T.S. Chow, Phys. Rev. E 50, 1274 (1994).
- 56. A. V. Lebedev, V. I. Stepanov, and A. A. Kuznetsov et al., Phys. Rev. E 100, 032605 (2019).
- 57. J. Chong, E. Chriatiansen, and A. Baer, J. Appl. Polym. Sci. 15, 2007 (1971).
- 58. R. J. Farris, Trans. Soc. Rheol. 12, 281 (1968).
- **59**. А. Ф. Пшеничников, В. Г. Гилёв, Коллоид. ж. **59**, 372 (1997).
- 60. D. N. Basu, Ann. Nucl. Ehergy 132, 603 (2019).
- 61. S. M. Drozdov, J. Fluid Dyn. 36, 26 (2001).
- 62. М. Абрамовиц, И. Стиган, Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и таблицами, Наука, Москва (1979).
- 63. М. А. Косков, Изв. Юго-Зап. гос. ун-та. Техника и технологии 12, 166 (2022).
- 64. Л. В. Канторович, В. И. Крылов, *Приближенные* методы высшего анализа, Физматлит, Москва– Ленинград (1962).

ГЕНЕРАЦИЯ ВИХРЕЙ В БИСЛОЕ СВЕРХПРОВОДНИК / ФЕРРОМАГНЕТИК С НЕОДНОРОДНЫМ ОБМЕННЫМ ПОЛЕМ

А. В. Самохвалов*

Институт физики микроструктур Российской академии наук 603950, Нижсний Новгород, Россия

Нижегородский госуниверситет им.Н.И. Лобачевского 603950, Нижний Новгород, Россия

> Поступила в редакцию 31 марта 2022 г., после переработки 1 июля 2022 г. Принята к публикации 19 июля 2022 г.

В лондоновском приближении изучены свойства гибридной структуры с эффектом близости, состоящей из диска ферромагнитного изолятора (ФИ), лежащего на поверхности тонкой пленки сверхпроводника *s*-типа, на границе которой с ферромагнетиком заметную роль играет спин-орбитальное (CO) взаимодействие Рашба. Совместное действие спинового расщепления и CO-взаимодействия приводит к генерации спонтанного сверхтока и индуцирует в пленке вихри Пирла, располагающиеся по периметру диска. Выполнены расчеты распределения сверхтока в пленке и структуры создаваемого им магнитного поля для ФИ-дисков с радиусом порядка эффективной глубины проникновения поля в сверхпроводник Λ , когда становятся существенными эффекты экранировки. Изучена структура вихревого состояния из нескольких пар вихрь-антивихрь и найдены условия переключения между различными вихревыми конфигурациями. Показана возможность полной компенсации спонтанного сверхтока, создаваемого СО-взаимодействием и обменным полем, циркулирующими токами плотной цепочки вихрей на границе диска.

DOI: 10.31857/S0044451022120148 **EDN:** LECAUX

1. ВВЕДЕНИЕ

Прогресс последних лет в области нанотехнологии сопровождается расширением класса гибридных систем сверхпроводник-ферромагнетик (СФ) с эффектом близости [1], магнитные и транспортные свойства которых определяются конкуренцией ферромагнитного (Ф) и сверхпроводящего (С) типов спинового упорядочения [2] (подробнее см. обзоры [3–9]). Существенное влияние на поведение сверхпроводящих корреляций в СФ-структурах оказывают спин-орбитальные (СО) эффекты, когда импульс электрона р оказывается связанным со спином σ [10]. Для широкого класса сверхпроводящих структур с планарной геометрией подобные эффекты возникают из-за СО-взаимодействия Рашба $(\alpha_R/\hbar) [\mathbf{n} \times \mathbf{p}] \cdot \boldsymbol{\sigma}$, возникающего на интерфейсах таких структур [11–13] ($\alpha_R = \hbar v_R$ — констанЗдесь п — это единичный вектор вдоль направления, в котором нарушена симметрия относительно пространственной инверсии [15]. Спин-орбитальные эффекты могут привести к формированию сверхпроводящих корреляций с киральным *р*-типом спаривания, увеличить и сделать анизотропным поле парамагнитного предела Клогстона-Чандрасекара [16, 17] в тонкопленочном образце в продольном магнитном поле [18-20], изменить свойства неоднородного состояния Ларкина-Овчинникова-Фульде-Феррелла ($\Pi O \Phi \Phi$) [21,22] в двумерном сверхпроводящем слое [23] и обеспечить условия для возникновения джозефсоновских переходов со спонтанной разностью фаз в основном состоянии (ϕ_0 -контактов) [24]. Совместное действие сильного обменного поля и СО-взаимодействия может вызвать топологический переход в спектре подщелевых состояний и обеспечить условия формирования майорановских состояний [25, 26]. Для наблюдения большинства этих эффектов требуется наличие достаточно широкой сверхпроводящей щели в спектре и заметное однородное спиновое расщепление энергетиче-

та СО-связи, зависящая от скорости Рашба v_R [14]).

[•] E-mail: samokh@ipmras.ru

ских уровней. В гибридных структурах с тонким Сслоем и Ф-металлом выполнение этих условий затруднено из-за сильной "утечки" куперовских пар в ферромагнетик, которая приводит к существенному понижению критической температуры сверхпроводящего перехода в пленке из-за обратного эффекта близости [3]. Этот эффект может быть заметно подавлен в структурах с ферромагнитным изолятором (ФИ), где обменное взаимодействие между ферромагнитно-упорядоченными ионами ФИ и электронами проводимости металла приводит к заметному спиновому расщеплению [27-31], а запрещенная зона в ФИ препятствует проникновению сверхпроводящего конденсата в ферромагнетик и заметному ослаблению сверхпроводимости в Сслоях толщиной d меньше длины когерентности ξ [32,33] (см., также обзоры [4,34,35] и ссылки в них).

Хотя СО-взаимодействие в сочетании с обменным полем h (или эффектом Зеемана) делает состояние с импульсом, направленном по $[\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{n}]$, более энергетически выгодным, в однородных системах это не приводит к генерации спонтанного сверхтока [11,12,36]. В системах с неоднородностью обменного поля и/или СО-взаимодействия формирование состояний с ненулевым спонтанным током оказывается возможным с ряде гибридных систем, таких как СФ-бислой (в пределах глубины проникновения магнитного поля λ от границы) [37, 38], магнитная частица или скирмион на поверхности тонкой сверхпроводящей пленки [39-41] или в замкнутом сверхпроводящем контуре, частично покрытом ферромагнитным изолятором [42]. Наряду с генерацией спонтанного тока, совместное действие обменного поля ФИ и СО-взаимодействия Рашба способно индуцировать в тонкой сверхпроводящей пленке, покрытой ферромагнетиком, вихри Пирла [43], расположенные по периметру области [44–46]. Количество вихрей и их расположение зависят от формы и размера Ф-области, величины и ориентации обменного поля и силы СО-взаимодействия. До настоящего времени вопрос об условиях возбуждения сверхпроводящих вихрей и структуре вихревого состояния в подобных системах изучался в двух предельных случаях: когда характерный латеральный размер \mathcal{D} области, занятой ферромагнетиком, предполагался либо существенно меньше ($\mathcal{D} \ll \Lambda$), либо заметно превышал ($\mathcal{D} \gg \Lambda$) эффективную глубину проникновения магнитного поля $\Lambda = \lambda^2/d$ в сверхпроводящую пленку с толщиной *d* ≪ *ξ*. Здесь $\lambda = (mc^2/4\pi e^2 n_s)^{1/2}$ — лондоновская глубина проникновения магнитного поля в сверхпроводник. В первом случае это позволяет пренебречь эффектом

экранировки и не учитывать влияния магнитного поля возбуждаемого сверхтока и вихрей [46]. Во втором случае анализ заметно упрощается путем использования асимптотических выражений для энергии взаимодействия между вихрями в пленке [44]. В данной работе изучены структура и свойства и найдены условия формирования вихревого состояния в тонкой пленке сверхпроводника, частично покрытой ферромагнетиком с латеральным размером $\mathcal{D} \sim \Lambda$, если на С Φ -интерфейсе заметную роль играет СО-взаимодействие Рашба. В лондоновском приближении с учетом эффекта экранировки выполнены расчеты распределения спонтанного сверхтока в пленке и создаваемого этим током магнитного поля в зависимости от радиуса диска, силы СОвзаимодействия и величины обменного поля и изучена структура и свойства возникающего вихревого состояния. В разд. 2 обсуждается используемая модель и приведены основные уравнения, необходимые для ее описания. В разд. 3 на основе лондоновского приближения получены аналитические решения, описывающие состояния со спонтанным сверхтоком, возникающим из-за СО-взаимодействия в присутствии спинового расщепления. Выполнены расчеты распределения магнитного поля, которое создается спонтанным сверхтоком в окрестности ФИ-диска. В разд. 4 найдены условия формирования и равновесные конфигурации нескольких (N_p = 1–3) пар вихрь-антивихрь, возникающих в такой гибридной системе под действием спонтанного тока. В разд. 5 найдены условия полной компенсации спонтанного тока вихревым источником с нетривиальным распределением фазы сверхпроводящего параметра порядка. Получены приближенные решения, описывающие в непрерывном пределе структуру вихревого состояния, формируемого в окрестности ФИ-диска при сильном СО-взаимодействии и/или обменном поле, когда число пар вихрей N_p велико. В Заключении обсуждаются основные результаты работы.

2. МОДЕЛЬ И ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим модельную гибридную СФ-структуру, в которой диск радиуса $R \sim \Lambda$ из ферромагнитного изолятора лежит на тонкой ($\lambda_F \ll d \ll \xi$) пленке сверхпроводника *s*-типа (рис. 1). Здесь $\lambda_F - \phi$ ермиевская длина волны С-металла в нормальном состоянии. Эффективное обменное поле $\mathbf{h} = h\mathbf{x}_0$, индуцируемое в ограниченной области С-пленки под диском, будем считать однородным по толщине, так что $h \sim 1/d$ [47–49]. Это поле вызывает расщепление спиновых подзон, частично подавляет исходную синглетную сверхпроводимость в пленке и понижает критическую температуру сверхпроводящего перехода $T_h < T_{c0}$ такой структуры в целом [28,29]. Здесь *T_{c0}* — критическая температура сверхпроводящего перехода в пленке без ФИ-диска. Спин-орбитальное взаимодействие Рашба частично компенсирует эффект разрушения куперовских пар сильным обменным (или зеемановским) полем, что проявляется в повышении критической температуры Т_с СФ-бислоя или тонкой С-пленки в продольном магнитном поле ($T_c - T_h > 0$) [19, 20, 23, 50, 51]. Этот эффект связан с появлением внутри каждой из расщепленных по спину подзон парных спин-синглетных корреляций, для которых распаривающее действие обменного или зеемановского поля ослаблено [19, 50, 51]. Совместное действие сверхпроводящего спаривания, СО-взаимодействия и спин-расщепляющего поля приводит к формированию так называемой "спиральной" фазы, которая характеризуется спонтанно модулированным параметром порядка ψ в направлении, поперечном полю h, и нормали к поверхности пленки n [36]. На феноменологическом уровне это неоднородное состояние может быть описано добавлением в функционал свободной энергии линейного по оператору импульса $\hat{\mathbf{D}} = -i\hbar \nabla + (2e/c)\mathbf{A}$ (е > 0) слагаемого (инварианта Лифшица) порядка $[\mathbf{n} \times \mathbf{h}] \cdot \psi^* \hat{\mathbf{D}} \psi$, который устанавливает связь между обменным (или магнитным) полем и сверхтоком при наличии СО-связи. Здесь А — векторный потенциал магнитного поля $\mathbf{B} = \mathrm{rot}\mathbf{A}$. Амплитуда инварианта Лифшица в обобщенном функционале Гинзбурга-Ландау (ГЛ) была вычислена из микроскопических теорий для сверхпроводников без центра инверсии с собственным СО-взаимодействием или поверхностной сверхпроводимости с эффектом Рашба как в чистом, так и в диффузионных пределах [36,50,52–57]. Микроскопическое обоснование инварианта Лифшица в планарных гибридных СФ-структурах с эффектом близости и СО-взаимодействием Рашба получено недавно авторами работы [51]. Подчеркнем, что появление подобного слагаемого в функционале свободной энергии можно обосновать исключительно симметрийными соображениями и характерно для сверхпроводников с нарушенной симметрией пространственной инверсии [58,59]. Заметим, что спиральное состояние в сверхпроводниках без центра инверсии и планарных структурах с эффектом Рашба принципиально отличается от неоднородного ЛОФФ-состояния, которое возникает из-за смены знака квадратично-градиентного члена в функционале ГЛ и фиксирует амплитуду модуляции, но



Рис. 1. Схематичное изображение модельной СФ-структуры: ферромагнитный диск радиуса R с однородным обменным полем $\mathbf{h} = h\mathbf{x}_0$ на поверхности тонкой сверхпроводящей пленки: (r, θ) — полярная система координат

не ее направление [60]. Поэтому, например, в отличие от ЛОФФ-фазы, неоднородное сверхпроводящее состояние со спиральной модуляцией параметра порядка сохраняется и в присутствии примесей [50, 57]. В данной работе предполагается, что параметры гибридной структуры таковы, что ЛОФФнеустойчивость в системе отсутствует [61, 62].

Рассматривая изменения полей и токов на масштабах порядка $\Lambda \gg \lambda \gg \xi$, ограничимся в дальнейшем лондоновским приближением и будем считать распределение сверхтока в пленке однородным по её толщине. Для достаточно низких температур $T_c - T \gg T_{c0} - T_c$ неоднородностью амплитуды сверхпроводящего параметра порядка $\psi = |\psi| e^{i\phi(\mathbf{r})}$ изза обратного эффекта близости можно пренебречь, полагая $|\psi| = \text{const}$ всюду, кроме области сердцевины (кора) вихрей, доля которых в лондоновском приближении мала. Из-за нарушенной симметрии относительно пространственной инверсии в поверхностном слое толщиной $l_{SO} \sim \hbar / \sqrt{2mE_g} \ll d$ вблизи С
Ф-границы ($-l_{SO} \leq z \leq 0)$ присутствует СОвзаимодействие Рашба, где E_g — типичная величина запрещенной зоны в ФИ. При этих предположениях линейный по импульсу вклад в свободную энергию, усредненный по толщине пленки, можно записать в виде [41]

$$\mathcal{F}_L = \frac{\alpha_R \, l_{SO}}{E_F} |\psi|^2 \int d\mathbf{r} \left[\mathbf{n} \times \mathbf{h}\right] \left(\nabla \phi + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A}\right) \,, \quad (1)$$

где $\Phi_0 = \pi \hbar c/e$ — квант магнитного потока, а E_F — энергия Ферми в сверхпроводнике. Здесь (r, θ, z) — цилиндрическая система координат (**r** — радиус-вектор в плоскости структуры).

Линейно-градиентный член (1) в функционале свободной энергии ответствен за формирование неоднородного состояния с отличным от нуля импульсом куперевских пар $\mathbf{Q} = Q \mathbf{y}_0$ в направлении, поперечном обменному полю h [36]. Амплитуда $Q \sim (\alpha_R l_{SO} h/E_F) |N_+ - N_-|$ результирующего импульса конденсата определяется конкуренцией между двумя спиральными подзонами, и решающее значение для получения ненулевого результата имеет различие в плотности состояний N_± для этих подзон на уровне Ферми в нормальном состоянии [50, 54, 57, 63]. Поэтому величина импульса Q близка к нулю, если энергия обменного поля h и энергия СО-взаимодействия $\alpha_R p_F/\hbar$ заметно отличаются друг от друга ($h \gg \alpha_R k_F$ и $h \ll \alpha_R k_F$), и достигает максимального значения при $h \sim \alpha_R k_F$ [19,51].

Следуя [44], свободную энергию гибридной системы \mathcal{F} в лондоновском приближении с учетом градиентного слагаемого (1) удобно записать в виде

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0(R) + \frac{1}{8\pi} \int d\mathbf{r} dz \, \mathbf{B}^2 + \frac{1}{8\pi\Lambda} \int d\mathbf{r} \left[\left(\mathbf{G} - \mathbf{A} + \frac{\boldsymbol{\alpha}\Phi_0}{2\pi} \right)^2 - \left(\frac{\boldsymbol{\alpha}\Phi_0}{2\pi} \right)^2 \right], \quad (2)$$

где векторное поле $\mathbf{G}(\mathbf{r}) = -\Phi_0 \nabla \phi/2\pi$ определяется распределением калибровочно-инвариантной фазы сверхпроводящего параметра порядка $\phi(\mathbf{r})$, которое может иметь особенности $\oint_C \nabla \phi \, d\mathbf{c} \neq 0$ при обходе по контуру(ам) C из-за присутствия в пленке вихрей. Параметр

$$\boldsymbol{\alpha}(r) = \begin{cases} \alpha_0 \, \mathbf{y}_0 \,, & r \le R \\ 0, & r > R \end{cases} , \quad \alpha_0 = \frac{8\pi l_{SO}}{d \,\lambda_R} \frac{h}{E_F} \,, \quad (3)$$

отличен от нуля в области, покрытой ФИ-диском, и характеризует совместное действие обменного поля **h** и СО-взаимодействия Рашба ($\lambda_R = 2\pi\hbar/mv_R$ — длина волны, соответствующая импульсу Рашба). Для удобства в выражение (2) добавлена постоянная

$$\mathcal{F}_0(R) = \frac{1}{8\pi\Lambda} \int d\mathbf{r} \left(\frac{\boldsymbol{\alpha}\Phi_0}{2\pi}\right)^2 = \frac{\Phi_0^2 R^2 \alpha_0^2}{32\pi^2\Lambda} \qquad (4)$$

так, чтобы при отсутствии экранирующего сверхтока в пленке $\mathbf{g}(r, \theta) = d \mathbf{j}(r, \theta)$ и магнитного поля свободная энергия \mathcal{F} равнялась нулю. Свободной энергии (2) с калибровкой div $\mathbf{A} = 0$ соответствует следующее уравнение для векторного потенциала \mathbf{A} :

$$-\Delta \mathbf{A} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{g} \,, \tag{5}$$

$$\mathbf{g}(r,\,\theta) = \frac{c}{4\pi\Lambda} \left(\mathbf{G} - \mathbf{A} + \boldsymbol{\alpha} \frac{\Phi_0}{2\pi} \right) \delta(z) \,. \tag{6}$$

Решение (5), (6) с помощью преобразования Фурье

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},z) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \, dk \, \mathbf{A}(\mathbf{q},\,k) \, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-ikz} \,, \qquad (7)$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q} \, \mathbf{g}(\mathbf{q}) \, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \,, \tag{8}$$

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q} \, \mathbf{G}(\mathbf{q}) \, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \,, \tag{9}$$

где $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$ — волновой вектор в плоскости пленки ($q \equiv |\mathbf{q}|$), дает следующие выражения для амплитуды фурье-гармоник векторного потенциала $\mathbf{A}(\mathbf{q}, k)$:

$$\mathbf{A}(\mathbf{q}, k) = \frac{\mathbf{G}(\mathbf{q}) - \mathbf{A}(\mathbf{q}) + \Phi_0 \alpha_q / 2\pi}{(q^2 + k^2)\Lambda}$$
(10)

и сверхтока $\mathbf{g}(\mathbf{q})$

$$\mathbf{g}(\mathbf{q}) = \frac{c}{4\pi\Lambda} \left(\mathbf{G}(\mathbf{q}) - \mathbf{A}(\mathbf{q}) + \frac{\Phi_0}{2\pi} \,\boldsymbol{\alpha}_q \right) \,. \tag{11}$$

Распределение векторного потенциала в плоскости пленки $\mathbf{A}(\mathbf{r}, z = 0)$ определяется амплитудами фурье-гармоник $\mathbf{A}(\mathbf{q})$, выражения для которых очевидным образом находятся из (10):

$$\mathbf{A}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2\pi} \int dk \, \mathbf{A}(\mathbf{q}, k) =$$
$$= \frac{1}{1 + 2q\Lambda} \left(\mathbf{G}(\mathbf{q}) + \frac{\Phi_0}{2\pi} \boldsymbol{\alpha}_q \right) \,. \tag{12}$$

Амплитуда фурье-гармоники параметра $\boldsymbol{\alpha}(r)$ (3)

$$\boldsymbol{\alpha}_q = \alpha_q \, \mathbf{y}_0 = \int \, d\mathbf{r} \, \boldsymbol{\alpha}(r) \, e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \,, \tag{13}$$

ответственного за появление спонтанного сверхтока в структуре, выражается через функцию Бесселя первого рода $J_1(u)$:

$$\alpha_q = 2\pi R \alpha_0 \left[\frac{J_1(qR/\Lambda)}{q} \right] \,. \tag{14}$$

3. СПОНТАННЫЙ ТОК И МАГНИТНОЕ ПОЛЕ

Прежде всего рассмотрим случай потенциального поля

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}) \equiv \mathbf{G}^{\alpha}(\mathbf{r}) = -\Phi_0 \nabla \phi^{\alpha} / 2\pi$$

(гот $\mathbf{G}^{\alpha} = 0$), когда особенности в распределении калибровочно-инвариантной фазы сверхпроводящего параметра порядка $\phi^{\alpha}(\mathbf{r})$ отсутствуют, т.е.

 $\oint_C \nabla \phi^{\alpha} d\mathbf{c} = 0$ при обходе по любому контуру Cна плоскости z = 0. Получим аналитические решения, описывающие пространственное распределение спонтанного тока $\mathbf{g}^{\alpha}(r, \theta)$ и магнитного поля $\mathbf{B}^{\alpha} = \mathrm{rot} \mathbf{A}^{\alpha}$, возникающие в гибридной структуре, изображенной на рис. 1, под действием обменного поля ФИ-диска и СО-взаимодействия Рашба на СФ-поверхности. В этом случае с учетом калибровки div $\mathbf{A}^{\alpha} = 0$ можно получить следующие выражения для амплитуд $\mathbf{G}^{\alpha}(\mathbf{q}) = (G_r^{\alpha}(\mathbf{q}), G_{\theta}^{\alpha}(\mathbf{q}))$ в разложении (9) через амплитуду α_q (14) фурьегармоники параметра $\alpha(r)$ (3), ответственного за СО-взаимодействие:

$$\mathbf{G}^{\alpha}(\mathbf{q}) = -\frac{\Phi_0}{2\pi} \frac{q_y \,\alpha_q}{q^2} \,\mathbf{q} \,. \tag{15}$$

Соответствующее (15) распределение потенциала $\mathbf{G}^{lpha}(\mathbf{r}) + \Phi_0 \boldsymbol{lpha}(\mathbf{r})/2\pi$ в пленке в полярной системе координат (r, θ) имеет вид

$$\left(\mathbf{G}^{\alpha} + \frac{\Phi_0}{2\pi}\,\boldsymbol{\alpha}\right)_r = \frac{\Phi_0\alpha_0}{4\pi}\,\sin\theta \begin{cases} 1, & r \le R, \\ R^2/r^2, & r > R, \end{cases}$$
(16)

$$\left(\mathbf{G}^{\alpha} + \frac{\Phi_0}{2\pi}\boldsymbol{\alpha}\right)_{\theta} = \frac{\Phi_0\alpha_0}{4\pi}\cos\theta \left\{\begin{array}{cc} 0, & r = R, \ (17)\\ -R^2/r^2, & r > R. \end{array}\right.$$

Амплитуды пространственных гармоник векторного потенциала

$$\mathbf{A}^{\alpha}(\mathbf{q},\,k) = (\mathcal{A}^{\alpha}_{r},\,\mathcal{A}^{\alpha}_{\theta})$$

определяются с помощью выражений (10), (12):

$$\mathbf{A}^{\alpha}(\mathbf{q}, k) = \frac{\Phi_0}{\pi} \frac{q_x \left[\mathbf{z}_0 \times \mathbf{q} \right] \alpha_q}{q \left(q^2 + k^2 \right) \left(1 + 2q\Lambda \right)}$$
(18)

и обладают очевидной симметрией

$$\mathbf{A}^{\alpha}(-\mathbf{q}, k) = \mathbf{A}^{\alpha}(\mathbf{q}, -k) = \mathbf{A}^{\alpha}(\mathbf{q}, k).$$

Отсюда, используя соотношение (11) и преобразования Фурье (7)-(9), получим выражения для распределения радиальной $g_r^{\alpha}(\mathbf{r})$ и азимутальной $g_{\theta}^{\alpha}(\mathbf{r})$ компонент спонтанного тока $\mathbf{g}^{\alpha}(\mathbf{r})$ (5) в пленке, записанные в полярной системе координат (r, θ) :



Рис. 2. Распределение спонтанного тока $\mathbf{g}(\mathbf{r})$ (6) в тонкой сверхпроводящей пленке (синие стрелки) в окрестности ФИ-диска с радиусом $R = \Lambda$ с намагниченностью ${f M}$ вдоль оси х. Длина стрелки показывает относительную величину тока |g | в данной точке. Штриховой линией пока-

$$g_r^{\alpha}(r,\theta) = \frac{c\Phi_0\alpha_0}{(4\pi)^2\Lambda}\sin\theta \left\{ \begin{array}{cc} 1, & r \le R\\ R^2/r^2, & r > R \end{array} - \frac{2R}{r} \int_0^\infty du \, \frac{J_1(uR/\Lambda) \, J_1(ur/\Lambda)}{u(1+2u)} \right\}, \quad (19)$$

$$g^{\alpha}_{\theta}(r,\theta) = \frac{c\Phi_{0}\alpha_{0}}{(4\pi)^{2}\Lambda}\cos\theta \begin{cases} 1, & r < \kappa \\ 0, & r = R \\ -R^{2}/r^{2}, & r > R \end{cases}$$
$$- \frac{R}{\Lambda} \int_{0}^{\infty} du \, \frac{J_{1}(uR/\Lambda) J_{0}(ur/\Lambda)}{1+2u} + \\ + \frac{R}{\Lambda} \int_{0}^{\infty} du \, \frac{J_{1}(uR/\Lambda) J_{2}(ur/\Lambda)}{1+2u} \end{cases}, \qquad (20)$$

где $J_L(u)$ — функция Бесселя первого рода порядка L. На рис. 2 показано распределение спонтанного тока $\mathbf{g}^{\alpha}(\mathbf{r})$ в тонкой сверхпроводящей пленке в окрестности ферромагнитного диска радиусом $R=\Lambda$ с намагниченностью ${\bf M}$ вдоль ос
иx.На краю области, занимаемой диском, азимутальная компо-



Рис. 3. Распределение *у*-компоненты спонтанного тока $\mathbf{g}(\mathbf{r})$ (6) в сечении y = 0 ($g_y^{\alpha}(x,0) = -g_{\theta}^{\alpha}(r,0)$). Здесь $g_0 = c\Phi_0\alpha_0/(4\pi)^2\Lambda$, а цифры рядом с кривой обозначают радиус диска R в единицах Λ

нента спонтанного тока g^{α}_{θ} испытывает скачок [44]

$$\Delta g^{\alpha}_{\theta}(R, \theta) = g^{\alpha}_{\theta}(R+0, \theta) - g^{\alpha}_{\theta}(R-0, \theta) =$$
$$= -\frac{c\Phi_0\alpha_0}{8\pi^2\Lambda}\cos\theta, \qquad (21)$$

величина которого зависит от угла θ . При этом радиальная компонента спонтанного тока g_r^{α} меняется непрерывно $\bigtriangleup g_r^{\alpha}(R, \theta) = 0$. На рисунке скачок $\Delta g^{\alpha}_{\theta}(R, \theta)$ отображается изломом линий тока при r = R, который пропадает в полярных точках при $\theta = \pm \pi/2$. На рис. 3 показано распределение у-компоненты спонтанного сверхтока в сечении y = 0, проходящем через центр диска $(g_{\mu}^{\alpha}(x,0) = -g_{\theta}^{\alpha}(r,0)),$ для нескольких значений радиуса ФИ-диска R.Для $R\ll\Lambda$ сверхток в области диска $(x \leq R)$ практически однороден по сечению $g_{\mu}^{\alpha}(x,0) \approx g_0 = c \Phi_0 \alpha_0 / (4\pi)^2 \Lambda$. Сильная неоднородность распределения сверхтока в области диска при $R \gg \Lambda$ отражает эффект экранировки создаваемого этом током магнитного поля $\mathbf{B}^{\alpha}(\mathbf{r})$. Отметим, что при $r \gg R, \Lambda$ азимутальная компонента спонтанного тока

$$\mathbf{g}_{\theta}^{\alpha} \sim \frac{R}{r} \int_{0}^{\infty} du \, \frac{J_1(ur/\Lambda)}{(1+2u)^2} - \frac{\Lambda R}{r^2} \tag{22}$$

убывает быстрее 1/r на масштабе, зависящем как от радиуса диска R, так и от эффективной глубины проникновения Λ . Для случая $R \gg \Lambda$ спонтанный ток течет преимущественно в окрестности границы диска и заметно подавлен вблизи его центра.

Выражение для свободной энергии (2) для состояния со спонтанным сверхтоком $\mathbf{g}^{\alpha}(r, \theta)$ (19), (20) от совместного влияния обменного поля h и COвзаимодействия Рашба может быть записано в виде

$$\mathcal{F}^{\alpha}(R) = \frac{1}{2} \mathcal{E}_0 R^2 \alpha_0^2 \eta \left(\frac{R}{\Lambda}\right) , \qquad (23)$$

где $\mathcal{E}_0 = \Phi_0^2/8\pi^2\Lambda$, а функция

$$\eta(\rho) = \int_{0}^{\infty} du \frac{J_{1}^{2}(u\rho)}{1+2u} - \frac{1}{4} \int_{0}^{\infty} du \frac{J_{1}^{2}(u\rho)}{(1+2u)^{2}}$$
(24)

принимает значение $\eta(0) = 0.25$ и монотонно убывает до нуля при $\rho \to \infty$. При этом свободная энергия $\mathcal{F}^{\alpha}(R)$ монотонно растет с увеличением радиуса диска R, и $\mathcal{F}^{\alpha}(R) \simeq 0.5\mathcal{F}_0(R)(1 - 5R/3\pi\Lambda)$ при $R \ll \Lambda$.

Спонтанный сверхток $\mathbf{g}^{\alpha}(\mathbf{r})$ создает в окружающем пространстве магнитное поле $\mathbf{B}^{\alpha}(\mathbf{r}, z) = \operatorname{rot} \mathbf{A}^{\alpha}$, амплитуды пространственных фурье-гармоник которого

$$\mathbf{B}^{\alpha}(\mathbf{q},\,k) = -i[(\mathbf{q} + k\,\mathbf{z}_0) \times \mathbf{A}^{\alpha}(\mathbf{q},\,k)]$$

очевидным образом выражаются через амплитуды гармоник векторного потенциала $\mathbf{A}^{\alpha}(\mathbf{q}, k)$ (18). Соответствующие выражения для компонент магнитного поля $\mathbf{B}^{\alpha} = (B_r^{\alpha}, B_{\theta}^{\alpha}, B_z^{\alpha})$ в цилиндрической системе координат имеют вид

$$B_{r}^{\alpha}(r,\,\theta,\,z) = \operatorname{sign}(z) \frac{\Phi_{0}R\alpha_{0}}{4\pi\Lambda^{2}} \cos\theta \times \int_{0}^{\infty} du \frac{uJ_{1}(uR/\Lambda)}{1+2u} \left[J_{0}(ur/\Lambda) - J_{2}(ur/\Lambda) \right] e^{-u|z|/\Lambda} , (25)$$
$$B_{\theta}^{\alpha}(r,\,\theta,\,z) = -\operatorname{sign}(z) \frac{\Phi_{0}R\alpha_{0}}{2\pi\Lambda r} \sin\theta \times \int_{0}^{\infty} du \frac{J_{1}(uR/\Lambda)}{1+2u} e^{-u|z|/\Lambda} , \qquad (26)$$

$$B_{z}^{\alpha}(r,\,\theta,\,z) = -\frac{\Psi_{0}\Pi\Omega_{0}}{2\pi\Lambda^{2}}\cos\theta \times \int_{0}^{\infty} du \frac{uJ_{1}(uR/\Lambda)J_{1}(ur/\Lambda)}{1+2u} e^{-u|z|/\Lambda}.$$
(27)

В плоскости пленки (z = 0) нормальная компонента магнитного поля B_z^{α} может быть представлена в виде



Рис. 4. Зависимость $b_R(\rho)$, определяющая распределение нормальной к плоскости диска компоненты магнитного поля $B_z^{\alpha}(r, \theta, 0)$ (28), создаваемого спонтанным током $\mathbf{g}^{\alpha}(\mathbf{r})$ (19), (20). Цифры рядом с кривой обозначают радиус диска R в единицах Λ

$$B_z^{\alpha}(r,\,\theta,\,0) = -B_0(R)\,b_R(r/R)\,\cos\theta,\tag{28}$$

$$b_{R}(\rho) = \frac{1}{2} \int_{0}^{0} du \frac{J_{1}(uR/\Lambda) J_{1}(\rho uR/\Lambda)}{u(1+2u)} + \begin{cases} \frac{\Lambda \rho}{2R} {}_{2}F_{1}\left(\frac{3}{2}; \frac{1}{2}; 2; \rho^{2}\right) - \frac{\rho}{4}, & \rho < 1, \\ \frac{\Lambda/R}{2\rho^{2}} {}_{2}F_{1}\left(\frac{3}{2}; \frac{1}{2}; 2; \rho^{-2}\right) - \frac{1}{4\rho}, & \rho > 1, \end{cases}$$

$$(29)$$

где $B_0(R) = \Phi_0 R \alpha_0 / 4 \pi \Lambda^2$, а $_2F_1(a; b; 2; \zeta)$ — гипергеометрическая функция Гаусса. Таким образом, радиальная зависимость $B_z^{\alpha}(r, \theta, 0)$ (28) определяется универсальной функцией $b_R(\rho)$ (29), которая зависит только от отношения R/Λ и при $R \lesssim \Lambda \ll r$ убывает по степенному закону как

$$b_R(\rho) \approx \frac{6\Lambda^3}{R^3} \left(1 + \frac{R^2}{32\Lambda^2}\right) \rho^{-4}.$$
 (30)

На рис. 4 показана зависимость $b_R(\rho)$ (29) для нескольких значений радиуса диска R. Отличие кривых $b_R(\rho)$ для разных значений R/Λ отражает влиянии эффекта экранировки на распределение сверхтока в пленке и индуцируемого им магнитного поля для $R \gtrsim \Lambda$. При $\rho \to 1$ функция $b_R(\rho)$ (29) имеет логарифмическую особенность

$$b_R(\rho) \approx \frac{\Lambda}{\pi R} \ln\left(\frac{1}{2|1-\rho|}\right),$$
 (31)

которая приводит к расходимости нормальной к плоскости пленки компоненты магнитного



Рис. 5. Зависимость магнитного потока Φ_z^{lpha} (33) через полуплоскость $x \ge 0$ от радиуса ФИ-диска ($\Phi_{lpha} = \Phi_0 \Lambda \alpha_0 / \pi$). На вставке показан контур C_{∞} , используемый для вычисления магнитного потока

поля $B_z^{\alpha}(r, \theta, 0)$ (28) у границы области, занятой ФИ-диском. Расходимость компоненты поля $B_z^{\alpha}(r \to R, \theta, 0)$ является следствием лондоновского приближения и используемой здесь модели резкого (ступенчатого) изменения параметра $\alpha(r)$ (3). Как и в случае вихря Абрикосова, оценку величины магнитного поля на границе диска можно получить с логарифмической точностью, если "обрезать" расходимость в формуле (31) на характерном масштабе $\delta \ll \xi$, определяющем размер переходной области в сверхпроводнике, где индуцированное в сверхпроводнике обменное поле h уменьшается до нуля:

$$B_z^{\alpha}(R,\,\theta,\,0) \sim -\frac{\Phi_0 \alpha_0}{4\pi^2 \Lambda} \ln\left(\frac{R}{2\delta}\right) \cos\theta.$$

Проинтегрировав распределение магнитного поля B_z^{α} (28), (29) по полуплоскости $x \ge 0$, вычислим величину магнитного потока

$$\Phi_{z}^{\alpha}\Big|_{x\geq 0} = \int_{0}^{\infty} r dr \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta B_{z}^{\alpha}(r, \theta, 0) =$$
$$= -\frac{4\pi\Lambda}{c} \oint_{C_{\infty}} d\mathbf{c} \, \mathbf{g}^{\alpha}(r, \theta) \,, \qquad (32)$$

создаваемого сверхтоком $\mathbf{g}^{\alpha}(r, \theta)$ (19), (20). Контур интегрирования C_{∞} показан на вставке к рис. 5. Поскольку при $r \gg R, \Lambda$ азимутальная компонента спонтанного тока
 $\mathbf{g}^{\alpha}_{\theta}(r,\theta)$ (22) убывает быстрее1/r,то

$$\Phi_z^{\alpha} \bigg|_{x \ge 0} = -\frac{8\pi\Lambda}{c} \int_0^\infty dr \, g_r^{\alpha} \left(r, \frac{\pi}{2}\right) = -\frac{\Phi_0 R\alpha_0}{\pi} \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{2\Lambda}{R} - \frac{\pi}{2} \left[H_1 \left(\frac{R}{2\Lambda}\right) - Y_1 \left(\frac{R}{2\Lambda}\right) \right] \right\}, \quad (33)$$

где H_1 и Y_1 — функции соответственно Струве и Бесселя второго рода. На рис. 5 показана зависимость магнитного потока Φ_z^{α} (33) через полуплоскость $x \ge 0$ от радиуса ФИ-диска ($\Phi_{\alpha} = \Phi_0 \Lambda \alpha_0 / \pi$). Величина магнитного потока (33) линейно растет с увеличением радиуса диска ($\Phi_z^{\alpha} \simeq \Phi_{\alpha} R / \Lambda$) при $R \ll \Lambda$, асимптотически приближаясь к значению $2\Phi_{\alpha}$ при $R \gg \Lambda$. Магнитный поток $\Phi_z^{\alpha}|_{x\le 0} = 0$, создаваемый сверхтоком, через полуплоскость $x \le 0$ равен $-\Phi_z^{\alpha}|_{x\ge 0}$, и суммарный поток через всю плоскость, естественно, отсутствует ($\Phi_z^{\alpha} = \Phi_z^{\alpha}|_{x>0} + \Phi_z^{\alpha}|_{x<0} = 0$).

4. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВИХРЕЙ ПИРЛА СО СПОНТАННЫМ ТОКОМ

Спонтанный ток \mathbf{g}^{α} (19), (20), возбуждаемый в рассматриваемой гибридной структуре совместным действием обменного поля ФИ и СО-взаимодействия Рашба, может индуцировать в тонкой сверхпроводящей пленке вихри Пирла, распределенным центром пиннинга для которых является периметр занятой ферромагнетиком области [44,46]. По топологическим соображениям такие вихри должны возникать парами (вихрь и антивихрь), если внешнее магнитное поле отсутствует и ФИ-диск расположен далеко (на расстоянии $\gg R, \Lambda$) от границ сверхпроводника. Условие, при выполнении которого присутствие вихрей в гибридной структуре с характерным размером ферромагнитной области $\mathcal{D} \gg \Lambda$ оказывается возможным, было получено в работе [44]: свободная энергия состояния с вихрями меньше энергии (23) безвихревого (мейснеровского) состояния, если параметр α_0 превышает критическое значение, которое убывает как $1/\ln(\mathcal{D}/\Lambda)$ с увеличением \mathcal{D} . При этом вихри и антивихри образуют вихревые цепочки, расположенные у противоположных границ ферромагнитной области, расстояние между вихрями l в которых также велико $(l \gg \Lambda)$ [44]. В противоположном случае $(l \ll \mathcal{D} \ll \Lambda)$ при достаточно большом значении параметра α_0 ферромагнитная область оказывается окруженной

плотной "шубой" из вихрей, распределение вихревого тока в которых компенсирует в среднем возникающий спонтанный сверхток \mathbf{g}^{α} и магнитное поле B_{z}^{α} [46].

В рассматриваемом здесь случае диска радиуса $R \sim \Lambda$ оба эти приближения не справедливы, и для определения условий возникновения сверхпроводящих вихрей в окрестности области, покрытой ферромагнетиком, следует учитывать их дискретность, полагая

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^{\alpha} + \sum_{m} \mathbf{A}^{m}, \quad \mathbf{B} = \mathbf{B}^{\alpha} + \sum_{m} \mathbf{B}^{m},$$
$$\mathbf{G} = \mathbf{G}^{\alpha} + \sum_{m} \mathbf{S}^{m}$$
(34)

в функционале свободной энергии (2), и особенности распределения фазы сверхпроводящего параметра порядка, создаваемые вихрем ($\sigma_m = 1$) или антивихрем ($\sigma_m = -1$) в точке $\mathbf{r} = \mathbf{r}_m$,

$$\operatorname{rot} \mathbf{S}^{m} = \sigma_{m} \Phi_{0} \mathbf{z}_{0} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{m}) \,. \tag{35}$$

Распределение магнитного поля $\mathbf{B}^m = \mathrm{rot} \mathbf{A}^m$ и сверхтока

$$\mathbf{g}^{m}(\mathbf{r}) = \frac{c}{4\pi\Lambda} (\mathbf{S}^{m} - \mathbf{A}^{m}) \,\delta(z) \tag{36}$$

в вихре Пирла с центром в точке $\mathbf{r} = \mathbf{r}_m$ в тонкой пленке сверхпроводника описываются уравнением [43]

$$-\Delta \mathbf{A}^{m} = \frac{1}{\Lambda} \left(\mathbf{S}^{m} - \mathbf{A}^{m} \right) \delta(z) , \qquad (37)$$

решение которого $\mathbf{A}^{m}(\mathbf{r}, z)$ хорошо известно и может быть получено с помощью фурье-преобразования аналогичного (7), (9), где амплитуды фурье-гармоник $\mathbf{A}^{m}(\mathbf{q}, k)$ имеют вид [64]

$$\mathbf{A}^{m}(\mathbf{q}, k) = \frac{-2i\sigma_{m}\Phi_{0}\left[\mathbf{q}\times\mathbf{z}_{0}\right]}{q(q^{2}+k^{2})(1+2q\Lambda)}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{m}}.$$
 (38)

Предполагая, что вихри в пленке возникают попарно (вихрь–антивихрь), и в равновесии при отсутствии других центров пиннинга располагаются по периметру ферромагнитного диска, где спонтанный сверхток \mathbf{g}^{α} (19), (20) формирует для них потенциальную яму, можно легко из соображений симметрии представить, как выглядят простейшие вихревые конфигурации, соответствующие формированию нескольких пар вихрей $N_p = 1-3$ в гибридной системе (см. рис. 6). Заметим, что направление тока в вихре $\mathbf{g}^m(\mathbf{r})$ противоположно направлению спонтанного тока $\mathbf{g}^{\alpha}(\mathbf{r})$, что приводит к уменьшению амплитуды магнитного поля **В** и скачка тангенциальной компоненты сверхтока

$$\mathbf{g}(r,\,\theta) = \mathbf{g}^{\alpha} + \sum_{m} \mathbf{g}^{m}$$

на границе диска при r = R. Для $N_p = 1$ (рис. 6*a*) вихри, очевидно, располагаются на оси x в точках ($x_m = \pm R$, $y_m = 0$), и свободная энергия \mathcal{F} (2) такого состояния при заданном радиусе диска R зависит только от параметра взаимодействия α_0 . Для $N_p \ge 2$ появляются вихри, равновесное положение которых определяется углом $\theta_m \neq 0$ (рис. 6*b*), при котором свободная энергия F при прочих равных условиях принимает минимальное значение.

Свободную энергию \mathcal{F} (2) гибридной системы с N_p парами вихрь–антивихрь на границе ферромагнитного диска удобно представить следующим образом:

$$\mathcal{F}_{N_p} = \mathcal{F}^{\alpha} + 2N_p \left(\mathcal{E}_P + \mathcal{E}_c\right) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,m=1\\n \neq m}}^{2N_p} U_{nm} + \sum_{m=1}^{2N_p} V_m^{\alpha},$$
(39)

где \mathcal{F}^{α} — не зависящая от конфигурации вихрей часть свободной энергии (23), которая включает в себя энергию спонтанного сверхтока \mathbf{g}^{α} (19), (20) и создаваемого им магнитного поля \mathbf{B}^{α} (25)–(27), а

$$\mathcal{E}_P = \frac{\Phi_0^2}{16\pi^2\Lambda} \ln(\Lambda/\xi)$$

— энергия вихря Пирла. Появление каждого вихря приводит к подавлению сверхпроводимости в области его кора с объемом $\mathcal{V}_c \approx \pi \xi^2 d$, что увеличивает свободную энергию на величину

$$\mathcal{E}_c = H_{cm}^2 \mathcal{V}_c / 8\pi \approx \Phi_0^2 / 64\pi^2 \Lambda \ll \mathcal{E}_P,$$

вкладом которой можно пренебречь. Энергия парного взаимодействия U_{nm} вихрей Пирла n и m зависит от полярности вихрей $\sigma_{m,n}$ и расстояния a_{nm} между ними и может быть следующим образом выражена через функции Струве H_0 и Бесселя второго рода Y_0 [65]:

$$U_{nm} = \frac{\sigma_n \sigma_m \Phi_0^2}{16\pi\Lambda} \left[H_0 \left(\frac{a_{nm}}{2\Lambda} \right) - Y_0 \left(\frac{a_{nm}}{2\Lambda} \right) \right].$$
(40)

Последнее слагаемое в (39) описывает суммарную работу спонтанного сверхтока \mathbf{g}^{α} над вихрями, которая зависит от положения вихря m на периметре

диска (R, θ_m) и полярности вихря σ_m , и может быть записана в виде

$$V_m^{\alpha} = -\frac{\sigma_m \Phi_0^2 R \alpha_0}{16\pi^2 \Lambda} \nu(R/\Lambda) \cos \theta_m ,$$

$$\nu(\rho) = 1 - 2 \int_0^\infty du \, \frac{J_1^2(u\,\rho)}{u(1+2u)} .$$
(41)

Выражения для энергии парного взаимодействия вихрей Пирла (40) и работы спонтанного сверхтока над вихрями (41) существенно упрощаются в случае $\xi \ll R \ll \Lambda$, когда влияние экранировки мало:

$$U_{nm} \simeq \frac{\sigma_n \sigma_m \Phi_0^2}{8\pi^2 \Lambda} \left[\ln \left(\frac{4\Lambda}{a_{nm}} \right) - C + \frac{a_{nm}}{2\Lambda} \right], \quad (42)$$

$$V_m^{\alpha} \simeq -\frac{\sigma_m \Phi_0^2 R \alpha_0}{16\pi^2 \Lambda} \cos \theta_m \left(1 - \frac{4R}{3\pi\Lambda}\right) , \qquad (43)$$

где $C \simeq 0.577$ — постоянная Эйлера. Ограничимся в дальнейшем анализом только симметричных конфигураций, показанных на рис. 6. Устойчивая конфигурация вихрей соответствует минимуму свободной энергии \mathcal{F}_{N_p} (39). Варьируемыми параметрами являются число пар N_p и положение вихрей, характеризуемое углом θ_m .

4.1. Разрушение безвихревого состояния

Состояние с одной парой вихрь–антивихрь $(N_p = 1)$ в рассматриваемой гибридной системе (рис. 6*a*) становится энергетически более выгодным, если выполнено условие $\mathcal{F}_1 < \mathcal{F}_0$. Это требование накладывает очевидное ограничение на параметр $\alpha_0 > \alpha_0^{(1)}(R)$ (т.е. на силу СО-взаимодействия и величину эффективного обменного поля), где

$$\alpha_0^{(1)}(R) = \frac{2\ln(\Lambda/\xi) - \pi \left[H_0(R/\Lambda) - Y_0(R/\Lambda)\right]}{2R\nu(R/\Lambda)} \quad (44)$$

зависит от радиуса ФИ-диска. При всех разумных $R \gg \xi$ функция $\alpha_0^{(1)}(R)$ (44) монотонно убывает с увеличением радиуса диска R (рис. 7). Используя известные асимптотики для функций Струве H_0 и Бесселя Y_0 , можно получить простые выражения

$$\alpha_0^{(1)}(R) \simeq \begin{cases} \left(\ln(R/2\xi) + C \right) / R, & R \ll \Lambda, \\ \ln(\Lambda/\xi) / 4\Lambda \ln(R/\Lambda), & R \gg \Lambda, \end{cases}$$
(45)

описывающие зависимость $\alpha_0^{(1)}(R)$ (44) в двух предельных случаях. Заметим, что для $R \gg \Lambda$ выражение для $\alpha_0^{(1)}(R)$ (45) совпадает с аналогичным условием появления вихрей на границах области в виде широкой полоски ФИ на сверхпроводнике, полученным в работе [44]. Расчеты показали, что появление пары вихрь-антивихрь оказывается возможным уже при относительно слабом



Рис. 6. Простейшие конфигурации N_p пар вихрь-антивихрь на границе ферромагнитного диска. Положение вихря и антивихря симметрично относительно оси y. Линии сверхтока g^{α} (19), (20) показаны штриховой линией, а линии тока в вихрях — точками



Рис. 7. Зависимость параметра $\alpha_0^{(1)}$ (44) от радиуса ФИдиска R (сплошная линия) для $\ln(\Lambda/\xi) = 5$. Штриховой линией и пунктирной показаны асимптотические зависимости (45) для случаев соответственно $R \gg \Lambda$ и $R \ll \Lambda$

СО-взаимодействии и спиновом расщеплении, а характерный пространственный масштаб этого взаимодействия $l_{\alpha}^{(1)} = 1/\alpha_0^{(1)} \sim \Lambda/\ln(\Lambda/\xi)$ определяется большой эффективной глубиной проникновения $\Lambda \gg \lambda, \xi$ практически при всех значениях радиуса диска R, за исключением $R \ll \Lambda$, когда $\alpha_0^{(1)}$ заметно возрастает. Так, для сверхпроводящей пленки с $\lambda = 10^3 \text{ Å}$ толщиной $d \sim 10 l_{SO} \approx 20 \text{ Å}$ и радиусом ФИ-диска $R = \Lambda = 5$ мкм получим $l_{\alpha}^{(1)} \approx 10^4 \text{ Å}$, что вполне достижимо для типичных значений параметра СО-связи $v_F/v_R \sim 10$ [67] и величины обменного поля $E_F/h \sim 10$ –100 [34, 66, 68] :

$$1/\alpha_0 \sim (d/l_{SO})(v_F/v_R)(E_F/h)\lambda_F \approx 10^3 - 10^4 \text{ Å}.$$

С увеличением радиуса ФИ-диска требования к силе СО-взаимодействия и величине спинового расщепления, при которых становится возможным формирование пар вихрь–антивихрь на границе, оказываются более слабыми.

При низких температурах, $T \ll T_c$, состояние с парой вихрь–антивихрь отделено от безвихревого потенциальным барьером, который пропадает, если величина спонтанного тока \mathbf{g}^{α} в какойто точке пленки превышает ток распаривания $\mathbf{g}_d = c\Phi_0/12\sqrt{3}\pi^2\Lambda\xi$. Из анализа выражений (19), (20) видно, что $|\mathbf{g}^{\alpha}|$ принимает максимальное значение на расстоянии порядка длины когерентности ξ от точек (R, 0) и (R, π) (см. рис. 3):

$$g_{max}^{\alpha} = \frac{c\Phi_0\alpha_0}{(4\pi)^2\Lambda} \left[1 + 2\int_0^\infty du \, \frac{J_1^2(uR/\Lambda)}{(1+2u)^2} \right] \approx g_0 \quad (46)$$

и слабо зависит от радиуса диска R. Условие $g_{max}^{\alpha} \geq g_d$ определяет значения параметра

$$\alpha_0 \gtrsim \alpha_0^* \approx \xi^{-1} (4/3\sqrt{3}) \gg \alpha_0^{(1)}(R)$$

при которых возникающий в гибридной системе ток \mathbf{g}^{α} достаточен для рождения пар вихрь–антивихрь.

4.2. Вихревые состояния в гибридной системе

При $\alpha_0 > \alpha_0^{(1)}$ в рассматриваемой гибридной системе возможны состояния с несколькими парами вихрь–антивихрь $(N_p \ge 2)$. Примеры таких вихревых конфигураций показаны на рис. 6 *b*, *c*. Равновесное расположение вихрей в этом случае определяется углом $\theta_m = \theta_v$, которому соответствует локальный минимум свободной энергии, т.е. при котором


Рис. 8. Зависимость свободной энергии \mathcal{F}_{N_p} (*a*) и угла θ_v (*b*) от параметра α_0 для симметричных конфигураций вихрей, показанных на рис. 6: $N_p = 1$ — синие треугольники; $N_p = 2$ — зеленые квадраты; $N_p = 3$ — коричневые кружки для радиуса диска $R = \Lambda (\ln(\Lambda/\xi) = 5, \mathcal{E}_0 = \Phi_0^2/8\pi^2\Lambda)$. Состоянию без вихрей соответствует свободная энергия $\mathcal{F}_0 = 0$. Вертикальные линии разделяют

области с разным числом пар вихрей $N_p=0 extsf{--}3$

 $\partial \mathcal{F}_{N_n}/\partial \theta_m = 0$. На рис. 8 и 9 показаны зависимости свободной энергии $\mathcal{F}_{N_n=1-3}$ (39) от параметра α_0 для двух значений радиуса ФИ-диска. Заметим, что для заданного числа пар N_p локальный минимум свободной энергии (39) существует, если параметр α_0 превышает критическое значение $\alpha_0^{(N_p)}(R)$, которое растет с увеличением N_p и зависит от радиуса диска R. Используя простые асимптотики (42), (43), можно показать, что при $R \ll \Lambda$ решение уравнения $\partial \mathcal{F}_{2(3)}/\partial \theta_m = 0$ существует и конфигурации вихрей, изображенные на рис. 6b, c, возможны, если $\alpha_0 \ge \alpha_0^{(2)} = 3\sqrt{3}/2R \simeq 2.6/R$ и $\alpha_0 \ge \alpha_0^{(3)} \simeq 5.3/R$ соответственно. При произвольном соотношении между R и Λ тенденция уменьшения $\alpha_0^{(N_p)}(R)$ с увеличением радиуса диска сохраняется. С увеличением силы СО-взаимодействия и/или эффективного обменного поля растет число пар вихрь–антивихрь N_p , для которого соответствующее значение свободной





Рис. 9. Зависимость свободной энергии \mathcal{F}_{N_p} (а) и угла θ_v (b) от параметра α_0 для симметричных конфигураций вихрей, показанных на рис. 6: $N_p = 1$ — синие треугольники; $N_p = 2$ — зеленые квадраты; $N_p = 3$ — коричневые кружки для радиуса диска $R = 5\Lambda (\ln(\Lambda/\xi) = 5, \mathcal{E}_0 = \Phi_0^2/8\pi^2\Lambda)$. Состоянию без вихрей соответствует свободная энергия $\mathcal{F}_0 = 0$. Отмеченная область показана на вставке в увеличенном масштабе. Вертикальные линии разделяют области с разным числом пар вихрей $N_p = 1$ -3

энергии \mathcal{F}_{N_p} принимает минимальное значение. Одновременно с этим увеличивается суммарная завихренность N_p состояния в правой (левой) полуплоскости $x \ge 0$ ($x \le 0$) и величина магнитного потока Φ_z ($-\Phi_z$). Используя известное выражение для азимутальной компоненты сверхтока в вихре Пирла через функции Струве H_1 и Бесселя второго рода Y_1 [65], можно вычислить магнитный поток Φ_z^m через полуплоскость $x \ge 0$, создаваемый парой вихрь– антивихрь, расположенными соответственно в точках ($R \cos \theta_m$, $R \sin \theta_m$) и ($-R \cos \theta_m$, $R \sin \theta_m$):

$$\Phi_z^m = \Phi_0 \left\{ 1 - \frac{R}{4\Lambda} \cos \theta_m \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\rho_m} \left[H_1 \left(\frac{\rho_m}{2\Lambda} \right) - Y_1 \left(\frac{\rho_m}{2\Lambda} \right) - \frac{2}{\pi} \right] \right\}, \quad (47)$$



Рис. 10. Зависимость магнитного потока Φ_z (48) через полуплоскость $x \ge 0$ от параметра α_0 для симметричных конфигураций вихрей, показанных на рис. 6: $N_p = 0$ — сплошная линия; $N_p = 1$ — синие треугольники; $N_p = 2$ — зеленые квадраты; $N_p = 3$ — коричневые кружки для радиуса диска $R = \Lambda$

где $\rho_m(y) = (R^2 + y^2 - 2Ry\sin\theta_m)^{1/2}$ – расстояние от центра вихря до точки (0, y) на оси. Зависимость суммарного магнитного потока через полуплоскость $x \ge 0$, создаваемого вихрями и спонтанным током

$$\Phi_z = \Phi_z^{\alpha} + \sum_{m=0}^{N_p} \Phi_z^m, \tag{48}$$

от параметра α_0 показана на рис. 10. Кривая $\Phi_z(\alpha_0)$ зависимости суммарного магнитного потока от параметра α_0 состоит из отдельных ветвей, каждая из которых соответствует определенному числу N_p . При переходе с одной ветви на другую изменяется число пар вихрей N_p и происходит изменение вихревого состояния, сопровождающееся скачком суммарного магнитного потока Φ_z .

5. КОМПЕНСАЦИЯ СПОНТАННОГО ТОКА ВИХРЯМИ ПИРЛА

При заметном превышения параметра α_0 над значением $\alpha_0^{(1)}(R)$ ($\alpha_0 \gg \alpha_0^{(1)}(R)$) число пар вихрь– антивихрь N_p , соответствующее минимуму свободной энергии \mathcal{F}_{N_p} , становится большим ($N_p \gg 1$) и поиск оптимальной конфигурации вихрей с помощью выражения (39), учитывающего их дискретность, становится затруднительным и неэффективным. В этом случае уместно использовать модели, которые не учитывают дискретность вихрей, а для описания возникающей вихревой структуры используют усредненные характеристики, такие как плотность (число N) вихрей или среднее расстояние $l \gtrsim \xi$ между ними [44, 46]. По-прежнему будем предполагать, что вихри располагаются только по периметру ФИ-диска, формируя в пленке среднее вихревое поле

$$\mathbf{\Omega}(\mathbf{r}) = \left\langle \sum_{m} \mathbf{S}^{m}(\mathbf{r}) \right\rangle_{L}, \quad \xi, \, l \ll L \ll R, \Lambda \,, \quad (49)$$

связанное с фазой сверхпроводящего параметра порядка $\Omega(\mathbf{r}) \sim \nabla \langle \phi(\mathbf{r}) \rangle_L$. Усреднение в выражении (49) проводится на масштабе L, который заметно превышает расстояние между вихрями l, оставаясь меньше характерных расстояний R и Λ , на которых заметно меняются распределения магнитного поля $\mathbf{B}^{\alpha}(\mathbf{r}, z)$ и спонтанного тока $\mathbf{g}^{\alpha}(\mathbf{r})$.

Учитывая вид распределения магнитного поля $B_z^{\alpha}(r, \theta, 0)$ (27) и сверхтока $\mathbf{g}^{\alpha}(r, \theta)$ (19), (20), выберем вихревое поле таким образом, чтобы соответствующая ему фаза сверхпроводящего параметра порядка $\langle \phi(\mathbf{r}) \rangle_L$ имела при r = R распределенную по периметру диска особенность вида

$$\operatorname{rot} \mathbf{\Omega} = \mu \frac{\Phi_0 \alpha_0}{2\pi} \mathbf{z}_0 \, \cos \theta \, \delta(r - R) \,. \tag{50}$$

В этом случае следует положить

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}) = \mathbf{G}^{\alpha}(\mathbf{r}) + \mathbf{\Omega}(\mathbf{r})$$

в функционале свободной энергии \mathcal{F} (2). Здесь μ — численный коэффициент порядка единицы, соответствующий при заданных значениях параметра α_0 и радиуса диска R минимуму функционала \mathcal{F} .

Используя стандартную методику, основанную на преобразовании Фурье (9), получим следующее выражение для амплитуд фурье-гармоник $\Omega(\mathbf{q})$ вихревого векторного поля $\Omega(\mathbf{r})$:

$$\mathbf{\Omega}(\mathbf{q}) = \mu \Phi_0 R \alpha_0 \frac{J_1(qR)}{q^2} [\mathbf{q} \times \mathbf{z}_0] \cos \beta, \qquad (51)$$

где β — это полярный угол на плоскости волновых векторов **q**. Легко убедиться, что

$$\mathbf{\Omega}(\mathbf{q}) = -\mu \left(\mathbf{G}^{\alpha}(\mathbf{q}) + \frac{\Phi_0}{2\pi} \boldsymbol{\alpha}_q \right) \,, \tag{52}$$

а распределения векторного потенциала $\mathbf{A}^{\Omega}(\mathbf{r}, z)$, магнитного поля $\mathbf{B}^{\Omega}(\mathbf{r}, z) = \mathrm{rot}\mathbf{A}^{\Omega}$ и сверхтока

$$\mathbf{g}^{\Omega}(\mathbf{r}) = \frac{c}{4\pi\Lambda} \left(\mathbf{\Omega} - \mathbf{A}^{\Omega} \right) \, \delta(z) \,, \tag{53}$$

соответствующие вихревому источнику (50), с точностью до коэффициента μ повторяют аналогичные распределения, создаваемые в сверхпроводящей пленке совместным действием CO-взаимодействия и обменного поля:

$$\mathbf{A}^{\Omega} = -\mu \, \mathbf{A}^{\alpha} \,, \quad \mathbf{B}^{\Omega} = -\mu \, \mathbf{B}^{\alpha} \,, \quad \mathbf{g}^{\Omega} = -\mu \, \mathbf{g}^{\alpha} \,. \tag{54}$$

Очевидно, что при $\mu = 1$ вихревой сверхток \mathbf{g}^{Ω} (53) в точности компенсирует спонтанный сверхток \mathbf{g}^{α} (19), (20) в любой точке сверхпроводящей пленки

$$\mathbf{g}(\mathbf{r}) = \mathbf{g}^{\alpha}(\mathbf{r}) + \mathbf{g}^{\Omega}(\mathbf{r}) \equiv 0,$$

соответствующее этому случаю магнитное поле отсутствует ($\mathbf{B} = \mathbf{B}^{\alpha} + \mathbf{B}^{\Omega} \equiv 0$), а свободная энергия (2) принимает свое минимальное значение $\mathcal{F} = 0$. Возможность подобной компенсации на масштабе $\xi \ll L \ll \Lambda$ спонтанного сверхтока \mathbf{g}^{α} и *z*компоненты магнитного поля B_z^{α} с помощью подбора распределения вихрей и антивихрей в окрестности ФИ-области отмечалась в работе [46]. При $\mu = 1$ вихревой источник $\mathbf{\Omega}$ (50) можно рассматривать как плотную цепочку вихрей Пирла, расположенных по периметру ФИ-диска на расстоянии $l \leq \xi$ друг от друга. Для возможности установления такого состояния увеличение свободной энергии

$$\mathcal{F}_{\Omega} = H_{cm}^2 \mathcal{V}_{\Omega} / 8\pi \approx (R/\xi) \, \Phi_0^2 / 32\pi^2 \Lambda,$$

вызванное подавлением сверхпроводимости в области с объемом $\mathcal{V}_{\Omega} \approx 2\pi R\xi d$, не должно превышать энергию \mathcal{F}_0 (4). Условие $\mathcal{F}_{\Omega} - \mathcal{F}_0 \leq 0$ определяет значения параметра $\alpha_0 \gtrsim \alpha_0^{\Omega} = (R\xi)^{-1/2} \ll \alpha_0^*$, для которых состояние с распределенным вихревым источником (50) при $\mu = 1$ и подавленным параметром порядка в кольце шириной ξ у границы диска оказывается энергетически выгодным. С другой стороны, для формирования плотной цепочки вихрей следует потребовать выполнение условия $\alpha_0^{\Omega} \gg \alpha_0^{(1)}$, накладывающее определенное ограничение на параметры, которое при $R \gg \Lambda$ можно записать в виде

$$\sqrt{\Lambda/\xi} / \ln(\Lambda/\xi) \gg \pi \sqrt{R/\Lambda} / 4 \ln(R/\Lambda).$$

При $\alpha_0 < \alpha_0^{\Omega}$ подавление сверхпроводящего параметра порядка ψ в пленке по периметру ФИ-диска оказывается неполным ($\mu < 1$) и состоит из $N = 2N_p$ сердцевин вихрей, в которых $|\psi| \approx 0$. Параметр μ в этом случае можно оценить как $\mu \sim N/N_0$, а зависимость свободной энергии от числа вихрей N записать в виде

$$\mathcal{F}(N) \simeq (1 - N/N_0)^2 \,\mathcal{F}^\alpha + N\mathcal{E}_c - \mathcal{F}_0 \,, \tag{55}$$

добавив в выражение (2) увеличение энергии на $N\mathcal{E}_c$, вызванное разрушением сверхпроводимости в



Рис. 11. Стрелками схематично показано направление смещения цепочек вихрей, приводящее к уничтожению пары вихрь-антивихрь: $N_p=4 \to 3$

сердцевине вихрей. Здесь $N_0 = \pi R/\xi$ — максимально допустимое число вихрей, которых можно разместить на периметре диска при среднем расстоянии 2ξ друг от друга. Минимум свободной энергии (55) $d\mathcal{F}(N)/dN = 0$ определяет зависимость числа вихрей N от параметра α_0 и радиуса диска R:

$$N = \frac{N_0}{2} \left[1 + \sqrt{1 - 1/2\alpha_0^2 R^2 \eta(R/\Lambda)} \right], \qquad (56)$$

где функция $\eta(\rho)$ определяется выражением (24). При фиксированных радиусе диска R и параметре α_0 множитель η определяет зависимость числа вихрей N от зависящей от температуры эффективной глубины проникновения Л. С увеличением силы СО-взаимодействия ε_0 , обменного поля h и радиуса ФИ-диска число вихрей N монотонно растет, приближаясь к своему максимуму N_0 , при котором коры соседних вихрей практически сливаются, формируя в сверхпроводящей пленке распределенную особенность в форме кольца, где $|\psi| = 0$. Полное подавление сверхпроводящего параметра порядка в пленке по периметру ФИ-диска означает формирование слабой связи в этой области. Возникающая в сверхпроводящей пленке структура напоминает кольцевой джозефсоновский SNS-переход, барьер в котором представляет собой окружность, разделяющую внутренний (область под ФИ-диском) и внешний сверхпроводящие электроды [69–71]. Поскольку область слабой связи в кольцевом переходе со всех сторон окружена сверхпроводником, полный магнитный поток, захваченный в таком переходе, должен быть кратным кванту потока Φ_0 или отсутствовать, что с очевидностью выполняется в рассматриваемом случае.

Соотношение (56) позволяет качественно проследить, каким образом меняется структура вихревого состояния при изменении температуры. До настоящего времени рассматривался случай низких температур T, при которых появление спонтанного сверхтока и вихрей происходит на фоне уже развитой сверхпроводимости. Для $T \lesssim T_c$ сверхпроводимость и экранирующие свойства оказываются слабыми $R/\Lambda(T) \ll 1$, а параметр $\eta \approx 0.25$. В этих условиях при $\Lambda(T) \gg R \gg \xi(T)$ и $\alpha_0 \gtrsim \alpha_0^{\Omega}$ в соответствии с (56) у границы ФИ-диска в пленке формируются плотные цепочки из $N_p \approx N_0/2$ вихрей и антивихрей. С понижением температуры эффективная глубина проникновения $\Lambda(T)$ и параметр η уменьшаются, что в соответствии с (56) означает уменьшение числа вихрей (антивихрей) у границы. Учитывая, что смещению вихрей из области $r \simeq R \pm \xi$ препятствуют сильные потенциальные барьеры, создаваемые спонтанным током $\mathbf{g}^{\alpha}(\mathbf{r})$, уменьшение $\Lambda(T)$ сопровождается увеличением угла θ_v , соответствующего равновесной конфигурации вихрей (см. рис. 8b и 9b), и последующей аннигиляцией пары вихрьантивихрь в области $\theta = \pm \pi/2$. На рис. 11 схематично показано смещение вихрей и уничтожение пары вихрь-антивихрь у одного из полюсов ФИ-диска $(\theta = \pi/2)$ при понижении температуры T.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе исследовано влияние СО-взаимодействия на границе ферромагнитного изолятора в форме диска и тонкой пленки синглетного сверхпроводника на возникновение в пленке спонтанных сверхпроводящих токов и вихрей Пирла, если радиус диска R сравним с эффективной глубиной проникновения магнитного поля Л, а внешнее магнитное поле отсутствует. В этих условиях (при $R \sim \Lambda$) становится существенным фактор экранировки магнитного поля, создаваемого сверхтоком и вихрями в пленке. В лондоновском приближении получены аналитические решения, описывающие распределение спонтанного сверхтока в пленке и созданного им магнитного поля. На границе области, занятой ФИ-диском, нормальная к плоскости пленки компонента поля возрастает, а тангенциальная к границе компонента сверхтока изменяет своё направление на противоположное. Такое характерное поведение сверхтока и поля по периметру диска свидетельствует о возможности подавления здесь сверхпроводящего параметра порядка даже при низких температурах, далеких от критической T_c, и появления в этой области вихрей Пирла. Этот механизм генерации вихрей в гибридных ФС-структурах с неоднородным обменным (или зеемановским) полем в присутствии СО-взаимодействия, предложенный в [44, 46], был обобщен здесь для случая $R \sim \Lambda$, когда наряду с экранировкой существенным фактором является дискретность вихрей. Появление вихрей в пленке на границе области, занятой ФИ-диском, становится возможным уже при относительно слабых СО-взаимодействии и спиновом расщеплении, когда характерная длина $l_{\alpha} = \alpha_0^{-1} \sim \Lambda$ заметно превышает сверхпроводящую длину когерентности ξ , а возникающий в такой гибридной структуре спонтанный сверхток g^{α} существенно меньше тока распаривания g^d. Были найдены оптимальные конфигурации вихрей, состоящие из нескольких ($N_n = 1-3$) пар вихрьантивихрь, свободная энергия \mathcal{F} которых принимает минимальное значение при заданных параметрах ФС-структуры и силы СО-связи. В предельном случае сильной СО-связи $\xi \ll l_\alpha \lesssim \sqrt{R\xi}$ найдена структура вихревого источника, в присутствии которого спонтанный ток в значительной степени подавлен или отсутствует. Данная вихревая структура характеризуется распределенной особенностью, расположенной на периметре диска, где сверхпроводящий параметр порядка должен быть равен нулю.

Благодарности. Автор благодарит А.И. Буздина и А.С. Мельникова за полезные обсуждения.

Финансирование. Работа выполнялась при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант # 20-12-00053).

ЛИТЕРАТУРА

- 1. R. Holm and W. Meissner, Z. Physik 74, 715 (1932).
- 2. Д. Сан-Жам, Г. Сарма, Е. Томас, *Сверхпроводи*мость второго рода, Мир, Москва (1970), с.198.
- 3. A.I. Buzdin, Rev. Mod. Phys. 77, 935 (2005).
- Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Прошин, М. Г. Хусаинов, УФН 172, 113 (2002).
- F. S. Bergeret, A. F. Volkov, K. B. Efetov, Rev. Mod. Phys. 77, 1321 (2005).
- 6. M. Eschrig, Rep. Prog. Phys. 78, 10450 (2015).
- J. Linder and J. W. A. Robinson, Nature Phys. 11 307 (2015)

- 8. И.А. Гарифуллин, УФН 176, 676 (2006)
- А.С. Мельников, С.В. Миронов, А.В. Самохвалов, А.И. Буздин, УФН, (в печати)
- 10. V.M. Edelstein, Phys. Rev. Lett. 75, 2004 (1995).
- L. P. Gor'kov and E. I. Rashba, Phys. Rev. Lett. 87, 037004 (2001).
- 12. V. M. Edelstein, Phys. Rev. B 67, 020505 (2003).
- F. S. Bergeret and I. V. Tokatly, Phys. Rev. Lett. 110, 117003 (2013).
- **14**. Ε. И. Рашба, ΦΤΤ **2** (6) 1224 (1960);
- 15. V. Mineev and M. Sigrist, Basic Theory of Superconductivity in Metals Without Inversion Center Springer, New York (2012).
- 16. A. M. Clogston, Phys. Rev. Lett. 9, 266 (1962).
- 17. B.S. Chandrasekhar, Appl. Phys. Lett. 1, 7 (1962).
- Yu. N. Ovchinnikov, Int.J.Mod.Phys.B 30, 165183 (2016); ЖЭΤΦ 150, 963 (1916).
- 19. G. Zwicknag, S. Jahns and P. Fulde, J. Phys. Soc. Jpn 86, 083701 (2017).
- 20. L. A. B. Olde Olthof, J. R. Weggemans, G. Kimbell, J. W. A. Robinson, and X. Montiel, Phys. Rev. B 103, L020504 (2021).
- 21. А.И. Ларкин, Ю.Н. Овчинников ЖЭТФ, 47, 1136 (1964)
- 22. P. Fulde, R. A. Ferrell, Phys. Rev. A135 550 (1964)
- 23. V. Barzykin, L.P. Gor'kov, Phys. Rev. Lett. 89, 227002 (2002).
- 24. F. Dolcini, M. Houzet, J.S. Meyer, Phys. Rev. B 92, 035428 (2015)
- 25. А.Ю. Китаев, УФН 171, приложение к № 10 (2001).
- 26. J. Alicea, Rep. Prog. Phys. 75, 076501 (2012)
- 27. P. M. Tedrow, J. E. Tkaczyk, and A. Kumar, Phys. Rev. Lett. 56, 1746 (2086).
- 28. T. Tokuyasu, J. A. Sauls, and D. Rainer, Phys. Rev. B 38, 8823 (1988).
- **29**. М. Г. Хусаинов, ЖЭТФ **109**, 524 (1996)
- 30. V.O. Yagovtsev, N.A. Gusev, N.G. Pugach and M. Eschrig, Supercond. Sci. Technol. 34, 025003 (2021).

- A. Hijano, S. Ilic, M. Rouco, C. Gonzalez-Orellana, et al., Phys. Rev. Research 3 023131 (2021).
- 32. X. Hao, J. S. Moodera and R. Meservey, Phys. Rev. B 42, 8235 (1990).
- 33. E. Strambini, V.N. Golovach, G. De Simoni, J.S. Moodera, F.S. Bergeret, and F. Giazotto, Phys. Rev. Materials 1, 054402 (2017).
- 34. F. S. Bergeret, M. Silaev, P. Virtanen and T. T. Heikkilä, Rev. Mod. Phys. 90, 041001 (2018).
- 35. T. T. Heikkilä, M. Silaev, P. Virtanen and F.S. Bergeret, Prog. Surface. Science, 94, 100540 (2019).
- **36**. В. М. Эдельштейн, ЖЭТФ 95, 2151 (1989);
- 37. S. Mironov, A. Buzdin, Phys. Rev. Lett. 118, 077001 (2017)
- Zh. Devizorova, A. V. Putilov, I. Chaykin, S. Mironov and A. I. Buzdin, Phys. Rev. B 103, 064504 (2021)
- 39. S. S. Pershoguba et al., Phys. Rev. Lett. 115, 116602 (2015)
- 40. A.G. Mal'shukov Phys. Rev. B 93, 054511 (2016).
- 41. J. Baumard, J. Cayssol, F.S. Bergeret, and A. Buzdin, Phys. Rev. B 99, 014511 (2019).
- 42. J. W. A. Robinson, A. V. Samokhvalov, and A. I. Buzdin, Phys. Rev. B, 99 180501(R) (2019)
- 43. J. Pearl, Appl. Phys. Lett. 5, 65 (1964).
- 44. L. A. B. Olde Olthof, X. Montiel, J. W. A. Robinson, A. I. Buzdin, Phys. Rev. B 100, 220505(R) (2019).
- 45. A.G. Mal'shukov, Phys. Rev. B 101, 134514 (2020)
- 46. A.G. Mal'shukov, Phys. Rev. B 102 144503 (2020).
- 47. P.G. de Gennes, Phys. Lett. 23, 10 (1966).
- 48. X. Hao, J. S. Moodera, and R. Meservey, Phys. Rev. Lett. 67, 1342 (1991).
- 49. F.S. Bergeret, A.F. Volkov, K.B. Efetov, Phys. Rev. B 69, 174504 (2004).
- 50. M. Houzet and J. S. Meyer, Phys. Rev. B 92, 014509 (2015)
- 51. A. A. Kopasov and A. S. Mel'nikov, Phys. Rev. B 105, 214508 (2022).
- V. P. Mineev and K. V. Samokhin, Phys. Rev. B 78, 144503 (2008)
- 53. V. M. Edelstein, Phys. Rev. B 103, 094507 (2021).
- 54. V. M. Edelstein, J. Phys. Condens. Matter, 8, 339 (1996)

- 55. K.V. Samokhin, Phys. Rev. B 70, 104521 (2004)
- 56. R. P. Kaur, D. F. Agterberg, M. Sigrist, Phys. Rev. Lett. 94 137002 (2005)
- 57. O. Dimitrova, M.V. Feigel'man, Phys. Rev. B 76, 014522 (2007).
- 58. В. П. Минеев, К. В. Самохин, ЖЭТФ 105, 747 (1994) [Sov. Phys. JETP 78, 401 (1994)].
- 59. D.F. Agterberg, Physica C 387, 13 (2003).
- A.I. Buzdin and H. Kachkachi, Phys. Lett. A 225, 341 (1997).
- 61. S. Mironov, A. Mel'nikov and A. Buzdin, Phys. Rev. Lett. 109, 237002 (2012).
- 62. S. V. Mironov, D. Yu. Vodolazov, Y. Yerin, A. V. Samokhvalov, A. S. Mel'nikov and A. Buzdin, Phys. Rev. Lett. 121 077002 (2018)
- 63. D.F. Agterberg and R.P. Kaur, Phys. Rev. B 75, 064511 (2007).

- **64**. А. А. Абрикосов, *Основы теории металлов*, Hayка, Москва (1987)
- **65**. J. B. Ketterson and S. N. Song, Superconductivity, Cambridge, University Press (1999).
- 66. A. Pal, and M. G. Blamire, Phys. Rev. B 92, 180510 (2015)
- 67. Y. M. Shukrinov, A. Mazanik, I. R. Rahmonov, A. E. Botha, and A. Buzdin, Europhys. Lett. 122, 37001 (2018).
- 68. G. P. Malik, J. Modern Phys. 8, 99 (2017)
- 69. R. H. Hadfield, G. Burnell, D.-J. Kang, C. Bell, and M. G. Blamire, Phys. Rev. B 67, 144513 (2003).
- 70. J. R. Clem, Phys. Rev. B 82, 174515 (2010)
- 71. S. Matsuo, M. Tateno, Y. Sato , et al., Phys. Rev. B 102, 045301 (2020)

АВ INITIO-ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АІ НА ЭНТАЛЬПИЮ РАСТВОРЕНИЯ ПРИМЕСИ УГЛЕРОДА В ПАРАМАГНИТНОМ ГЦК-СПЛАВЕ Fe-Mn

А. В. Пономарева^{*}, Е. А. Смирнова

Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» 119049, Москва, Россия

Поступила в редакцию 15 июня 2022 г., после переработки 15 июня 2022 г. Принята к публикации 19 июля 2022 г.

В рамках теории функционала электронной плотности выполнен расчет энтальпии растворения примеси углерода в парамагнитном Fe–Mn–Al-сплаве. Для описания ГЦК-сплавов на основе Fe использована модель, учитывающая вклад тепловых магнитных флуктуаций в парамагнитной матрице с атомным беспорядком и точечными дефектами. Обнаружено, что добавление примерно 2 ат.% Al в сплав Fe-20 ат.% Mn увеличивает энтальпию растворения углерода относительно сплава Fe–Mn и уменьшает относительно растворения в γ -Fe. Показано, что если атом алюминия находится в первой координационной сфере углерода, то взаимодействие атомов Al и C является отталкивающим из-за большого деформационного искажения решетки вокруг атома алюминия. Продемонстрировано различие перераспределения заряда вокруг примеси в отсутствие и при наличии атома алюминия в качестве ближайшего соседа. Проведен анализ влияния локального окружения, деформации решетки и магнитных взаимодействий на энергию растворения углерода.

DOI: 10.31857/S004445102212015X **EDN:** LETZRE

1. ВВЕДЕНИЕ

Аустенитные стали с высоким содержанием марганца представляют большой интерес для различных инженерных применений из-за их уникального сочетания чрезвычайно высокой прочности, пластичности, поглощения энергии при деформации и экономической эффективности [1-4]. Для стабилизации аустенитной матрицы добавляют до 35 масс.% Mn, при этом сплавы Fe-Mn могут содержать и другие элементы для улучшения некоторых специфических свойств. В этом контексте система Fe-Mn-Al-C привлекает большое внимание, поскольку добавление Al и C в сплавы системы Fe-Mn эффективно снижает вес материала примерно до 10%, повышает прочность и пластичность [5, 6]. Изучение широкого спектра характеристик системы Fe-Mn-Al-C, включая влияние содержания Al на механические свойства, поведение дислокационных структур по мере развития деформации, деформационного упрочнения, механизмов пластичности представлены в работах [7–15]. Углерод сильно влияет на свойства сплавов даже при незначительном содержании, в то же время в работе [16] сообщается о новом классе композиционно-сложных сталей (CCS) с составом Fe-26Mn-16Al-5Ni-5C (ат.%), где углерод достигает уровня концентрации, сопоставимого с примесями замещения. Также углерод оказывает влияние на фазовое равновесие, переходы TWIP/TRIP, процессы образования карбидов. Поэтому детальное изучение термодинамики растворения примесей замещения и внедрения является необходимым для прогнозирования фазового и структурного состояния материала.

В экспериментальных работах [17, 18] авторы сообщали, что мартенситное превращение в сталях Fe– Mn проходит при температуре выше, чем температура Нееля этих сталей. Также в работе [19] сообщается, что при увеличении концентрации Mn в ГЦК-сплавах Fe–Mn температура Нееля увеличивается, но не превышает 550 К во всем концентрационном интервале Mn. Поэтому моделирование па-

E-mail: alena.ponomareva@misis.ru

рамагнитного состояния в сплавах и сталях на основе системы Fe-Mn является актуальной задачей. При этом наличие локальных магнитных моментов в высокотемпературном парамагнитном состоянии делает весьма проблематичным изучение процессов легирования и образования точечных дефектов в этих сплавах. Поэтому большинство ab initioрасчетов [20-25] сосредоточены на антиферромагнитном состоянии при исследовании свойств ГЦКсплавов Fe-Mn и сталей. Существует ряд основных подходов к описанию парамагнитных материалов, например, динамическая теория среднего поля (DMFT) [26], метод разупорядоченного магнитного момента (DLM) [27, 28], объединённый с методом когерентного потенциала (CPA) (DLM-CPA) [29], метод молекулярной динамики разупорядоченного локального момента (DLM-MD) [30]. Однако расчеты методами DMFT и DLM-MD трудоемки, а в методе DLM-CPA невозможно исследовать материалы с сильными локальными искажениями кристаллической решетки, возникающими вокруг примесей внедрения.

Ранее мы исследовали растворение углерода в парамагнитных *γ*-Fe [31] и ГЦК-сплаве Fe–Mn [32]. В [31] мы применили комбинированный подход с использованием модели неупорядоченных локальных моментов (DLM) и метода суперячеек [33], который был обобщен нами и позволил учитывать тепловые магнитные флуктуации в парамагнитной матрице с точечными дефектами. В этой работе мы продемонстрировали численную эффективность для расчета энтальпии растворения примесей внедрения и замещения в аустените. Далее, в работе [32] мы модифицировали предложенную ранее модель на случай сплава и выполнили расчет энтальпии растворения углерода в парамагнитном Fe-Mn-сплаве. В работе показано, что в сплаве, содержащем около 20 ат. % Mn, энергия растворения углерода становится ниже относительно значения в чистом парамагнитном ужелезе. Также в работах [31, 32] был проведен анализ локального влияния примесей на свойства матрицы.

Цель данной работы состоит в том, чтобы распространить разработанные подходы на случай многокомпонентных сплавов, в данном случае исследовать растворение углерода в парамагнитном Fe–Mn– Al-сплаве и проанализировать эффекты, вызванные легированием примесями замещения Al и внедрения C на свойства материала.

2. МЕТОДИКА РАСЧЕТА

2.1. Моделирование магнитного беспорядка

Кратко опишем теоретический подход, использованный для расчета энтальпии растворения изолированной примеси, следуя работам [31, 32].

Парамагнитное состояние ГЦК-сплава Fe-Mn-Al (без углерода) задавалось в схеме специальных квазинеупорядоченных структур (SQS) [34] как 5компонентный сплав $((Fe_{39}Mn_{10}) \uparrow (Fe_{39}Mn_{10}) \downarrow)Al_2$ (индекс соответствует количеству атомов в суперячейке), представляющий (атомно- и магнито-) неупорядоченный сплав, в котором атомы Fe, Mn и Al имели случайное пространственное распределение, в то же время атомы Fe и Mn имели коллинеарные, но случайно распределенные ориентации магнитных моментов. Непосредственно сама модель SQS описывает статическую картину «замороженных» магнитных неупорядоченных моментов, т.е. не учитывает динамики спинов. Поскольку диффузия атомов на несколько порядков медленнее магнитных флуктуаций, за время между диффузионными прыжками в окрестности примеси реализуется множество различных магнитных конфигураций. Чтобы учесть динамическое поведение магнитной системы (в статических расчетах), мы аппроксимировали парамагнитное состояние с помощью набора магнитных конфигураций, которые получены путем изменения позиций одиночной примеси внутри SQS-ячеек, используемых для сплава Fe-Mn-Al. Энергии используемых суперячеек должны быть усреднены при определенной температуре по магнитным степеням свободы. Для усреднения мы использовали 80 расположений примеси на различных позициях магнитных SQS-ячеек до сходимости кумулятивной средней. Полученная энергия $\langle E((\text{Fe-X})_{1-y}C_y)\rangle$, где X = Mn-Al с концентрацией одиночной примеси у, определяемой размерами SQS-ячейки, была принята за потенциальную энергию парамагнитного сплава. Энтальпия растворения углерода в парамагнитном сплаве рассчитывалась следующим образом:

$$\langle H_{sol} \rangle = (N+1) \langle E((\text{Fe-X})_{1-y} C_y) \rangle - - N \langle E(\text{Fe-X}) \rangle - E(C), \quad (1)$$

где $E((\text{Fe-X})_{1-y}C_y)$, E(Fe-X), E(C) — энергии на атом ячеек и примеси, N — число атомов в матрице (без примеси). Для основного состояния сплавов Fe, Fe-Mn, Fe-Mn-Al было принято ГЦК-состояние DLM, углерода — ГПУ-структура с экспериментальным параметром решетки и отношением c/a (a = 2.46 Å, c = 6.65 Å). Для того чтобы нейтрализовать зависимость от вида конкретной SQS, был выполнен расчет энергии растворения, определённой по отношению к распаду не на чистые элементы, а на углерод (графит) и Fe–Mn–Al-сплав, реализованный на той же SQS, на которой выполнялся перебор. Расчет проводился при экспериментальных параметрах решетки, соблюдая равенство давления ячейки без примеси и среднего давления ячеек с примесью [31].

2.2. Выбор параметра решетки в ГЦК-сплавах

При высокой температуре, соответствующей области стабильности аустенита становятся существенными эффекты термического расширения, которые не учитываются при вычислении полной энергии методом теории функционала плотности при T = 0 К. Это приводит к тому, что экспериментальный параметр решетки сплавов Fe-Mn-Al не соответствует минимуму расчетной полной энергии (теоретическое значение давления на экспериментальном параметре решетки в интервале от $P \approx -13.4$ ГПа до $P \approx -13.5$ ГПа). Поэтому значения параметров решетки для соответствующих концентраций Fe-Mn-Al-C-сплава выбирались следующим образом. Параметры решетки при комнатной температуре рассчитывались с помощью уравнений, полученных на основе экспериментальных данных работ [35] и [36] (концентрации Cr. Ni. Мо, V полагались равными нулю).

Для сплава Fe–Mn–C:

$$a_{\gamma 0} = 3.573 + 3.3 \cdot 10^{-2} (\% \text{C}) + 9.5 (\% \text{Mn}) \cdot 10^{-4} - 2(\% \text{Ni}) \cdot 10^{-4} + 6(\% \text{Cr}) \cdot 10^{-4} + 3.1 (\% \text{Mo}) \cdot 10^{-3} + 1.8 (\% \text{V}) \cdot 10^{-3}, \quad (2)$$

где концентрации измеряются в % масс. и параметры решетки $a_{\gamma 0}$ в Å.

Для сплава Fe–Mn–C-Al использовалось уравнение из работы [36]:

$$a_{\gamma 0} = 0.35945 + 1.25 \cdot 10^{-4} (\% \text{Mn} - 20) + + 5.94 \cdot 10^{-4} (\% \text{Al}) + 2.72 \cdot 10^{-3} (\% \text{C}), \quad (3)$$

где концентрации измеряются в % масс. и параметры решетки $a_{\gamma 0}$ в нм.

При высокой температуре ($T \approx 1100 \text{K}$) параметр решетки рассчитывался как

$$a_{\gamma}(T) = a_{\gamma 0} \cdot (1 + \beta_{\gamma} \cdot (T - 300)),$$
 (4)

где β_{γ} — коэффициент линейного расширения аустенита, $\beta_{\gamma} = 2.065 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ [37].

Для сплавов с примесью при параметрах решетки, полученных с помощью уравнений (2)-(4), после процедуры самосогласования каждой реализации было определено среднее давление по набору магнитных конфигураций. Для вычисления $\langle H_{sol} \rangle$ параметр решетки сплава без примеси выбирался так, чтобы полученное давление для матрицы было равно среднему давлению для сплава с примесью. Как было показано в [31], такой подход является адекватным в случае, когда расчетные значения параметров решетки, соответствующих минимуму энергии при нулевой температуре, значительно отличаются от экспериментальных значений при высокой температуре. При этом полученный параметр решетки ячейки без примеси должен соответствовать экспериментальному параметру решетки при заданной температуре и концентрации из уравнений (2)-(4).

В табл. 1 приведены значения параметров решетки, полученные с использованием уравнений (2)– (4) и с помощью процедуры уравнивания давления ячейки без примеси и среднего давления ячеек с примесью. Из таблицы следует, что значения параметров решетки при условии равенства давлений \overline{P} (Fe–X – C) = P(Fe–X) хорошо совпадают со значениями, полученных из уравнений (2)–(4).

2.3. Детали расчета

Расчеты энтальпии растворения примеси углерода в сплавах Fe-Mn-Al были проведены методами теории функционала электронной плотности, реализованными на базисе проекторов плоских волн (PAW) в пакете VASP [38-40]. Атомы углерода размещались в октаэдрических позициях. Моделирование проводилось с использованием 108 (84Fe, 22Mn, 2 Al) и 109 (84Fe, 22Mn, 2 Al, 1С) атомных периодических суперячеек. Интегрирование по зоне Бриллюэна выполнялось с использованием метода Метфесселя-Пакстона [41] с параметром размытия 0.1 эВ и схемы Монхорста-Пака [42] с сеткой размерами $2 \times 2 \times 2$. Для учета обменно-корреляционных эффектов использовалось обобщенное градиентное приближение (generalize gradient approximation, GGA) [43]. Релаксация атомных позиций была получена путем вычисления сил Хеллмана-Фейнмана [44, 45] с использованием метода сопряженного градиента и проводилась до тех пор, пока остаточные силы, действующие на атомы, не становились порядка 10^{-3} эB/Å. Объем и форма суперячейки для каждой реализации оставались фиксированными. Энергия обрезания плоских волн была выбрана равной 500 эВ.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Локальные и глобальные эффекты влияния примеси на свойства матрицы

Предложенный метод расчета позволяет рассмотреть локальные влияния примесей на свойства матрицы, т. е. во время жизни одной магнитной конфигурации и определенного локального окружения. Рассмотрим влияние примеси углерода на свойства системы Fe–Mn–Al–C и сравним их с аналогичными свойствами в системах Fe–C [31] и Fe–Mn–C [32].

На рис. 1 представлены энергии ячеек в зависимости от суммарного магнитного момента кластера $\sum \mu^{NN}$ атомов металла в первой координационной сфере (КС) примеси в сплавах Fe-C, Fe-Mn-C, Fe-Mn–Al–C. Под величиной $\sum \mu^{NN}$ подразумевается сумма магнитных моментов атомов матрицы, взятых со своими знаками. Если в первой КС содержатся три атома со спинами вверх и три атома со спинами вниз, то $\sum \mu^{NN}$ будет близок к нулю. В противоположном предельном случае, если первая КС имеет ферромагнитную структуру с наибольшей магнитной поляризацией, $\sum \mu^{NN}$ будет близок к $12\mu_B$. На рис. 1 видно, что во всех исследуемых сплавах наблюдается большой разброс в распределении значений энергий ячеек из-за различного локального магнитного и атомного окружения примеси. В сплавах с Mn и Al, так же, и в Fe-C-сплавах, разброс значений энергий ячеек достаточно велик, что обусловлено наличием различных магнитных конфигураций и локального окружения вокруг атомов примеси. Однако в сплавах Fe-Mn и Fe-Mn-Al энергии суперячеек расположены достаточно равномерно относительно $\sum \mu^{NN}$ (рис. 16 и 1*c*), в то время как в Fe–C-сплаве наблюдается тенденция уменьшения энергии при увеличении $\sum \mu^{NN}$, о чем свидетельствует линия тренда на рис. 1а.

Как было показано в нашей предыдущей работе [31], при моделировании процесса растворения углерода в парамагнитном железе почти в половине рассмотренных конфигураций мы наблюдали спин-флип-переходы (СФП), которые появлялись на атомах, расположенных в первой КС примеси. СФП проявлялись изменением ориентации локального магнитного момента Fe относительно его первоначального значения в матрице без примеси, в результате чего магнитный момент кластера $\sum \mu^{NN}$, состоящий из атомов вокруг примеси, увеличивался, и первая КС углерода становилась более поляризованной. Важной особенностью магнитных реализаций с СФП является то, что для них энергии суперячеек в среднем ниже, чем для ячеек без переворота спина. Возможная причина появления СФП в Fe-С-сплавах заключается в сильной объемной зависимости парных обменно-корреляционных параметров Fe-Fe классического гамильтониана Гейзенберга [31], которые в DLM-состоянии при увеличении объема меняют знак с отрицательного на положительный, что означает появление тенденции к ферромагнитному упорядочению. Поэтому можно предположить, что растягивающие напряжения вокруг примеси углерода содействуют формированию локальных объемов с частично или полностью ферромагнитной структурой, которые будут понижать энтальпию растворения.

Действительно, на рис. 1а видно, что минимальная энергия ячеек соответствует реализациям с наибольшей магнитной поляризацией ближайшего кластера атомов Fe вокруг примеси углерода. При добавлении марганца в системе появляются обменные взаимодействия Fe-Mn и Mn-Mn, которые, как показано в работе [32], меньше нуля и существенно больше по величине взаимодействия Fe-Fe, при этом остаются отрицательными во всем интересующем нас диапазоне значений параметра решетки и вокруг состояния равновесия и с учетом дилатаций. При добавлении немагнитного алюминия в малой концентрации поведение обменных взаимодействий принципиально не меняется. Наличие Mn в сплавах Fe-Mn-C и Fe-Mn-Al-C приводит к ослаблению эффекта поляризации, так как ферромагнитный кластер атомов, если в него включен Mn, не будет удовлетворять знаку обменных взаимодействий Fe-Mn и Mn–Mn. Отметим, что СФП также наблюдались в сплавах с Mn и Al, главным образом для ячеек, в которых атом примеси окружен только атомами железа, но их число было невелико.

На рис. 2 представлены энергии суперячеек сплавов Fe–C, Fe–Mn–C, Fe–Mn–Al–C в зависимости от величины среднего искажения $\Delta R_{\rm C}$ межатомных расстояний от атома углерода до атомов метала матрицы, расположенных в первой КС примеси. Средние искажения вычислялись относительно соответствующих расстояний в идеальной ячейке без релаксаций, суммирование проводилось по координационным сферам примеси и набору конфигураций. Из рис. 2 следует, что система Fe–Mn–Al–C имеет максимальный диапазон разброса искажений 3.5% (примерно от 3.5% до 7%), для сплава Fe–Mn–C ве-



Рис. 1. Энергии суперячеек сплавов Fe–C, Fe–Mn–C, Fe–Mn–Al–C в зависимости от суммарного магнитного момента $\sum \mu^{NN}$ атомов матрицы в первой КС вокруг примеси



Рис. 2. Энергии суперячеек сплавов Fe–C, Fe–Mn–C, Fe–Mn–Al–C в зависимости от средней величины искажения ΔR_{C} на первой КС примеси

личина разброса сужается до 2% (примерно от 4.5% до 6.5%), а для сплава Fe–C изменение энергии от $\Delta R_{\rm C}$ достаточно локализовано в пределах примерно от 5% до 6%. В случае бинарного сплава энергии сильнее зависят от значения $\sum \mu^{NN}$, чем от $\Delta R_{\rm C}$, для многокомпонентных сплавов появляется зависимость от количества атомов Mn и Al в первой KC примеси, поэтому диапазон $\Delta R_{\rm C}$ увеличивается.

Рассмотрим этот эффект, анализируя рис. 3 и 4, на которых представлены зависимости энергии (рис. 3) и средней величины искажения $\Delta R_{\rm C}$ (рис. 4) от количества атомов Mn в первой KC примеси в сплавах Fe–Mn–C и Fe–Mn–Al–C. Из представленных рисунков следует, что для сплава Fe–Mn–Al–C максимальные энергии, независимо от количества Mn, соответствует реализациям, в которых Al является ближайшим соседом примеси углерода, более того, для ячеек с 1NN Al наблюдается максимальная деформация 6%-7%. Минимальные энергии в сплавах Fe-Mn-C и Fe-Mn-Al-C соответствуют тем реализациям, у которых в первой КС примеси есть один или два атома марганца с магнитными моментами, удовлетворяющими знакам обменного взаимодействия. Например, минимальная энергия соответствует ячейке с двумя атомами марганца в первой сфере примеси с антипараллельной ориентацией магнитных моментов и значениями около $2.2\mu_B$. Если магнитное и локальное окружение вокруг примеси не удовлетворяет знакам обменных взаимодействий из-за длинноволнового магнитного взаимодействия в сплавах на основе ГЦК Fe [46], то это ведет к появлению фрустрированного состояния и увеличению энергии ячеек. Поэтому в каждой группе по NN Mn существует большой разброс



Рис. 3. Энергии суперячеек сплавов Fe-Mn-C и Fe-Mn-Al-С в зависимости от количества атомов Mn и Al в первой КС примеси



Рис. 4. Величина искажения $\Delta R_{\rm C}$ расстояния между атомами С и металлов, расположенных в первой КС примеси в сплавах Fe–Mn–C и Fe–Mn–Al–C в зависимости от количества атомов Mn и Al в первой КС примеси

по энергиям. Также при наличии в первой КС примеси трех атомов марганца в качестве ближайших соседей, вероятность появления магнитных фрустраций увеличивается из-за невозможности для всех пар атомов реализовать обменное взаимодействие согласно знаку взаимодействия Mn–Mn и поэтому в распределении энергий таких ячеек мы не находим минимальных энергий.

Из рис. 4 следует, что чем меньше атомов марганца в первой КС примеси, тем больше ячеек с меньшей деформаций $\Delta R_{\rm C}$. В сплаве Fe–Mn–Al– С минимальные деформации (3.5%–4.5%), которых нет в сплавах Fe–C и Fe–Mn–C, соответствуют реализациям с NN Mn, равным нулю или единице, т. е. соответствует либо полностью железному окружению примеси, либо с одним атомом марганца. Это происходит вследствие увеличения параметра решетки, который меняется от 3.647 Å в Fe–C-сплаве до 3.685 Å и 3.670 Å в сплавах Fe–Mn–C и Fe–Mn–Al– С (табл. 1) и уменьшает деформацию матрицы вокруг атомов Fe и Mn с максимальным эффектом для по следующим координационным сферам (2–5 КС). Из табл. 2 следует, что средняя деформация межатомного расстояния для атомов Fe, Mn и Al ближайших к атому примеси является растягивающей. Для Fe $\Delta R_{\rm Me}$ уменьшается от бинарного к четырехкомпонентному сплаву, для Mn — от сплава Fe-Mn-C к Fe-Mn-Al-C, причем для Fe значение деформации меньше, чем для Mn для 1-2 KC примеси. Максимальное значение $\Delta R_{\rm Me}$ на первой КС металла вблизи примеси наблюдается для атома алюминия в сплаве Fe-Mn-Al-C, поэтому перемещение его из первой сферы примеси понижает энергию ячейки. При этом дилатации вокруг атома углерода достаточно быстро уменьшаются от максимального значения на первой КС до существенно меньших значений на 3-5 КС примеси.

Таким образом, в многокомпонентном сплаве Fe– Mn–Al–C, с одной стороны, появились дилатации вокруг атома Al в первой KC примеси, которые существенно больше, чем у атомов Fe и Mn в γ -Fe и сплавах Fe–Mn–C и Fe–Mn–Al–C. Как показал анализ, деформации такой величины являются энергетически невыгодными и препятствуют растворению примеси.

С другой стороны, из-за увеличения параметра решетки в сплаве Fe–Mn–Al–C деформация вокруг атомов Fe и Mn уменьшается относительно бинарного и тройного сплавов. Одновременно увеличиваются геометрические размеры междоузлия, в котором растворяется углерод, особенно в присутствии 1–2 атомов Mn в первой КС примеси. Этот фактор способствует растворению примеси углерода в многокомпонентных сплавах.

Рассмотрим влияние примеси на магнитные свойства матрицы. Из табл. 3, в которой показаны средние магнитные моменты на атомах матрицы в первых пяти координационных сферах вокруг одиночной примеси, следует, что на первой КС примеси углерода происходит существенное уменьшение величины магнитного момента на атомах Fe и Mn по сравнению с матрицей (пятая КС), при этом величина магнитного момента на атоме марганца выше, чем на железе. Обращает на себя внимание тот факт, что в Fe-C-сплаве средний магнитный момент на атоме Fe выше, несмотря на то, что в многокомпонентных сплавах параметры решетки больше, чем в Fe-C-сплаве. Если мы рассмотрим значения магнитных моментов всех атомов Fe и Mn, расположенных в первой КС примеси (рис. 5), то становится понятным, что это результат существования определенного количества атомов в первой КС примеси с низкими магнитными моментами $0-0.5\mu_B$ в сплавах с Mn и Al.

Как было показано в [31], в сплаве Fe-C низкие магнитные моменты на атоме железа появляются только на идеальной ячейке. После релаксации, хотя разброс значений остается большим и зависит от локального окружения, магнитные моменты меньше 0.5µ_В пропадают из-за спин-флип-переходов и поляризации. Наличие низких магнитных моментов от нуля до $0.5\mu_B$ на атомах Fe и Mn в сплавах Fe-Mn-С и Fe-Mn-Al-С является следствием невозможности удовлетворить знаку обменного взаимодействия некоторых Fe-Fe-, Fe-Mn- и Mn-Mn-пар атомов, что приводит к обнулению моментов на этих атомах, поскольку позволяет избежать магнитной фрустрации. При этом низких магнитных моментов на атоме Fe больше, чем на атоме Mn, так как величина обменного Mn-Mn-взаимодействия (по модулю) выше значений для Fe-Fe и Fe-Mn [32]. Также из табл. 3 следует, что возмущение магнитных моментов становится малым уже на третьей сфере атомов, окружающих примесь.

Отметим, что величина индуцированного магнитного момента атома углерода во всех изучаемых сплавах увеличивается при увеличении величины намагниченности на первой КС $\sum \mu^{NN}$, достигая $\pm 0.15\mu_B$ при максимальной намагниченности ближайшего кластера атомов, при этом направление магнитного момента на атоме примеси всегда антипараллельно суммарному магнитному моменту атомов, окружающих углерод в первой КС. Рассчитанные магнитные моменты атома Al не превышали значения $0.06\mu_B$.

3.2. Энтальпия растворения углерода в парамагнитных ГЦК-сплавах Fe, Fe–Mn, Fe–Mn–Al

Используя методику, описанную в разделе 2.1, и уравнение (1), мы рассчитали усредненные энтальпии растворения $\langle H_{sol} \rangle$ примеси углерода в парамагнитном сплаве Fe–Mn–Al. Результаты для сплава Fe–Mn–Al представлены в табл. 4, для сравнения мы приводим результаты для сплавов Fe–C [31] и Fe–Mn–C [32].

При растворении примеси углерода в парамагнитном γ -железе показаны значения $\langle H_{sol} \rangle$ с учетом и без учета локальной магнитной поляризации, т.е., если при расчете энтальпии растворения учесть энергии ячеек с СПФ, то $\langle H_{sol} \rangle = 0.2$ эВ. Статисти-



Рис. 5. Значения магнитных моментов (MM) всех атомов Fe и Mn, расположенных в первой KC примеси в сплавах DLM Fe-C, Fe-Mn-C и Fe-Mn-AI-C



Рис. 6. Карта разности зарядовой плотности для сплава Fe-Mn-Al-C в плоскости примеси; *a* — с атомом марганца (3Fe, 1Mn), *б* — с атомом Al (3Fe, 1 Al) в первой координационной сфере углерода

ческий вес таких конфигураций может стать существенным в переохлажденном аустените. В интервале высоких температур доля таких поляризаций с большой степенью вероятности будет мала, поэтому если исключить их из расчета энтальпии растворения, то для температурной области стабильности аустенита $\langle H_{sol} \rangle$ равна 0.27 эВ. Расчеты показали, что в сплаве Fe–Mn–C, содержащем марганец (около 20 ат.%), энергия растворения становится ниже, чем в чистом парамагнитном γ -железе. Как показано выше, это вклад увеличения размеров октопоры и соответственного понижения энергии.

Добавление примерно 2 ат. % Al в сплав Fe– Mn увеличивает $\langle H_{sol} \rangle$ относительно сплава Fe–Mn, но при этом значение ниже, чем при растворении в γ -Fe. В табл. 4 приведены значения энергии растворения C в сплаве Fe–Mn–Al для двух случаев, а именно, с учетом и без учета энергий суперячеек, в которых Al находится в первой KC приме-

Сплав	$a,\mathrm{\AA}$	$a,\mathrm{\AA}$
	$\overline{P}(\text{Fe-X} - \text{C}) = P(\text{Fe-X})$	из уравнений (2)–(4)
	${ m X}={ m Mn},{ m Mn}{ m -Al}$	
Fe-Mn	3.650	3.651
Fe–Mn–C		3.658
Fe-Mn-Al	3.663	3.660
Fe-Mn-Al-C		3.670

Таблица 1. Параметры решетки в сплавах Fe–Mn и Fe–Mn–Al без примесей, полученные либо с помощью уравнений (2)–(4), либо при фиксированном давлении Fe–X-ячейки, равном среднему давлению Fe–X–C-суперячеек

Таблица 2. Средние относительные смещения ΔR_{Me} (%) позиций атомов матрицы в первых пяти координационных сферах примеси

Сплав/Металл	Номер координационной сферы				
	1	2	3	4	5
$\rm Fe-C/Fe$	5.7	1.2	0.4	0.2	0.05
$\rm Fe-Mn-C/Fe$	5.1	0.7	-0.2	-0.1	-0.2
$\rm Fe-Mn-C/Mn$	6.9	0.8	0.2	-0.1	-0.1
${\rm Fe-Mn-Al-C/Fe}$	4.4	0.3	-0.1	-0.4	-0.2
Fe–Mn–Al–C/Mn	6.3	0.5	-0.3	-0.5	-0.2
Fe-Mn-Al-C/Al	14	1.0	1.0	-0.6	-0.5

Таблица 3. Средние магнитные моменты на атомах матрицы (μ_B) в первых пяти координационных сферах вокруг одиночной примеси

Сплав/Металл	Номер координационной сферы				
	1	2	3	4	5
Fe–C, Fe	1.7	2.2	2.1	2.1	2.1
Fe–Mn–C, Fe	1.5	2.1	2.0	2.0	2.0
Fe–Mn–C, Mn	1.8	2.5	2.3	2.3	2.3
Fe–Mn–Al–C, Fe	1.6	2.1	2.0	2.0	2.0
Fe–Mn–Al–C, Mn	1.9	2.5	2.4	2.4	2.4
Fe–Mn–Al–C, Al	0.02	0.03	0.03	0.03	0.03

Таблица 4. Теоретические $\langle H_{sol} \rangle$ и экспериментальные значения энтальпии растворения (в эВ) примеси углерода в парамагнитных ГЦК-сплавах Fe, Fe–Mn и Fe–Mn–Al

Сплав	Теория	Эксперимент	
Fe	С учетом локальной магнитной поляризации	0.20 [31]	0.36 [47]
	Без учета локальной магнитной поляризации	0.27 [31]	0.46 [48]
Fe–Mn		0.12 [32]	0.37 [48]
Fe-Mn-Al	В отсутствие Al в первой KC примеси	0.13	
	При наличии Al в первой KC примеси	0.17	

си. С учетом всех расположений атомов алюминия $\langle H_{sol} \rangle = 0.17$ эВ; с вычетом тех, в которых Al ближайший сосед примеси — $\langle H_{sol} \rangle = 0.13$ эВ. Таким образом, исключение из расчета энергий ячеек с ближайшим расположением пар Al-C понижает энтальпию растворения почти на 20%. Этот результат совпадает с экспериментальными данными работы [49], в которой при анализе мессбауэровских спектров ГЦК-сплавов Fe-Al-С и Fe-Mn-С было показано, что взаимодействие ближайших Al-C-пар является отталкивающим, в то время как атомы Mn и C, находящиеся в первой КС друг друга, характеризуются значительным притягивающим взаимодействием. Действительно, мы видим уменьшение энтальпии растворения в сплавах с Mn относительно сплавов Fe–C и существенно увеличение $\langle H_{sol} \rangle$ при расположении атомов углерода и алюминия в качестве ближайших соседей (табл. 4). В этой же работе обнаружено сильное притяжения между атомами С и Al, находящимися во второй КС друг друга, в нашей работе энергии в сплаве Fe-Mn-Al-C ниже среднего значения соответствуют ячейкам, где Al расположен во всех сферах выше первой, с чуть большим количеством на третьей и четвертой сферах, хотя доля низких энергий с атомами Al во второй КС примеси составляла примерно четверть от числа энергий ниже среднего. Отметим, что в работе [50] при проведении испытаний на растяжение аустенитных сталей Fe-Mn-C наблюдалось увеличение предела выносливости за счет динамического деформационного старения. Авторы высказали предположение, что полученный результат связан с образованием Mn-Cпар, которые вызвали локальное упрочнение.

Уменьшение энергии растворения углерода в сплавах с Mn относительно Fe-C, полученное теоретически, качественно согласуется с экспериментом [48]. В работе [48] при исследовании активности углерода в аустенитных сплавах Fe-Mn-C в интервале температур $T \approx 1000-1400$ К с использованием CH₄-H₂-метода уравновешивания было показано, что энтальпия растворения графита, положительная в бинарных сплавах Fe-C, уменьшается с увеличением содержания марганца. Отметим, что энтальпии растворения углерода в сплавах на основе ГЦК-железа имеют малые значения, поэтому величина несоответствия теоретических результатов экспериментальным данным выглядит большой. При этом возможными источниками ошибок является статическое описание парамагнитного состояния [30], неполный учет длинноволнового магнитного взаимодействия в ГЦК-железе [46] из-за ограниченных размеров ячейки, электронные корреляции.

Также в работе [48] сообщается, что коэффициент активности углерода уменьшается при добавлении марганца в Fe–C. Это совпадает с результатами работы [51], в которой представлена зависимость для относительного коэффициента активности углерода от концентраций легирующих элементов, из которой следует, что Mn должен уменьшать коэффициент активности, а Al должен его повышать.

Различный эффект влияния Mn и Al на подвижность атома углерода можно увидеть, анализируя карты разности зарядовой плотности, которые позволяют выделить перераспределение электронной плотности в результате образования атомной связи (рис. 6). В работе [32] при исследовании разностной зарядовой плотности для сплава Fe-Mn-C мы наблюдали, что если атом углерода окружен только атомами железа, то избыток электронов вокруг атома углерода, образованный переносом электронной плотности от Fe к C, симметрично локализован около каждого соседнего атома железа. Между самими атомами железа и вблизи углерода существуют области с пониженной электронной плотностью. Когда в первой КС примеси появляются атомы марганца, на линиях связи Mn-С и Mn-Fe образуются области избыточного заряда, закрывая области с пониженной зарядовой плотностью. В результате такого перераспределения заряда усиливается прочность связи углерода с кластером атомов первой координационной сферы, что уменьшает активность углерода и облегчает его растворимость. В сплаве Fe-Mn-Al-C тип распределения электронной плотности вокруг Fe и Mn практически не меняется, если рядом нет атома алюминия. При сечении октопоры плоскостью, в которой расположены атомы 3Fe, 1Mn и 1С, распределение зарядовой плотности идентично наблюдаемому в сплаве Fe-Mn-C с таким же распределением атомов (рис. 6а). В то же время сечение плоскостью, в которой находятся атомы 3Fe, 1 Al и 1С показывает, что на линии связи Al-С обнаруживается существенный недостаток электронов (рис. 66). Это ослабляет атомную связь между атомами углерода и алюминия и может увеличивать подвижность углерода.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Расчет энтальпии растворения примеси углерода в парамагнитном сплаве Fe–Mn–Al с учетом магнитного и атомного беспорядка выполнен в рамках теории функционала электронной плотности с использованием программного пакета VASP.

Исследование показало, что рассчитанное среднее значение энтальпии растворения углерода в сплаве Fe-20at.%Mn-2at.%Al выше, чем в сплаве Fe-20ar.%Mn, но меньше, чем в чистом гаммажелезе. Обнаружено, что взаимодействие ближайших атомов Al и C является отталкивающим, что подтверждается экспериментальными наблюдениями. Отталкивание возникает из-за появления больших деформационных искажений вокруг атома алюминия, что является энергетически невыгодной ситуацией. В то же время увеличение параметра решетки при добавлении алюминия приводит к уменьшению деформационных искажений связей Fe-C и Мп-С и увеличению геометрических размеров междоузлия, в котором растворяется углерод, что может благоприятствовать растворению примеси. Самыми энергетически выгодными оказались реализации с ближайшим окружением примеси с 1-2 атомами Mn, имеющими большие, антипараллельно направленные друг другу магнитные моменты, и атомом Al, расположенным во всех координационных сферах примеси дальше первой. Показано, что перераспределение электронной плотности вокруг атома Mn способствует увеличению прочности связи углерода с кластером атомов первой координационной сферы, в то время как атом алюминия ослабляет ее. Поэтому можно предположить, что взаимное расположение Mn и C в первой координационной сфере друг друга и атомов Al и C на второй и более дальних сферах будет приводить к уменьшению подвижности и увеличению растворимости углерода.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 22-12-00193).

ЛИТЕРАТУРА

- S. Curtze and V.T. Kuokkala, Acta Mater. 58, 5129 (2010).
- D. Barbier, N. Gey, S. Allain, N. Bozzolo, and M. Humbert, Mater. Sci. Eng. A 500, 196 (2009).
- O. Bouaziz, S. Allain, C.P. Scott, P. Cugy, and D. Barbier, Current Opinion in Solid State and Mater. Science 15, 141 (2011).
- A. Saeed-Akbari, A. Schwedt, and W. Bleck, Scripta Mater. 66, 1024 (2012).
- D. Raabe, C. C. Tasan, H. Springer, and M. Bausch, Steel Res. Int. 86, 1127 (2015).

- S. Chen, R. Rana, A. Haldar, and R. K. Ray, Prog. Mater. Sci. 89, 345 (2017).
- I. Gutierrez-Urrutia and D. Raabe, Acta Mater. 60, 5791 (2012).
- I. Gutierrez-Urrutia and D. Raabe, Scripta Mater. 68, 343 (2013)
- I. Gutierrez-Urrutia and D. Raabe, Mater. Sci. Techn. 30, 1099 (2014)
- 10. D. Raabe, H. Springer, I. Gutierrez-Urrutia, F. Roters, M. Bausch, J.B. Seol, M. Koyama, P.P. Choi, and K. Tsuzaki, JOM 66, 1845 (2014)
- J.-B. Seol, D. Raabe, P. Choi, H.-S. Park, J.H. Kwak, and C.-G. Park, Scripta Mater. 68, 348 (2013)
- 12. H. Springer and D. Raabe, Acta Mater. 60, 4950 (2012)
- E. Welsch, D. Ponge, S.M. Hafez Haghighat, S. Sandlöbes, P. Choi, M. Herbig, S. Zaefferer and D. Raabe, Acta Mater. 116, 188 (2016)
- 14. M. J. Yao, P. Dey, J.B. Seol, P. Choi, M. Herbig, R.K.W. Marceau, T. Hickel, J. Neugebauer, and D. Raabe, Acta Mater. 106, 229 (2016)
- M. J. Yao, E. Welsch, D. Ponge, S.M.H. Haghighat, S. Sandlöbes, P. Choi, M. Herbig, I. Bleskov, T. Hickel, M. Lipinska-Chwalek, P. Shanthraj, C. Scheu, S. Zaefferer, B. Gault, and D. Raabe, Acta Mater. 140, 258 (2017)
- 16. Z. Wang, W. Lu, H. Zhao, C.H. Liebscher, J. He, D. Ponge, D. Raabe, and Z. Li, Sci. Adv. 6, eaba9543 (2020)
- 17. H. W. King and M. A. Peters, Can. Metall. Q. 36, 137 (1997).
- F. Trichter, A. Rabinkin, M. Ron, and A. Sharfstein, Scr. Metall. 12, 431 (1978).
- 19. W. Huang, Calphad 13, 243 (1989)
- T. Hickel, S. Sandlöbes, R. K. W. Marceau, A. Dick, I. Bleskov, J. Neugebauer, and D. Raabe, Acta Mater. 75, 147 (2014).
- 21. K. R. Limmer, J. E. Medvedeva, D. C. Van Aken, and N. I. Medvedeva, Comput. Mater. Sci. 99, 253 (2015).
- 22. N. I. Medvedeva, M. S. Park, D. C. Van Aken, and J. E. Medvedeva, J. Alloys Compd. 582, 475 (2014).
- 23. T. Gebhardt, D. Music, B. Hallstedt, M. Ekholm, I. A. Abrikosov, L. Vitos, and J. M. Schneider, J. Phys.: Condens. Matter. 22, 295402 (2010).

- 24. T. Hickel, A. Dick, B. Grabowski, F. Körmann, and J. Neugebauer, Steel Res. Int. 80, 4 (2009).
- 25. T.A Timmerscheidt and R. Dronskowski, Steel Res. Int. 88, 1600292 (2017).
- A. Georges, G. Kotliar W. Krauth and M. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. 68, 13 (1996)
- 27. J. Hubbard, Phys. Rev. B 19, 2626 (1979).
- 28. H. Hasegawa, J. Phys. Soc. Jpn 46, 1504 (1979).
- 29. B. L. Gyorffy, A. J. Pindor, J. Staunton, G. M. Stocks, and H. Winter, J. Phys. F 15, 1337 (1985).
- 30. P. Steneteg, B. Alling, and I. A. Abrikosov, Phys. Rev. B 85, 144404 (2012).
- 31. A. V. Ponomareva, Yu. N. Gornostyrev and I. A. Abrikosov, Phys. Rev. B 90, 014439 (2014).
- 32. A. V. Ponomareva, B. O. Mukhamedov, and I. A. Abrikosov, Phys. Rev. Mater. 4, 024401 (2020)
- 33. B. Alling, T. Marten, and I. A. Abrikosov, Phys. Rev. B 82, 184430, (2010)
- 34. A. Zunger, S.-H. Wei, L. G. Ferreira, and J. E. Bernard, Phys. Rev. Lett. 65, 353 (1990).
- 35. D. J. Dyson and B. Holmes, J. Iron Steel Inst. 208, 469 (1970)
- 36. J. Charles, A. Berghezan, and A. Lutts, J. de Phys. Coll. 45, 619 (1984)
- 37. G. de Andres, F.G. Caballero, C. Capdevila, and H. Bhadeshia, Scripta Mater. 39, 791 (1998).

- G. Kresse and J. Furthmüller, Comput. Mater. Sci. 6, 15 (1996).
- 39. G. Kresse and J. Joubert, Phys. Rev. B 59, 1758 (1999).
- 40. P.E. Blöchl, Phys. Rev. B 50, 17953 (1994).
- 41. M. Methfessel and A.T. Paxton, Phys. Rev. B 40, 3616, (1989).
- 42. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, Phys. Rev. B 13, 5188 (1976).
- 43. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996).
- 44. H. Hellmann, *Einführung in die Quantumchemie*, Leipzig (1937).
- 45. R.P. Feynman, Phys. Rev. 56, 340 (1939).
- 46. A.V. Ruban, M. I. Katsnelson, W. Olovsson, S. I. Simak, and I. A. Arioso, Phys. Rev. B 71, 054402 (2005).
- 47. M. Hillert and M. Jarl, Met. Trans. 6A, 553 (1975).
- 48. T. Wada, H. Wada, J. F. Elliott, and J.S. Chipman, Metallurgical Transactions 3 1657 (1972).
- 49. K. Oda, H. Fujimura, and H. Ino, J. Phys. Condens. Mat. 6, 679 (1994).
- K. Habib, M. Koyama, and H. Noguchi, Internat. J. Fatigue 99, 1 (2017).
- **51**. М. И. Темкин, Л. А. Шварцман, ЖХФ **6**, 755 (1949).

К. Б. Циберкин*

Пермский государственный национальный исследовательский университет 614990, Пермь, Россия

> Поступила в редакцию 3 июля 2022 г., после переработки 3 июля 2022 г. Принята к публикации 19 июля 2022 г.

Представлен подход к расчёту энергетического спектра однослойной углеродной нанооболочки — однослойной и многослойной сферы — на основе применения модели Хаббарда и приближения сплошной среды с учетом возможности осаждения на поверхности углерода примесных атомов. Реализуется дискретный спектр уровней энергии в пределе бесконечного радиуса кривизны оболочки, отвечающий структуре энергетических уровней графена. Присутствие на поверхности углерода примесных ионов в высокой концентрации приводит к возникновению запрещенной зоны шириной до нескольких электронвольт. Кулоновское отталкивание электронов на узлах решетки усиливает этот эффект и определяет асимметрию ветвей спектра. В оптическом спектре излучения формируются полосы поглощения в видимой и ультрафиолетовой областях спектра, разделенные широкими интервалами с относительно малым количеством разрешенных переходов. Качественно полученные результаты согласуются с известными данными по спектроскопии фуллеренов С₆₀ и С₇₀, а также их теоретическими моделями.

DOI: 10.31857/S0044451022120161 **EDN:** LEUQUQ

1. ВВЕДЕНИЕ

Технологии, основанные на использовании углеродных наноматериалов, продолжают интенсивно развиваться благодаря перспективности их электрических и электронных свойств, а также многообразию возможных углеродных наноструктур, открывающих возможности их использования в широком спектре приложений [1–3]. Среди модификаций углерода особое место занимают однослойные и многослойные замкнутые структуры — фуллерены различной размерности и сферические углеродные оболочки диаметром порядка нескольких нанометров [1, 4–7]. Рисунок 1 показывает типичную структуру массива таких сферических оболочек. Техника синтеза, элементный анализ и результаты измерений ряда макроскопических свойств исследуемого в настоящей работе композита представлены в рабо- $\max[5, 6].$

Сравнительная простота синтеза и функционализации (осаждения на поверхности атомов других химических элементов) углерода делает эти материалы удобным объектом для экспериментов в области создания быстрых электронных устройств [7, 8], а также накопителей энергии [9–11]. Например, при функционализации углеродных сфер элементами типа водорода, азота или фтора происходит увеличение удельного электросопротивления и ширины запрещенной зоны [3,12–15], что в перспективе позволит контролируемым образом создавать полупроводниковые или диэлектрические композиты.

Для построения цельной картины электронных характеристик углеродной оболочки и возможности надежного предсказания свойств синтезируемых на их основе композитов необходимо знание ключевых особенностей их энергетического спектра и разрешенных переходов между различными состояниями. В работах [16–18] представлен подробный анализ для фуллеренов фиксированной размерности, что не в полной мере отвечает задачам синтеза нанооболочек. Хотя характерный средний размер оболочек успешно контролируется в процессе синтеза, он, как и число образующихся атомов углерода, в целом случайный [5]. Это определяет необходимость

É-mail: kbtsiberkin@psu.ru

построения легко масштабируемой и усредняемой модели для описания энергетического спектра углеродной сферы и определяющих их макроскопических характеристик материала.

В настоящей работе представлен один из возможных подходов к решению сформулированной выше проблемы. Реализовано построение квантовомеханической модели на основе решеточного гамильтониана Хаббарда с усреднением в приближении сплошной среды. Ввиду большого радиуса оболочек относительно длины связей С-С в качестве базовой модели используется гамильтониан идеального графена. Рассчитаны энергетические спектры, качественно подобные энергетическим зонам чистого и функционализированного монослоя углерода. Рост числа состояний по мере увеличения радиуса оболочки и числа формирующих ее узлов приводит к уменьшению расстояния между уровнями, тогда как положение характерных точек спектра не изменяется. Продемонстрировано формирование «запрещенной зоны» в спектре материала при осаждении примеси.

2. МОДЕЛЬ ХАББАРДА ДЛЯ УГЛЕРОДНОЙ ОБОЛОЧКИ

В качестве базовой модели углеродного материала принят гамильтониан Хаббарда для монослоя графена [2,3] в приближении ближайших соседей с учетом кулоновского отталкивания при отсутствии внешних полей. Учтена также возможность перехо-



Рис. 1. Фотография массива углеродных сфер на просвечивающем электронном микроскопе

да электронов с узлов решетки углерода на ионы примеси и обратно:

$$H = -t \sum_{j,\delta,\sigma} \left(a^{\dagger}_{j\sigma} b_{j+\delta,\sigma} + b^{\dagger}_{j\sigma} a_{j-\delta,\sigma} \right) + \\ + \frac{U}{2} \sum_{j} \left(n^{a}_{j\sigma} n^{a}_{j,-\sigma} + n^{b}_{j\sigma} n^{b}_{j,-\sigma} \right) - \\ - \Delta \sum_{j,\sigma} \left(a^{\dagger}_{j\sigma} d_{j\sigma} + d^{\dagger}_{j\sigma} a_{j\sigma} + a^{\dagger}_{j\sigma} d_{j\sigma} + a^{\dagger}_{j\sigma} d_{j\sigma} \right), \\ n^{a}_{j\sigma} = a^{\dagger}_{j\sigma} a_{j,-\sigma}, \quad n^{b}_{j\sigma} = b^{\dagger}_{j\sigma} b_{j,-\sigma}, \quad (1)$$

где a, b — операторы уничтожения и рождения электрона со спином σ на узле решетки с номером j, соответственно относящемся к подрешеткам углерода A и B; d, f — операторы уничтожения и рождения, действующие на ионах примеси, присоединенных к подрешеткам A и $B; \delta$ — радиус-вектор по направлению от узла j к ближайшим соседним узлам; n_j — операторы числа электронов на узле j. Алгебра решеточных операторов a, b, d и f задается стандартными антикоммутационными соотношениями для фермиевских операторов:

$$\{X_{j\sigma}, X_{k\sigma'}^{\dagger}\} = \delta_{jk}\delta_{\sigma\sigma'}.$$

Структура монослоя углерода с указанием основных параметров модели (1) схематично показана на рис. 2. Его свойства определяются следующими энергетическими параметрами: t — матричный элемент перехода электрона между двумя узлами решетки, U — энергия кулоновского отталкивания электронов с различными спинами, находящихся на одном узле решетки, Δ – произведение матричного элемента перехода между примесью и узлами решетки и концентрации примеси. Возможность прямого перехода электронов между отдельными примесными атомами исключается. Типичные значе-



Рис. 2. Элемент решетки монослоя углерода и возможные переходы между узлами подрешеток и между решеткой и атомом примеси

ния перечисленных параметров составляют единицы электронвольт [2,16–18]. Без существенных ограничений описанная модель может быть адаптирована и к другим конфигурациям решеток.

Для простейшего учета кулоновских слагаемых используется приближение среднего поля:

$$n_{j\sigma}^{a} \approx \langle n_{\sigma} \rangle a_{j,-\sigma}^{\dagger} a_{j,-\sigma} + \langle n_{-\sigma} \rangle a_{j\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma}$$

где в угловых скобках даны средние значения числа электронов с заданными ориентациями спина на узлах. В отсутствие магнитного поля с высокой степенью точности можно считать, что оба средних в этом выражении равны 1/2.

Для последующего построения использованы эволюционные уравнения Гейзенберга:

$$i\frac{dX}{dt} = [X, H]$$

Благодаря использованию приближения среднего поля все уравнения получаются линейными, а электронные подсистемы с противоположной ориентацией спинов становятся полностью независимыми друг от друга:

$$i\frac{da_{j\sigma}}{dt} = -t\sum_{\delta} b_{j+\delta,\sigma} - \Delta d_{j\sigma} + U \langle n_{-\sigma} \rangle a_{j\sigma},$$

$$i\frac{db_{j\sigma}}{dt} = -t\sum_{\delta} a_{j-\delta,\sigma} - \Delta f_{j\sigma} + U \langle n_{-\sigma} \rangle b_{j\sigma}, \quad (2)$$

$$i\frac{dd_{j\sigma}}{dt} = -\Delta a_{j\sigma}, \quad i\frac{df_{j\sigma}}{dt} = -\Delta b_{j\sigma}.$$

3. ПРИБЛИЖЕНИЕ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ

Система уравнений (2) записана для общего случая, и геометрия конкретной решетки в рамках сделанных ранее приближений определяется только векторами б. Если на регулярной кристаллической решетки для анализа задачи применимо разложение операторов по плоским волнам с периодом решетки [19], то при замыкании структуры в трубку или сферу движение электронов становится финитным по одной или нескольким координатам. Поэтому спектр плоских волн должен быть заменен на набор дискретных волновых функций, симметрия которых отвечает геометрии структуры. С другой стороны, построение базиса волновых функций на дискретной решетке большой размерности является нетривиальной задачей, которая, по-видимому, не имеет аналитического решения в общем случае. В известных работах рассмотрены частные случаи с заранее заданной размерностью [16-18] и обобщение

этих результатов на системы произвольного размера не осуществлялось. В то же время построение теоретической модели углеродной сферы, диаметр которой в ходе синтеза, как правило, является случайным (см. рис. 1), требует простой масштабируемости на различные размерности.

Определенные результаты в этом направлении может дать описание поведения электронов в приближении сплошной среды. Для крупных сферических оболочек (диаметром несколько нм и более) возможно также пренебречь нарушением гексагональной структуры, полагая решетку всюду локально плоской, но с большим радиусом кривизны. Соответственно, решетка по-прежнему содержит две вложенные треугольные подрешетки, свойства которых — вероятность перехода между узлами, кулоновский параметр и координационные числа предполагаются такими же, как у идеального монослоя углерода.

Для перехода к пределу сплошной среды решеточные операторы рассматриваются как непрерывные функции координат:

$$a_{j\sigma} \to a_{\sigma}(\mathbf{r}_j), \ldots$$

Это позволяет использовать разложение в ряд Тейлора в членах уравнений, описывающих переходы на соседние узлы решетки [20]:

$$a_{j+\delta,\sigma} \to a_{\sigma}(\mathbf{r}_{j}+\delta) \approx$$
$$\approx a_{\sigma}(\mathbf{r}_{j}) + \delta \nabla a_{\sigma}(\mathbf{r}_{j}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^{2} a_{\sigma}(\mathbf{r}_{j})}{\partial x^{\mu} \partial x^{\nu}} \delta^{\mu} \delta^{\nu}, \quad (3)$$

здесь по индексам μ , μ , обозначающим компоненты векторов, проводится суммирование.

Подстановка разложения (3) в систему (2) с учетом произвольности ориентации векторов δ в решетке с большим числом узлов дает следующие преобразования сумм операторов:

$$\sum_{\delta} a_{j-\delta,\sigma} \approx Z \left(a_{\sigma}(\mathbf{r}_{j}) + \frac{a_{0}^{2}}{2} \nabla^{2} a_{\sigma}(\mathbf{r}_{j}) \right),$$

$$\sum_{\delta} b_{j+\delta,\sigma} \approx Z \left(b_{\sigma}(\mathbf{r}_{j}) + \frac{a_{0}^{2}}{2} \nabla^{2} b_{\sigma}(\mathbf{r}_{j}) \right),$$
(4)

где a_0 — средняя длина связи между атомами углерода (0.14 нм для монослоя), Z — первое координационное число (в рассматриваемой задаче оно равно трем, см. рис. 2). Выполненное преобразование отвечает приближению изотропной среды и не содержит никакой информации о структуре решетки, кроме Z и длины связи. Градиентное слагаемое при реализованном усреднении исключается. Модификация мо-

дели для учета анизотропии системы требует дополнительного анализа с использованием функции распределения векторов δ , и потенциально может быть описано как возмущение изотропной модели. Такое же преобразование сумм реализуется во всех кристаллических решетках, допускающих преобразование инверсии [19].

В результате уравнения эволюции решеточных операторов (2) в первом приближении аппроксимируются следующей системой уравнений в частных производных:

$$i\frac{da_{\sigma}}{dt} = -tZ\left(1 + \frac{a_0^2}{2}\nabla^2\right)b_{\sigma} - \Delta d_{\sigma} + U\left\langle n_{-\sigma}\right\rangle a_{\sigma},$$

$$i\frac{db_{\sigma}}{dt} = -tZ\left(1 + \frac{a_0^2}{2}\nabla^2\right)a_{\sigma} - \Delta f_{\sigma} + U\left\langle n_{-\sigma}\right\rangle b_{\sigma},$$

$$i\frac{dd_{\sigma}}{dt} = -\Delta a_{\sigma}, \quad i\frac{df_{\sigma}}{dt} = -\Delta b_{\sigma}.$$
(5)

Полученная система по-прежнему является достаточно общей, поскольку не несет информации о конкретной атомной структуре. Используя различные пространственные разложения амплитудных функций, можно получить описания разнообразных систем.

Для сферического монослоя углерода координата электрона определяется полярным ϑ и азимутальным углом ϕ . Поэтому операторы электронных амплитуд в (5) могут быть представлены в виде суммы сферических гармоник $Y_{lm}(\vartheta, \phi)$:

$$a_{\sigma}(\mathbf{r}_{j},t) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} a_{\sigma,lm}(t) Y_{lm}(\vartheta,\phi),$$

$$a_{0}^{2} \nabla^{2} a_{\sigma}(\mathbf{r}_{j},t) = (6)$$

$$- \frac{a_{0}^{2}}{R^{2}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} l(l+1) a_{\sigma,lm}(t) Y_{lm}(\vartheta,\phi),$$

а задача, таким образом, сведена к системе линейных ОДУ:

$$i\frac{da_{\sigma,lm}}{dt} = tZ\left(\frac{a_0^2l(l+1)}{2} - 1\right)b_{\sigma,lm} - \Delta d_{\sigma,lm} + U\langle n_{-\sigma}\rangle a_{\sigma,lm},$$

$$i\frac{db_{\sigma,lm}}{dt} = tZ\left(\frac{a_0^2l(l+1)}{2} - 1\right)a_{\sigma,lm} - (7)$$

$$-\Delta f_{\sigma,lm} + U\langle n_{-\sigma}\rangle b_{\sigma,lm},$$

$$i\frac{dd_{\sigma,lm}}{dt} = -\Delta a_{\sigma,lm}, \quad i\frac{df_{\sigma,lm}}{dt} = -\Delta b_{\sigma,lm}.$$

Собственные частоты ее решений определяют энергетический спектр электронов в углеродной оболочке.

4. РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА

Непосредственное нахождение корней характеристического уравнения системы (7) дает следующие энергетические уровни электронов в углеродной сфере:

$$E_{l,\sigma} = \frac{1}{2} \left(U \left\langle n_{-\sigma} \right\rangle \pm \gamma \right) \pm \\ \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(U \left\langle n_{-\sigma} \right\rangle \pm \gamma \right)^2 + 4\Delta^2}, \qquad (8)$$
$$\gamma = tZ \left(1 - \frac{a_0^2 l(l+1)}{2} \right),$$

где знаки \pm внутри скобок и между слагаемыми могут принимать различные значения независимо друг от друга (всего имеются четыре значения энергии для каждого значения l и σ). Уровни энергии двукратно вырождены по спиновой переменной σ (при отсутствии магнитного поля) и 2l + 1-кратно — по азимутальному квантовому числу m.

В пределе отсутствия примеси спектр (8) приобретает простой вид:

$$E_{l,\sigma} = \pm \gamma = \pm tZ \left(1 - \frac{a_0^2 l(l+1)}{2} \right). \tag{9}$$

Число атомов N, составляющих сферу, конечно, и поэтому орбитальное квантовое число l ограничено сверху значением L_{max} . Решетка, составляющая сферу, содержит приблизительно N/2 элементарных ячеек, откуда следует, что каждый электрон может пребывать в одном из N/2 состояний. С другой стороны, набор сферических гармоник с l, изменяющимся от нуля до l_{max} , определяет $(l_{max} + 1)^2$ состояний. Сопоставляя эти значения, можно оценить предельное значение l как

$$l_{max} \approx \sqrt{\frac{N}{2}} - 1.$$

Оценить N возможно из соотношения средней длины связи a_0 и радиуса сферы R. С учетом средней площади элементарной ячейки S_0 оно составляет

 $N\approx 2\frac{4\pi R^2}{S_0}\approx \frac{32R^2}{3a_0^2},$

откуда

$$l_m ax \approx \sqrt{\frac{16}{3}} \frac{R}{a_0} - 1.$$
 (10)

Для синтезируемых в экспериментах нанооболочек с преобладающим радиусом 2–3 нм число узлов составляет $N \approx 9 \cdot 10^2 - 2 \cdot 10^3$ и соответствующее $l_{max} \approx 29$ –45. С увеличением размера оболочки оба параметра быстро возрастают.

Для получения конкретных численных результатов приняты приближенные значения параметров $t \approx 3$ эВ и $\Delta \approx 5\rho$ эВ, где плотность примеси ρ варьируется от нуля до единицы и задает среднее число примесных атомов, приходящихся на узел основной решетки. На рис. 3 показаны спектры энергии (8), соответствующие различным l, ρ и U. Тесно расположенные уровни фактически образуют четыре энергетические зоны. При отсутствии примесных ионов и их низкой концентрации отдельные ветви спектра сливаются (рис. 3σ), а при высокой концентрации примесн (рис. 3σ) формируется запрещенная зона, ширина которой пропорциональна Δ и может достигать единиц электронвольт.

Заметной особенностью вычисленных спектров является их самоподобие относительно *l*. При увеличении l_{max} возрастает только плотность уровней, но структура энергетических зон не изменяется. Асимметрия ветвей спектра на рис. За, б обусловлена кулоновским отталкиванием. В пренебрежении им реализуется симметричный спектр, который при отсутствии примеси (рис. 36) качественно совпадает со спектром графена. Наблюдается также реализация аналога точки Дирака [2]. Внедрение примесных ионов даже в малой концентрации приведет к появлению примесного уровня между основными энергетическими зонами. Рост ρ обеспечивает расщепление этого уровня на два сперва в окрестности аналога точки Дирака, а затем и при других значениях *l*. Высокая концентрация примеси приводит к формированию запрещенной зоны (рис. 3г), как и при учете кулоновской энергии (рис. 36).

5. МОДЕЛЬ ОПТИЧЕСКОГО СПЕКТРА

Полученные спектры позволяют найти разрешенные переходы электронов под влиянием внешних возмущений и вычислить соответствующие им частоты. В качестве примера ниже рассмотрены дипольные переходы в поле плоской электромагнитной волны:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = E_0 \operatorname{Re}\left(e^{i(kz-\omega t)}\right)$$

Матричные элементы переходов под влиянием такого поля в дипольном приближении равны

$$\langle f | \mathbf{E} | i \rangle = \frac{eE_0}{2} \langle f | \cos \vartheta | i \rangle,$$

где соз ϑ задает *z*-координату электрона на поверхности оболочки. Условия ортогональности сферических гармоник, по которым раскладываются волновые функции (6), определяют правила отбора для разрешенных переходов: $\Delta l = \pm 1$.

Следуя этому результату, легко найти частоты разрешенных переходов и ожидаемые линии поглощения в спектре сферической углеродной оболочки. Они показаны на рис. 4 для двух значений концентрации примесных ионов. Наличие запрещенной зоны приводит к формированию широких полос поглощения, положения которых смещаются в ультрафиолетовую область спектра по мере увеличения концентрации примеси. В частности, на рис. 46 они локализованы вблизи длин волн около 300 и 150 нм. Рост ширины запрещенной зоны, связанный с увеличением энергии перехода на примесные атомы или кулоновского отталкивания, может привести к формированию полосы ослабленного поглощения между двумя пиками вплоть до полной прозрачности (рис. 4*в*,*г*).

Все показанные частоты отвечают осесимметричным волновым функциям электронов, что обусловлено структурой рассматриваемого возмущения и отсутствием магнитного поля. Здесь также не учитывается возможность запретов на переходы между состояниями с различной пространственной симметрией. В то же время полученные спектры энергетических уровней и частот переходов качественно отвечают известным теоретическим и экспериментальным результатам для фуллеренов типа C₆₀, C₇₀, у которых наблюдаются характерные полосы поглощения в ультрафиолетовой области [1,21].

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлено применение предела сплошной среды в модели Хаббарда для описания электронного спектра сферической оболочки большого радиуса, состоящей из монослоя углерода и содержащей на поверхности ионы примеси. В приближении сплошной среды энергетический спектр углеродного монослоя, замкнутого в сферическую оболочку, сохраняет основные фундаментальные особенности, характерные для графита и графена. Благодаря совместному влиянию примесных ионов и кулоновского отталкивания электронов на узлах решетки происходит формирование запрещенной зоны в энергетическом спектре. Рассчитаны также длины волн разрешенных переходов. Структура спектра поглощения электромагнитного поля в дипольном приближении включает широкиеполосы поглощения, характерные для спектров фуллеренов. Увеличение ширины запрещенной зоны приводит к разделению пиков поглощения полосами прозрачности материала.



Рис. 3. Рассчитанные энергетические спектры для однослойной углеродной оболочки радиусом 20a₀ при значении кулоновского отталкивания U = 10 эВ, концентрации примесных ионов: a − ρ = 0.1, б − ρ = 0.8, а также для системы в отсутствие кулоновского отталкивания при концентрации примеси: в − ρ = 0.1, ε − ρ = 0.8. Орбитальное квантовое число нормировано на предельное значение lmax, определяемое радиусом оболочки; для указанных параметров оно равно 45. На панели в сплошной и штриховой линиями показаны также энергетические спектры, расчитанные по дисперсионному соотношению для чистого графена, при двух различных направлениях импульса электрона



Рис. 4. Длины волн, соответствующие разрешенным по орбитальному квантовому числу переходам для однослойной углеродной оболочки радиусом $R = 20a_0$, при значении кулоновского отталкивания U = 10 эВ и концентрации примесных ионов: $a - \rho = 0.1$; $\delta - \rho = 0.8$. Показан также пример реализации полосы прозрачности в области жесткого ультрафиолетового излучения при высокой энергии перехода на примесный узел $\Delta = 20$ эВ: $e - \rho = 0.1$; $e - \rho = 0.8$

Полученные результаты могут быть верифицированы посредством проведения измерений оптического поглощения взвеси синтезируемых углеродных сфер в жидкой среде. Кроме того, получение сравнительно простой модели энергетического спектра электронов в оболочке открывает возможность теоретического анализа различных равновесных и неравновесных свойств синтезируемого в экспериментах углеродного композита, прежде всего — его проводимости, диэлектрической проницаемости и магнитной восприимчивости.

ЛИТЕРАТУРА

- А. В. Елецкий, Б. М. Смирнов, УФН 165, 977 (1995) [A. V. Eletskii and B. M. Smirnov, Phys Usp 38, 935 (1995)].
- A. H. Castro Neto, F. Guiena, N. M. R. Peres et al., Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009).
- P. Esquinazi, Basic physics of functionalized graphite, Springer, New-York (2016).
- 4. X. Wang, Z. Tan, M. Zeng et al., Sci. Rep. 4, 4437 (2014).
- G. A. Rudakov, K. B. Tsiberkin, R. S. Ponomarev et al. J. Magn. Magn. Mater. 427, 34 (2019).
- A. V. Sosunov, D. A. Ziolkowska, R. S. Ponomarev et al., New. J. Chem. 43, 12892 (2019).
- Q. Wu, L. Yang, X. Wang et al. Adv. Mater. 32, 1904177 (2020).
- J. N. Tiwari, R. N. Tiwari and K. S. Kim, Progr. Mater. Sci. 57, 724 (2012).

- D. Wang, L. Xu, Y. Wang et al., J. Electroanal. Chem. 815, 166 (2018).
- 10. G. Li, L. Xu, Q. Hao et al., RSC Adv. 2, 284 (2012).
- S. Kumar, G. Saeed, L. Zhu et al., Chem. Eng. J. 403, 126352 (2021).
- J. O. Sofo, A. S. Chaudhari, and G. D. Barber, Phys. Rev. B 75, 153401 (2007).
- 13. R. Zhao, R. Jayasingha, A. Shereniy et al., J. Phys. Chem. C 119, 20150 (2015).
- 14. T. Kato, L. Jiao, H. Wang et al. Small 7, 574 (2011).
- А. В. Сосунов, К. Б. Циберкин, В. К. Хеннер, Вестник Пермского университета. Физика 2, 63 (2019)
 [A. .V. Sosunov, K. B. Tsiberkin and V. K. Henner, Bulletin of Perm University. Physics 2, 63 (2019)].
- Γ. И. Миронов, А. И. Мурзашев, ΦΤΤ 53, 2273 (2011) [G. I. Mironov, A. I. Murzashev, Physics of the Solid State 53, 2393 (2011)].
- А. В. Силантьев, Оптика и спектроскопия 124, 159 (2018) [A. V. Silant'ev, Optics and Spectroscopy 124, 155 (2018)].
- А. В. Силантьев, Физика металлов и металловедение 121, 227 (2020) [A. V. Silant'ev, Physics of Metals and Metallography 121, 195 (2020)].
- Ч. Киттель, Квантовая теория твердых тел, Наука, Москва (1967) [Ch. Kittel, Quantum theory of solids, Wiley, New-York (1963)].
- **20**. М. И. Рабинович, Д. И. Трубецков, *Введение в теорию колебаний и волн*, Регулярная и хаотическая динамика, Ижевск (2000).
- 21. H. Ajie, M. M. Alvarez, S. J. Anz et al., J. Phys. Chem. 94, 8630 (1990).

О РЕЗОНАНСНЫХ ВКЛАДАХ В ОСЦИЛЛЯЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ В УСЛОВИЯХ МАГНИТНОГО ПРОБОЯ ПРИ ПЕРЕСТРОЙКАХ ЭЛЕКТРОННОЙ ДИНАМИКИ НА ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ

А. Я. Мальцев а*

^а Математический институт им. В.А. Стеклова Российской академии наук, 119991, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 23 июля 2022 г., после переработки 1 августа 2022 г. Принята к публикации 1 августа 2022 г.

Рассматриваются специальные замкнутые электронные траектории, возникающие при перестройках электронной динамики на поверхности Ферми в присутствии сильных магнитных полей, а также явление внутризонного магнитного пробоя, возникающее на таких траекториях. При этом мы рассматриваем случаи, когда электронный спектр, возникающий в такой ситуации, отвечает резонансному вкладу в квантовые осцилляции. Выделены все случаи, когда такое имеет место, а также рассмотрено возможное влияние появления фазы Берри и других эффектов на описываемые явления.

DOI: 10.31857/S0044451022120173 **EDN:** LEZZWQ

1. ВВЕДЕНИЕ

В данной работе мы обсуждаем особенности, связанные с явлением магнитного пробоя на электронных траекториях, возникающих вблизи перестроек топологической структуры системы

$$\dot{\mathbf{p}} = \frac{e}{c} [\mathbf{v}_{\mathrm{gr}}(\mathbf{p}) \times \mathbf{B}] = \frac{e}{c} [\nabla \epsilon(\mathbf{p}) \times \mathbf{B}] , (1)$$

описывающей динамику электронных состояний в металлах в присутствии внешнего магнитного поля.

Система (1) описывает квазиклассическую динамику электронов в пространстве квазиимпульсов с произвольным законом дисперсии $\epsilon(\mathbf{p})$ (см., например, [1–3]). Поскольку значения \mathbf{p} , различающиеся на векторы обратной решетки, задают одно и то же электронное состояние, пространство квазиимпульсов можно при этом рассматривать либо как трехмерный тор \mathbb{T}^3 , либо как расширенное пространство \mathbb{R}^3 . В последнем случае функция $\epsilon(\mathbf{p})$ представляет собой 3-периодическую функцию в трехмерном пространстве.

Траектории системы (1) в пространстве \mathbb{R}^3 задаются пересечениями плоскостей, ортогональных **В**, с поверхностями $\epsilon(\mathbf{p}) = \text{const.}$ В общем случае, они представляют пересечения 3-периодических поверхностей семейством параллельных плоскостей (рис. 1). Как хорошо известно, при описании электронных явлений в металлах существенным, как правило, является лишь один энергетический уровень, т.е. уровень Ферми $\epsilon(\mathbf{p}) = \epsilon_F$.

Как было показано в работах школы И.М. Лифшица (см., например, [2, 4-6]), геометрия траекторий системы (1) на поверхности Ферми играет очень важную роль в описании гальваномагнитных явлений в металлах в пределе сильных магнитных полей. Общая задача классификации всех возможных типов траекторий системы (1) была поставлена Новиковым в работе [7] и затем интенсивно исследовалась в его топологической школе (см. [8–15]). В настоящий момент можно констатировать, что такая классификация получена для соотношений $\epsilon(\mathbf{p})$ самого общего вида, что позволяет говорить об успешном решении задачи Новикова в общем случае. Можно отметить здесь, что результаты, полученные при исследовании задачи Новикова, также оказываются весьма важными при описании гальваномагнитных явлений в металлах, в частности, их использование позволило ввести важные топологические характеристики, наблюдаемые в проводимости нормальных металлов, а также описать ряд новых режимов поведения проводимости в сильных маг-

^{*} E-mail: maltsev@itp.ac.ru



Рис. 1. Траектории системы (1) в пространстве квазиимпульсов



Рис. 2. Явление магнитного пробоя на траекториях, близких к седловым особым точкам системы (1) на поверхности Ферми

нитных полях, неизвестных до этого (см. [16-21]).

Структура системы (1) на достаточно сложных поверхностях Ферми может быть довольно сложной. В частности, система (1) имеет в общем случае особые точки на поверхности Ферми, представляющие собой локальные минимумы или максимумы, а также седловые особые точки. Здесь нам будут интересны именно седловые особые точки, поскольку именно они связаны с явлением внутризонного магнитного пробоя в достаточно сильных магнитных полях (рис. 2).

Явление внутризонного магнитного пробоя изучено довольно детально (см., например, [22–26]). Нас здесь будут интересовать явления, связанные с квантованием электронных состояний на замкнутых траекториях (1) в условиях пробоя (см. [23–26]). В отличие от наиболее общей задачи, нас будет интересовать явление магнитного пробоя на экстремальных замкнутых траекториях (имеющих максимальную или минимальную площадь по сравнению с близкими к ним траекториям), где соответствующие ему эффекты должны быть выражены наибо-

лее ярко при исследовании квантовых осцилляций. Появление траекторий такого типа, в действительности, связано с перестройками структуры системы (1) на поверхности Ферми при изменении направления магнитного поля, которые мы и будем рассматривать здесь.

2. ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ПЕРЕСТРОЙКИ СТРУКТУРЫ (1) И ЭКСТРЕМАЛЬНЫЕ ТРАЕКТОРИИ

Как мы уже говорили, структура системы (1) на достаточно сложных поверхностях Ферми может быть довольно сложной. В общем случае на поверхности Ферми могут присутствовать как замкнутые, так и открытые траектории системы (1). Вместе с тем, как следует из анализа задачи Новикова, знание полного множества замкнутых траекторий на поверхности Ферми позволяет определить тип также и возникающих на ней открытых траекторий и дать достаточно полное их описание. Информацию о возникновении различных типов траекторий при различных направлениях В удобнее всего представлять на угловой диаграмме (единичной сфере \mathbb{S}^2), указывая для каждого направления В тип траекторий, возникающих на поверхности Ферми. Прежде всего при этом удобно выделить области на \mathbb{S}^2 , отвечающие наличию лишь замкнутых траекторий на поверхности Ферми. Дополнение к таким областям отвечает появлению на поверхности Ферми открытых траекторий (различных типов). Можно отметить здесь, что для реальных дисперсионных соотношений области появления лишь замкнутых траекторий на поверхности Ферми занимают, как правило, большую часть площади на угловой диаграмме.

Для направлений **B** общего положения никакие две особые точки на поверхности Ферми не соединяются (сингулярными) траекториями системы (1). При вращениях направления **B**, не нарушающих это условие, структура траекторий системы (1) на поверхности Ферми не меняется существенным образом. Ситуации, когда такое соединение происходит, можно называть моментами перестройки структуры системы (1) на поверхности Ферми, и они возникают лишь при специальных направлениях **B**.

При перестройках структуры системы (1) общего положение происходит соединение ровно двух седловых особых точек сингулярными траекториями. Нас здесь будут интересовать «элементарные» перестройки системы (1), при которых все траектории, выходящие из соединяемых особых точек, являют-



Рис. 3. Моменты «элементарных» перестроек топологической структуры системы (1) на поверхности Ферми

ся замкнутыми. Такие перестройки происходят, в частности, при направлениях **B**, лежащих в областях существования лишь замкнутых траекторий на поверхности Ферми. В момент элементарной перестройки в плоскости, ортогональной **B**, должна при этом возникать одна из ситуаций, изображенных на рис. 3. Здесь мы везде будем предполать, что направление оси z совпадает с направлением магнитного поля.

Перестройки топологической структуры системы (1) при вращениях направления магнитного поля происходят на поверхностях Ферми почти всех металлов. Исключение составляют, пожалуй, только щелочные металлы, обладающие очень простыми поверхностями Ферми (близкими к сферической). В частности, если при некоторых направлениях **B** на поверхности Ферми имеются незамкнутые траектории, то при приближении к таким направлениям из зоны замкнутых траекторий должно произойти бесконечное число элементарных перестроек структуры системы (1).

Каждая из структур, изображенных на рис. 3, является устойчивой по отношению к малым вращениям **B** в плоскости, ортогональной отрезку, соединяющему седловые особые точки, и разрушается при других вращениях **B**. Каждой из возникающих перестроек на заданной поверхности Ферми соответствует, таким образом, некоторая одномерная линия на угловой диаграмме, вдоль которой наблюдается именно заданный тип перестройки. Можно ска-



Рис. 4. Сеть линий на угловой диаграмме, отвечающая перестройкам структуры системы (1) на поверхности Ферми (схематично)

зать при этом, что топологические структуры системы (1) по разные стороны от такой линии различаются именно элементарной перестройкой заданного типа. Линии, отвечающие элементарным перестройкам всех типов для достаточно сложных поверхностей Ферми, образуют, как правило, довольно сложную сеть в области существования лишь замкнутых траекторий на поверхности Ферми (рис. 4), которая бесконечно сгущается при приближении к направлениям существования открытых траекторий на поверхности Ферми (см., например, [27]). Кроме того, элементарные перестройки структуры системы (1) могут происходить также и при наличии открытых траекторий на поверхности Ферми.

Каждая из элементарных перестроек меняет структуру траекторий (1) лишь на определенном участке поверхности Ферми, не затрагивая других (неэквивалентных данному) участков. Для описания соответствующей перестройки, кроме картины, описывающей соединение особых точек сингулярными траекторими (рис. 3), необходимо указать еще, являются ли векторы $\nabla \epsilon(\mathbf{p})$ сонаправленными, или направленными противоположно друг другу, в рассматриваемой паре седел. На рис. 5, 6 изображены перестройки, отвечающие ситуации, представленной на рис. 3*a*, с направленными противоположно друг другу (рис. 5) и сонаправленными (рис. 6) векторами $\nabla \epsilon(\mathbf{p})$ в седловых особых точках.

Можно видеть, что каждая элементарная перестройка структуры системы (1) представляет собой исчезновение цилиндра малой высоты, образованного замкнутыми траекториями (1), и замену его цилиндром другого типа. Замкнутые траектории, находящиеся на таких цилиндрах малой высоты (до





Рис. 5. Элементарная перестройка структуры системы (1) на поверхности Ферми, отвечающая случаю рис. За с направленными противоположно друг другу векторами $\nabla \epsilon(\mathbf{p})$ в седловых особых точках. Показаны также экстремальные траектории на цилиндрах малой высоты, до и после перестройки (цветом обозначены участки, близко подходящие к особым точкам системы (1))

и после перестройки), отличаются тем, что на них всегда имеются участки, подходящие близко к седловым особым точкам системы (1). Особые точки системы (1) всегда присутствуют на обоих основаниях цилиндра малой высоты, что вызывает неограниченное увеличение периода обращения по замкнутым траекториям при приближении как к нижнему, так и к верхнему основанию. Как следствие этого, на каждом цилиндре малой высоты (как до, так и после перестройки) всегда присутствуют траектории, обладающие наименьшим периодом обращения на цилиндре. Резкое изменение геометрии таких траекторий при перестройке структуры (1) приводит к резкому изменению общей картины классических осцилляций в металле (циклотронный резонанс) в присутствии сильных магнитных полей, что позволяет, в частности, отслеживать такие перестройки при изменении направления В (см., например, [27]). При чрезвычайно близком приближении к моменту перестройки (и достаточно больших значениях *B*) на траекториях такого типа должен возникать внут-

Рис. 6. Элементарная перестройка структуры системы (1) на поверхности Ферми, отвечающая случаю рис. За с сонаправленными векторами $\nabla \epsilon(\mathbf{p})$ в седловых особых точках. Показаны также траектории с минимальными периодами обращения на цилиндрах малой высоты, до и после перестройки

ризонный магнитный пробой, обусловленный близостью к седловым особым точкам системы (1). Можно видеть, что магнитный пробой должен «смазывать» картину классических осцилляций в описываемой ситуации. Можно отметить также, что для наблюдения этого эффекта вблизи момента перестройки необходима весьма высокая точность при постановке эксперимента.

Резонансные вклады в квантовые осцилляции, как хорошо известно, проистекают от замкнутых траекторий, обладающих экстремальной площадью по сравнению с близкими к ним траекториями. Нетрудно видеть, что площадь замкнутых траекторий остается конечной на цилиндрах малой высоты, при этом, однако, ее производная по высоте обращается в бесконечность на основаниях цилиндров. Траектории экстремальной площади при этом присутствуют не на всех цилиндрах малой высоты. Так, можно видеть, что для перестройки, изображенной на рис. 5, такие траектории присутствуют как до перестройки (траектории минимальной площади), так и после нее (траектории максимальной площади).

Для перестройки, изображенной на рис. 6, напротив, траектории экстремальной площади отсутствуют на соответствующих цилиндрах малой высоты по обе стороны от перестройки. В действительности, это соответствует общему правилу для элементарных перестроек, а именно, траектории экстремальной площади присутствуют (по обе стороны от перестройки) для перестроек, отвечающих противоположно направленным векторам $\nabla \epsilon(\mathbf{p})$ в седловых особых точках, и отсутствуют при сонаправленных векторах $\nabla \epsilon(\mathbf{p})$. В частности, именно перестройкам первого типа соответствуют резкие изменение резонансных вкладов в квантовые осцилляции, в то время как изменения резонансных членов в классических осцилляциях свойственны перестройкам обоих типов (см. [28]).

Общее рассмотрение квантования электронных уровней в условиях магнитного пробоя (см. [23–26]) дает картину таких уровней при энергиях, близких к уровню появления сингулярной траектории при соответствующем значении p_z . В нашем случае рассматривается совокупность всех значений p_z вблизи появления сингулярных траекторий при заданном уровне Ферми. Как легко видеть, сингулярные траектории возникают здесь лишь при изолированных значениях p_z , вблизи которых траектории распадаются на регулярные. При этом, как мы уже сказали, нам хотелось бы выделить траектории, дающие резонансные члены в картину квантовых осцилляций вблизи перестроек структуры системы (1).

Нетрудно видеть, что для сингулярных траекторий с сонаправленными векторами $\nabla \epsilon(\mathbf{p})$ в особых точках сдвиг значения p_z в одну или другую сторону дает траектории, аналогичные возникающим на уровнях $\epsilon < \epsilon_F$ или $\epsilon > \epsilon_F$ при том же значении p_z . Все такие траектории дают одновременно вклад в картину квантовых осцилляций, что совершенно «размазывает» квантованные значения энергии и лишает возможности наблюдать квантовый электронный спектр вблизи особых траекторий в этом случае. Можно также отметить, что участок поверхности Ферми, близкий к сингулярной траектории с сонаправленными векторами $\nabla \epsilon(\mathbf{p})$ в особых точках, не может обладать свойствами центральной симметрии.

Для сингулярных траекторий с противоположно направленными векторами $\nabla \epsilon(\mathbf{p})$ в седловых особых точках сдвиг значения p_z в одну или другую сторону не дает картины, аналогичной изменению уровня энергии, а приводит к появлению регулярных траекторий другой геометрии. В этом случае, однако, малые вращения направления **В** дают картину, анало-



Рис. 7. Резонансная и нерезонансные траектории с одной стороны от перестройки, приведенной на рис. 5, принимающие участие в формировании электронных уровней в условиях магнитного пробоя

гичную возникающей на уровнях $\epsilon < \epsilon_F$ или $\epsilon > \epsilon_F$ по разные стороны от «линии перестройки» системы (1) на угловой диаграмме. Существование траекторий экстремальной площади вблизи «линии перестройки» могло бы быть при этом указанием на возможность экспериментального наблюдения их резонансных вкладов в квантовые осцилляции в условиях магнитного пробоя. Здесь, однако, надо сразу отметить два обстоятельства. Первое обстоятельство состоит в том, что в условиях магнитного пробоя в формировании электронного спектра принимают участие, вообще говоря, не только траектории экстремальной площади (см., например, рис. 7, где показаны траектории, участвующие в формировании электронного спектра по одну сторону от перестройки, приведенной на рис. 5). Второе обстоятельство (см. [23-26]) состоит в том, что кроме набега фазы при движении по траектории в формировании электронного спектра играют роль матрицы перехода, сшивающие квазиклассические решения на разных траекториях вблизи особых точек (закрашенные области на рис. 5, 6, 7). В общем случае матрицы перехода при этом не обладают специальными стационарными свойствами при изменении значения p_z . Можно видеть, таким образом, что описание картины квантовых осцилляций требует здесь специального рассмотрения.

Отметим сразу, что при рассмотрении электронного спектра в описанной ситуации основную роль играет наличие центральной симметрии участка поверхности Ферми вблизи сингулярной траектории, отвечающей за перестройку заданного типа. Нетрудно видеть, что из траекторий, представленных на рис. 3, только траектории a, c и f (с противоположно направленными векторами $\nabla \epsilon(\mathbf{p})$ в особых точках) могут задавать перестройки, обладающие



Рис. 8. Центрально-симметричная перестройка, отвечающая сингулярной траектории рис. 3с. Закрашены цилиндры замкнутых траекторий малой высоты, а также приведены резонансные и нерезонансные траектории, участвующие в формировании электронного спектра по разные стороны от перестройки

центральной симметрией. Можно также отметить, что перестройки, обладающие центральной симметрией, должны, в действительности, встречаться чаще перестроек, не обладающих такой симметрией. Действительно, любые перестройки, не обладающие центральной симметрией, должны встречаться парами на центрально-симметричной поверхности Ферми, что требует ее достаточной сложности.

Рассмотрим теперь подробнее перестройку, отвечающую траектории рис. 3a (т.е. перестройку, представленную на рис. 5), предполагая, что она обладает центральной симметрией. Если рассматривать рис. 7, в отсутствие магнитного пробоя (что отвечает достаточному удалению по энергии от ϵ_F на линии перестройки или отклонению направления **B** от этой линии при заданном ϵ_F), электронный спектр, отвечающий представленной картине, имеет довольно простое описание. А именно, спектр, определяемый центральным сечением поверхности Ферми, задается двумя ветвями $\epsilon_{n_1}^{(1)}$ и $\epsilon_{n_2}^{(2)}$:

$$S_1(\epsilon_{n_1}^{(1)}) = \frac{2\pi e\hbar B}{c} \left(n_1 + \frac{1}{2}\right) , \quad n_1 \gg 1 ,$$



Рис. 9. Центрально-симметричная перестройка, отвечающая сингулярной траектории рис. 3f. Закрашены цилиндры замкнутых траекторий малой высоты, а также приведены траектории, участвующие в формировании электронного спектра по разные стороны от перестройки (все траектории являются «резонансными», т.е. имеют экстремальную площадь по сравнению с близкими траекториями)

$$S_2(\epsilon_{n_2}^{(2)}) = \frac{2\pi e\hbar B}{c} \left(n_2 + \frac{1}{2}\right) , \quad n_2 \gg 1 ,$$

вторая из которых двукратно вырождена.

Формально говоря, вторая часть спектра отвечает симметричной и антисимметричной волновым функциям, локализованным на нерезонансных траекториях. Однако при исчезающе слабом магнитном пробое разница между энергиями таких состояний настолько мала, что они перестают быть правильными состояниями уже при ничтожно малых стдвигах p_z , приводящих к волновым функциям, локализованным на каждой из траекторий по отдельности. Таким образом, для близких сечений спектр задается тремя ветвями, при этом спектры для сдвигов Δp_z и $-\Delta p_z$ совпадают друг с другом. При преобразовании $\mathbf{p} \to -\mathbf{p}$, однако, лишь одна ветвь спектра (отвечающая функциям, локализованным на резонансной траектории) переходит в себя, в то время как две другие меняются местами. Как следствие, лишь часть собственных значений спектра является стационарной при малых сдвигах значения p_z , в то время как другие не дают резонансного вклада в квантовые осцилляции в указанном пределе.





Рис. 10. Перестройка, отвечающая структуре рис. 3*b* с направленными противоположно друг другу векторами $abla \epsilon(\mathbf{p})$ в особых точках

При появлении магнитного пробоя, однако, спектр, отвечающий центральному сечению $(p_z = 0)$, становится невырожденным и остается таковым при достаточно близких значениях p_z . Все электронные состояния теперь переходят в себя при преобразовании $\mathbf{p} \to -\mathbf{p}$, и, как следствие, все точки спектра являются стационарными при малых сдвигах значения p_z . Можно видеть, таким образом, что в этом случае центральное сечение обладает некоторой окрестностью, дающей резонансный вклад в квантовые осцилляции для всех точек возникающего спектра.

Спектр, формирующийся в результате магнитного пробоя, можно наблюдать, в частности, при очень точном помещении направления **B** на линию перестройки структуры системы (1), где сингулярная траектория рис. 3a возникает на поверхности Ферми. Сдвиг направления **B** в одну или другую сторону от линии перехода, как мы уже говорили, дает картину, аналогичную сдвигу энергии вниз или вверх от энергии Ферми. Все квантовые уровни остаются стационарными (при сдвигах p_z) также и при переходе к траекториям, изображенным на нижней картинке рис. 5, где они дают резонансный вклад в осцилляции и при исчезновении магнитного пробоя.

Рис. 11. Перестройка, отвечающая структуре рис. 3d с направленными противоположно друг другу векторами $\nabla \epsilon(\mathbf{p})$ в особых точках

Здесь можно также отметить, что, как показывает общий анализ, центрально-симметричная перестройка, представленная на рис. 5, является наиболее распространенной на поверхностях Ферми достаточно общей формы.

Нетрудно видеть, что аналогичная ситуация возникает также в случае центрально-симметричной перестройки, отвечающей траектории, приведенной на рис. 3*c* (рис. 8). Как и в предыдущем случае, здесь часть траекторий, участвующих в формировании спектра, не являются экстремальными. Таким образом, часть спектра исчезает из резонансного вклада в квантовые осцилляции в пределе исчезающего магнитного пробоя (с одной из сторон от перестройки, либо от уровня Ферми). В наиболее интересном интервале, однако, также можно наблюдать полный спектр электронных состояний среди резонансных членов. Отличия от предыдущего случая заключаются здесь лишь в деталях электронного спектра в режиме развитого магнитного пробоя.

Центрально-симметричная перестройка, отвечающая траектории, приведенной на рис. 3f (траектория типа «бабочки»), несколько отличается от двух перестроек, приведенных выше (см. рис. 9). Можно видеть, что все траектории, принимающие уча-



Рис. 12. Перестройка, отвечающая структуре рис. 3e с направленными противоположно друг другу векторами $abla \epsilon(\mathbf{p})$ в особых точках

стие в формировании спектра, являются здесь резонансными по обе стороны от перестройки, поэтому все точки электронного спектра дают резонансные вклады в квантовые осцилляции во всем интевале энергий. Квантовый спектр, отвечающий траектории рис. 3f был рассмотрен в работе [26] и имеет «квазислучайный» вид. Такой же тип спектра следует, в действительности, ожидать и в описанных нами выше других двух случаях, отвечающих наличию резонансных вкладов в осцилляции в случае развитого магнитного пробоя. Отличие этих случаев, как мы уже сказали выше, состоит в том, что в них лишь часть возникающего спектра отвечает резонансным вкладам в осцилляции во всем рассматриваемом нами интервале энергий.

Что касается перестроек, не обладающих центральной симметрией (см. рис. 10–12), то, в силу сказанного нами ранее, квантовые уровни, возникающие здесь в режиме развитого пробоя, не обладают свойствами стационарности по отношению к малым вариациям значения p_z . Таким образом, резонансные вклады в квантовые осцилляции возникают лишь от экстремальных траекторий в режиме исчезающего магнитного пробоя. Отметим, однако, что интервал наблюдения развитого магнитного пробоя в описанных ситуациях является довольно узким. В частности, он отвечает довольно малым допустимым отклонениям направления **B** от линии перестройки на угловой диаграмме, и наблюдение резонансных вкладов в осцилляции позволяет, в действительности, определить положение линий перестройки с весьма хорошей точностью при исследовании геометрии поверхности Ферми (см., например, [27]).

Нам хотелось бы также упомянуть здесь о влиянии таких эффектов, как появление ненулевой кривизны Берри (см., например, [29, 30] и приводимые там ссылки) на описанную выше картину. Наличие ненулевой кривизны Берри, как хорошо известно, не позволяет выбрать блоховские функции таким образом, чтобы избежать учета фазы Берри при движении электрона по квазиклассической траектории. Вместе с тем, учет фазы Берри весьма существенно влияет на квантование уровней на замкнутых траекториях системы (1) как в отсутствие магнитного пробоя, так и при его наличии (см. [25, 26] и приводимые там ссылки). Отметим здесь, что при наличии кривизны Берри система (1) несколько модифицируется, однако, траектории электронов в р-пространстве в присутствии внешнего магнитного поля также задаются при этом пересечениями плоскостей, ортогональных В, с поверхностями постоянной энергии. В нашем случае важную роль играет появление фазы Берри при движении по траектории между участками сближения траектории с самой собой.

Нас здесь будет интересовать ситуация, когда наличие фазы Берри не разрушает резонанстности вклада рассматриваемой нами траектории при наличии магнитного пробоя. Как мы уже видели выше, резонансность такого вклада обусловлена наличием центральной симметрии соответствующих перестроек, поэтому мы должны потребовать также наличие такой симметрии и от добавок к фазе волновых функций за счет фазы Берри (при правильном выборе базиса блоховских функций вблизи рассматриваемой траектории).

Возникновение ненулевой кривизны Берри на поверхности Ферми обусловлено, как правило, либо нарушением симметрии по отношению к обращению времени, либо отсутствим центральной симметрии у решетки кристалла. Как также хорошо известно, сииметрийные свойства кривизны Берри на поверхности Ферми отличаются друг от друга в этих двух ситуациях. В частности, при наличии центральной симметрии у решетки кристалла кривизна Берри $\Omega(\mathbf{p})$ удовлетворяет условию $\Omega(\mathbf{p}) = \Omega(-\mathbf{p})$. Кро-

О резонансных вкладах в осцилляционные явления...

ме того, при естественном выборе базиса блоховских функций ($\psi_{-\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \psi_{\mathbf{p}}(-\mathbf{x})$), значения фазы Берри на двух ориентированных кривых, переходящих друг в друга при преобразовании $\mathbf{p} \to -\mathbf{p}$, в этом случае совпадают. Можно видеть, таким образом, что случай, когда резонансные свойства спектра, возникающего в описанных выше ситуациях, не разрушаются присутствием фазы Берри, соответствует именно наличию у кристалла центра инверсии.

Для сравнения, при наличии симметрии по отношению к обращению времени кривизна Берри обладает свойством $\Omega(-\mathbf{p}) = -\Omega(\mathbf{p})$. При естественном выборе базиса блоховских волновых функций $(\psi_{-\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \bar{\psi}_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}))$ значения фазы Берри на двух ориентированных кривых, переходящих друг в другв при преобразовании $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$, в этом случае противоположны друг другу. Можно видеть, таким образом, что при наличии симметрии по отношению к обращению времени (и при отсутствии у кристалла центра инверсии) наличие фазы Берри разрушает резонансные свойства спектра, возникающего на резонансных траекториях, описанных выше. Данное обстоятельство должно, таким образом, приводить к размытию спектра, наблюдаемого при наличии магнитного пробоя во всех описанных выше случаях. Аналогичная ситуации должна возникать также и в самом общем случае (одновременного отсутствия симметрии по отношению к обращению времени и центральной симметрии у решетки кристалла).

Здесь необходимо сказать еще следующее. В рассматриваемых нами ситуациях (отсутствие симметрии по отношению к обращению времени или центральной симметрии у решетки кристалла), помимо учета фазы Берри, необходимо учитывать также некоторые другие явления (см. обзор таких явлений, например, в работе [30]). В частности, в этих ситуациях необходимо учитывать также появление орбитального магнитного момента блоховских электронов $\mathbf{M}(\mathbf{p})$, влияющего на форму спектра в рассмотренных нами выше случаях. Учет влияния орбитального магнитного момента (магнитного момента волнового пакета) состоит в добавке к энергии $\epsilon(\mathbf{p})$ величины $-\mathbf{M}(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{B}$, т.е. к (слабой) перенормировке дисперсионного соотношения, зависящей от магнитного поля. Как мы уже видели выше, квантованный спектр отвечает резонансным вкладам в осцилляционные явления лишь при наличии центральной симметрии в рассматриваемых нами перестройках. Таким образом, для сохранения этого свойства мы должны потребовать наличие центральной симметрии также у перенормированного спектра. Как и кривизна Берри, орбитальный магнитный момент блоховских электронов обладает свойством $\mathbf{M}(\mathbf{p}) = \mathbf{M}(-\mathbf{p})$ при наличии центра инверсии в кристалле и $\mathbf{M}(-\mathbf{p}) = -\mathbf{M}(\mathbf{p})$ при наличии симметрии по отношению к обращению времени. Можно видеть, таким образом, что соотвествующая добавка является четной по \mathbf{p} только при наличии центра инверсии в кристалле, и, следовательно, наличие орбитального магнитного момента не разрушает резонансные свойства спектра также только в этом случае.

Кроме сказанного выше, надо сделать еще одно замечание. А именно, в отсутствие симметрии по отношению к обращению времени или центра инверсии в кристалле в формировании спектра $\epsilon(\mathbf{p})$ часто также принимает участие спин-орбитальное взаимодействие. В результате, спин и квазиимпульс блоховских электронов не являются независимыми и нужно рассматривать также зависимость $\mathbf{s}(\mathbf{p})$ спина электрона от его квазимпульса для каждой ветви электронного спектра. Поскольку спин электрона также дает вклад в его зеемановскую энергию в присутствии магнитного поля, для симметричности соответствующей добавки к энергии нам необходимо выполнение условия $\mathbf{s}(\mathbf{p}) = \mathbf{s}(-\mathbf{p})$, что также отвечает наличию центра инверсии в кристалле. (Мы предполагаем здесь также, что спин-орбитальное взаимодействие не приводит к пересечению ветвей электронного спектра вблизи рассматриваемой перестройки).

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрена ситуация развитого магнитного пробоя, возникающая вблизи перестроек электронной динамики на поверхности Ферми в присутствии сильных магнитных полей. Рассмотрены случаи, когда возникающий квантовый спектр на перестраивающихся замкнутых траекториях отвечает резонансному вкладу в квантовые осцилляционные явления. Как показано в работе, эта ситуация возникает лишь при некоторых из возможных топологических перестроек электронной динамики на поверхности Ферми. Вместе с тем, появление таких перестроек на реальных поверхностях Ферми является более вероятным по сравнению с остальными в силу особенностей их геометрии. В работе рассмотрено также возможное влияние появления фазы Берри и других эффектов, возникающих при нарушении симметрии по отношению к обращению

времени или отсутствии центра инверсии в кристалле, на описываемые явления.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 21-11-00331).

ЛИТЕРАТУРА

- Ч. Киттель, Квантовая теория твердых тел, Наука, Москва (1967).
- И.М. Лифшиц, М.Я. Азбель, М.И. Каганов, Электронная теория металлов, Наука, Москва 1971.
- А.А. Абрикосов, Основы теории металлов, Наука, Москва (1987).
- И.М. Лифшиц, М.Я. Азбель, М.И. Каганов, ЖЭТФ 31, 63 (1956).
- И.М. Лифшиц, В.Г. Песчанский, ЖЭТФ 35, 1251 (1958).
- И.М. Лифшиц, В.Г. Песчанский, ЖЭТФ 38, 188 (1960).
- 7. С.П. Новиков, УМН 37, 3 (1982).
- **8**. А.В. Зорич, УМН **39**, 235 (1984).
- 9. И.А. Дынников, УМН 47, 161 (1992).
- 10. С.П. Царев, Частное сообщение, 1992-1993.
- **11**. И.А. Дынников, Математические заметки **53**, 57 (1993).
- A.V. Zorich. in: Proc. Geometric Study of Foliations, (Tokyo, November 1993), ed. T. Mizutani et al., World Scientific, Singapore (1994), p. 479.
- I.A. Dynnikov, Surfaces in 3-torus: Geometry of Plane Sections, Proc. of ECM2, BuDA (1996).

- 14. I.A. Dynnikov, Amer. Math. Soc. Transl. Ser. 2, Vol. 179, AMS, Providence, RI (1997), p. 45.
- 15. И.А. Дынников, УМН 54, 21 (1999).
- С.П. Новиков, А.Я. Мальцев, Письма в ЖЭТФ
 63, 809 (1996).
- 17. А.Я. Мальцев, ЖЭТФ 112, 1710 (1997).
- **18**. С.П. Новиков, А.Я. Мальцев, УФН **168**, 249 (1998).
- A. Ya. Maltsev and S. P. Novikov, J. Stat. Phys. 115, 31 (2004).
- **20**. А.Я. Мальцев, С.П. Новиков, Труды МИАН **302**, 296 (2018).
- С.П. Новиков, Р. Де Лео, И.А. Дынников, А.Я. Мальцев, ЖЭТФ 156, 761 (2019).
- **22**. Г.Е. Зильберман, ЖЭТФ **33**, 387 (1958).
- **23**. Г.Е. Зильберман, ЖЭТФ **34**, 748 (1958).
- **24**. М.Я. Азбель, ЖЭТФ **39**, 1276 (1960).
- A. Alexandradinata and Leonid Glazman Phys. Rev. Lett. 119, 256601 (2017).
- 26. A. Alexandradinata and Leonid Glazman, Phys. Rev. B 97, 144422 (2018).
- **27**. А.Я. Мальцев, ЖЭТФ **158**, 1139 (2020).
- **28**. А.Я. Мальцев, ЖЭТФ **160**, 699 (2021).
- 29. Ganesh Sundaram and Qian Niu, Phys. Rev. B 59, 14915 (1999)
- 30. Di Xiao, Ming-Che Chang, Qian Niu, Rev. Mod. Phys. 82, 1959 (2010)

ГИДРОДИНАМИКА ТУРБУЛЕНТНОГО СЛОЯ СМЕШЕНИЯ

В.П. Воротилин*

Институт прикладной механики Российской академии наук 125040, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 26 мая 2022 г., после переработки 10 июня 2022 г. Принята к публикации 13 июня 2022 г.

Разработана теория и проведен расчет турбулентного слоя смешения, завершающий описание классических (учебных) вариантов турбулентных течений под общим названием турбулентные течения «со сдвигом», ранее рассмотренных для турбулентных струй, турбулентных течений в каналах и турбулентного пограничного слоя [7, 8, 10]. В основе физического механизма предлагаемого подхода, исходя из факта формирования отрывных вихрей на границах потока, лежала идея переноса сдвига (т.е. трения между слоями турбулентного потока) из объема потока к его границам. Полученные соотношения описывают геометрическую структуру и динамические особенности поведения слоя в безграничном диапазоне изменения исходных параметров течения.

DOI: 10.31857/S0044451022120185 **EDN:** LFFNME

1. ВВЕДЕНИЕ

Турбулентный слой смешения (далее ТСС) образуется в результате потери устойчивости двух параллельных соприкасающихся потоков, движущихся с различными скоростями. Исследование закономерностей развития ТСС является частью общей теории турбулентных струй, поскольку эта стадия движения потока предшествует режиму развитого течения турбулентной струи. С практической точки зрения течения подобного рода представляют интерес также при исследовании атмосферных явлений над просторами морей и океанов [1]. Используемые в литературе методы теоретического описания ТСС, как, впрочем, любых других типов турбулентных течений со сдвигом, основаны на уравнениях полуэмпирической теории турбулентной вязкости и ограничены незначительным различием скорости и плотности смешиваемых потоков [2–5]. При этом границы слоя в объеме потоков формально задаются как те линии, где скорость течения в слое отличается от скорости внешнего течения на некоторую малую величину (чаще всего на один процент). И таким образом, исчезает как факт реально существующей

него) и турбулентного течения, так и различие действующих в них физических механизмов. Результаты современных численных решений уравнений Навье-Стокса [1,6] дают описание картины турбулентных течений во всем многообразии определяющих ее условий. Но они не проясняют действия физических объективных законов, управляющих механизмом турбулентности, и поэтому не позволяют оценить значение и роль вычисляемых характеристик течения в процессе развития слоя. В лучшем случае (в идеале) их можно рассматривать только как эквивалент турбулентности, реализуемой в экспериментальных измерениях. Суть предлагаемого подхода к описанию ТСС заключается в том, что действие физических механизмов турбулентности в своем главном качестве, т.е. переносе кинетической энергии потока к энергии турбулентных пульсаций, ранее разработанных для струй [7] и течений в каналах [8], переходит из объема потока к его границам и связано с образованием отрывных вихрей на границах потока. Для течений в каналах факт их существования позволил описать эффективную шероховатость в законе сопротивления как средний объем отрывных застойных зон на единице поверхности стенки, а для турбулентных струй вывести выражение для скорости захвата внешней среды и написать замыкающее уравнение баланса массы турбулентной жидкости (что в данной работе будет выполнено

границы, разделяющей области ламинарного (внеш-

E-mail: VPVorotilin@yandex.ru

и для ТСС). Таким образом, решение самих уравнений для выяснения важнейших характеристик турбулентных течений теряет свою актуальность, и для распределения скоростей по сечению потока становится возможным использовать упрощенное условие однородности профиля скорости по сечению потока, не умаляя при этом сути физических механизмов, определяющих процесс развития ТСС. Границы ТСС разделяют области внешнего ламинарного течения и турбулентного течения в ТСС, поэтому и действие механизма турбулентности на границах ТСС будет подобно упомянутому для турбулентных струй. Однако различие параметров внешних ламинарных потоков обусловливает особенности и многообразие режимов течения ТСС, отличающие его от течения турбулентных струй.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ВЫВОД УРАВНЕНИЙ, ОПИСЫВАЮЩИХ ПРОЦЕСС РАЗВИТИЯ ТСС

Для изучения основных закономерностей развития ТСС рассмотрен простейший вариант смешения двух параллельных потоков, движущихся вдоль оси X системы координат (X, Y, Z), однородных в поперечном направлении (по оси Z) и при X < 0разделенных непроницаемой стенкой. Соприкосновение и перемешивание потоков происходит, начиная с точки X = 0. Исходные значения скорости u_i , плотности ρ_i и прочих параметров обозначаются индексом i = 1 в верхней полуплоскости потока (Y > 0) и индексом i = 2 в нижней полуплоскости. Исключая этап формирования различного рода переходных структур потока [1], принимается, что с самого начала в результате турбулентного перемешивания формируется режим течения ТСС с однородным распределением по ширине слоя h, скорости и и плотности ρ . Направление скорости (вдоль оси X_u) в общем случае образует некоторый подлежащий определению угол α с направлением исходной оси Х. Границы слоя, ввиду отсутствия какихлибо характерных параметров размерности длины, будут иметь вид прямых, расположенных под углом δ_i относительно оси X_u . Отрезки h_i ширины слоя, поделенные осью X_u, с учетом малости углов δ_i (для турбулентной струи в [7] было принято значение tg $\delta_i = 0.1$) запишутся в виде $h_i = \delta_i x, h = \delta x$, где $\delta = \delta_1 + \delta_2$. Условная схема потоков вместе с обозначениями искомых и вычисляемых величин, необходимых при выводе уравнений, описывающих развитие ТСС, показана на рисунке.



Иллюстративная схема турбулентного смешения двух параллельных потоков с плотностью ρ_i , движущихся вдоль оси X_u со скоростью u_i , где $i = 1, 2, Q_i$ — набегающие на TCC потоки массы внешней среды; u и ρ — средние скорость и плотность потока в слое смешения. Границы слоя смешения с внешней областью течения отмечены линиями O1 и O2, δ_i — углы разлета границ слоя, α — угол пово-

рота средней скорости в слое

3. УРАВНЕНИЯ БАЛАНСА МАСС, ИМПУЛЬСА И ЭНЕРГИИ

Уравнения для искомых переменных получим, составляя балансы их потоков между близкими сечениями оси, принимая во внимание углы и линии геометрической структуры TCC, формирующих картину смешения потоков, как показано на рисунке. Для варианта несжимаемой жидкости средняя плотность записывается в виде

$$\rho = \frac{\rho_1 s_1 + \rho_2 s_2}{h},\tag{1}$$

где $h = s_1 + s_2$, $s_i = \beta_i x$ — доля *i*-го компонента смеси в сечении слоя X. Уравнения баланса массы для каждого компонента примет вид

$$\frac{d(\rho_1 u s_1)}{dx} \equiv \rho_1 u \beta_1 = \rho_1 u_1 \delta_1 - Q_1,$$

$$\frac{d(\rho_2 u s_2)}{dx} \equiv \rho_2 u \beta_2 = \rho_2 u_2 \delta_2 + Q_2,$$
(2)

где Q_i — набегающие на ТСС потоки массы внешней среды (имеющие разные знаки) в результате ее вытеснения из зоны ТСС. Уравнения импульса вдоль и поперек потока, а также кинетической энергии с учетом того, что производную любой из искомых переменных φ можно записать как
$d(u\varphi h)/dx = \delta u\varphi$, имеют вид

$$\frac{d(\rho u^{2}h)}{dx} \equiv \delta\rho u^{2} = \delta_{1}\rho_{1}u_{1}^{2} + \delta_{2}\rho_{2}u_{2}^{2} - Q_{1}u_{1} + Q_{2}u_{2},$$

$$\frac{d(\alpha\rho u^{2}h)}{dx} \equiv \delta\alpha\rho u^{2} =$$

$$= \delta_{1}Q_{1}u_{1} + \delta_{2}Q_{2}u_{2} - \frac{Q_{1}^{2}}{\rho_{1}} + \frac{Q_{2}^{2}}{\rho_{2}},$$

$$\frac{d(\rho u^{3}h)}{dx} \equiv \delta\rho u^{3} =$$

$$= \delta_{1}\rho_{1}u_{1}^{3} + \delta_{2}\rho_{2}u_{2}^{3} + u_{1}^{2}Q_{1} - u_{2}^{2}Q_{2} - \varepsilon h.$$
(3)

Параметр ε при стандартном выводе уравнения энергии из уравнений Навье–Стокса есть скорость диссипации кинетической энергии. В предлагаемой теории уравнением энергии формально задается величина этого параметра и его физический смысл будет позднее установлен как энергии порождаемых при трении на границах ТСС турбулентных вихрей. Полученная система уравнений содержит семь подлежащих определению искомых параметров: $u, \delta_i, \beta_i, Q_i$ (i = 1, 2). Вывод двух недостающих уравнений связан с выяснением механизма захвата внешней среды и последующего расширения границ слоя, поскольку именно его ширина или угол δ ($h = \delta x$) определяет особенности его развития.

4. О МЕХАНИЗМЕ ЗАХВАТА И ТУРБУЛИЗАЦИИ ВНЕШНЕЙ СРЕДЫ

В литературе попытка качественного (точнее, на словах) объяснения механизма этого явления была основана на гипотезе существования вязкого надслоя на границе турбулентного слоя и внешней ламинарной среды толщиной масштаба минимальных турбулентных пульсаций λ_{min} [9], в котором завихрение и захват внешней среды происходил под действием сил молекулярной вязкости (viscous nibbling). Но при этом, поскольку движение турбулентной среды не зависит от молекулярной вязкости, по аналогии с объяснением механизма диссипации турбулентной энергии утверждалось, что скорость захвата должна зависеть только от интенсивности крупномасштабных пульсаций внутри турбулентной области. Мотивом для предлагаемого в данной работе, как и в [7, 10], объяснения механизма захвата явился тот пробел гипотезы вязкого надслоя, что в основе ее допущений исключается обратное влияние скорости внешней среды на движение ТСС. Но достаточно отметить, что, даже если в строгой постановке задачи использовать понятие турбулентной вязкости, то решение с условием

 $u_x(x, y \to \infty) = u_\infty$, где u_∞ — скорость внешнего течения, даст формальный результат, учитывающий влияние внешних условий. Исходя из того факта, что внешняя среда и TCC — это две четко различимые жидкости, их динамическое взаимодействие можно представить как силу трения, действующую на разделяющих их границах. Поскольку при турбулентном движении молекулярная вязкость роли не играет, из соображений размерности следует, что эта сила на каждой из границ слоя может быть пропорциональна только квадрату некоторой комбинации скоростей движения внешней среды и TCC:

$$F_{fr,i} = \gamma \rho_i (u_s - u_i)^2,$$

где $i = 1, 2, \gamma$ — константа (для турбулентных струй ее значение на основе опытных данных было принято равным 0.1), u_s — промежуточная скорость между u_i и средней скоростью струи u. Из условия непрерывности потока импульса, перетекающего от внешней границы во внутреннюю область TCC, эту же силу можно записать как

$$F_{fr,i} = \gamma \rho (u_s - u)^2.$$

Отсюда для u_s и F_{fr} следуют выражения

$$u_s = \eta_i \left(u + \frac{\rho_i}{\rho^{1/2} u_i} \right),$$

$$F_{fr,i} = \gamma_i \rho_i (u_i - u)^2, \quad \gamma_i = \gamma \eta_i^2,$$
(4)

где введено обозначение $\eta_i = 1/(1 + (\rho_i/\rho)^{1/2}).$

Вывод о том, что закон трения квадратичен по скорости, означает, что обтекание возмущенных границ ТСС внешним потоком должно происходить с образованием отрывных вихрей. По смыслу деления всей области течения на внешнюю безвихревую среду и собственно ТСС указанные отрывные вихри должны остаться в составе ТСС, играя для него роль источника турбулентности. Поэтому и импульс, при трении отдаваемый им ТСС, также должен возвратиться ТСС вместе с захваченными вихрями. От ТСС вихри получают импульс, пропорциональный разности скоростей $u - u_i$. Отсюда, введя обозначение v_{ci} для скорости захвата вихрей внешней среды на каждой из границ слоя, поток возвращаемого импульса (на единицу поверхности ТСС) запишем в виде $j = \rho_i v_{ci} |u - u_i|$. Из условия равенства потоков j и $F_{fr,i}$ находим выражение для v_{ci} :

$$v_{ci} = \gamma_i |u - u_i|. \tag{5}$$

Универсальную применимость полученных формул подчеркивает то обстоятельство, что никакие конкретные свойства турбулентных вихрей, особенности механизма их формирования на возмущенной границе ТСС в окончательном виде полученных соотношений ни в чем не проявляются. Поток захватываемой массы внешней среды на каждой из границ ТСС будет равен $\rho_i v_{ci}$. Без умаления общности в постановке задачи далее принимается, что $u_1 > u_2$ и соответственно $u_1 > u > u_2$. Тогда уравнения баланса массы «турбулентной» жидкости по каждому из компонент смеси примут вид

$$\frac{d(\rho_1 u h_1)}{dx} \equiv \rho_1 u \beta_1 = \gamma_1 \rho_1 (u_1 - u_1) \equiv \varphi_1,$$

$$\frac{d(\rho_2 u h_2)}{dx} \equiv \rho_2 u \beta_2 = \gamma_2 \rho_2 (u - u_2) \equiv \varphi_2.$$
(6)

Подчеркнем «для ясности», что ранее полученные уравнения баланса масс (2) в отличие от уравнений (6) выводились для всего пространства движения потоков и ими фактически задавались потоки Q_i натекания внешней среды на ТСС. Помимо уравнений баланса масс «турбулентной» жидкости можно написать и уравнения баланса объемов, разделенных осью X_u и границами слоя, как результат приращение объемов слоя на его границах с внешней средой:

$$\frac{d(uh_i)}{dx} \equiv u\delta_i = \frac{\varphi_i}{\rho_i}.$$
(7)

Как видим, данными уравнениями определяется величина параметров δ_i .

5. ПРЕОБРАЗОВАНИЯ И РЕШЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ УРАВНЕНИЙ

С учетом (1), (7) для угла δ и средней плотности ρ следуют выражения

$$\delta = \frac{\varphi_1/\rho_1 + \varphi_1/\rho_2}{u},\tag{8}$$

$$\rho = \frac{\varphi_1 + \varphi_2}{u\,\delta},\tag{9}$$

а искомые Q_i , исключая переменные β_i из уравнений (2), (6), представим в виде

$$Q_1 = \rho_1 u_1 \delta_1 - \varphi_1, \quad Q_2 = -\rho_2 u_2 \delta_2 + \varphi_2.$$
 (10)

Полученные выражения для величин ρ , δ_i , δ и Q_i при подстановке их в уравнения теории позволяют выявить неочевидные свойства развития TCC. В частности, уравнения для *x*- и *y*-компонент импульса запишутся в компактной форме

$$\rho u^2 = \frac{\rho_1 \varphi_1 + \rho_2 \varphi_2}{\delta},$$

$$\alpha \delta \rho u^2 = u_1 \varphi_1 \delta_1 - u_2 \varphi_2 \delta_2 - \frac{\varphi_1^2}{\rho_1} + \frac{\varphi_2^2}{\rho_2},$$
(11)

а первое из них, если с учетом (8), (9) исключить ρ и $\delta,-$ в виде

$$\varphi_1(u_1 - u) - \varphi_2(u - u_2) = 0. \tag{12}$$

Слагаемые данного равенства, как следует из соотношений (4), (6), имеют физический смысл сил трения, действующих на границах слоя, и выражают равенство этих сил. Также, чтобы выяснить в рамках представлений предлагаемой теории смысл параметра ε в уравнении энергии, из этого уравнения вычтем умноженное на u уравнение для xкомпоненты импульса. В результате несложных преобразований с учетом подстановки выражений для Q_i (10), получим

$$\varepsilon h = \gamma_1 \rho_1 (u_1 - u)^2 u_1 - \gamma_2 \rho_2 (u - u_2)^2 u_2.$$

Аналогично, используя понятие силы трения, члены правой части данного равенства можно трактовать как работу сил трения на границах слоя, результатом которой является преобразование части кинетической энергии потока в энергию образующихся турбулентных вихрей. При этом на верхней границе слоя энергия вихрей берется за счет кинетической энергии внешнего потока, а на нижней — за счет кинетической энергии самого слоя, и поэтому в балансе кинетической энергии берется с отрицательным знаком. Таким образом, параметр ε , в отличие от существующих представлений, определяющих этот параметр как скорость диссипации кинетической энергии потока, характеризует скорость порождения энергии турбулентных вихрей (иначе турбулентных пульсаций). Из уравнения (11) при подстановке φ_i из (6) для скорости *u* следует выражение

$$u = \frac{u_1 + \omega u_2}{1 + \omega},\tag{13}$$

где обозначено $\omega = (\gamma_2 \rho_2 / \gamma_1 \rho_1)^{1/2} \equiv (3 + \delta)/(1 + 3\delta)$ и $\sigma = (\rho_1 / \rho_2)^{1/2}$. Формулы для плотности слоя ρ , параметров φ_i с учетом соотношений (4), (7) и (9) запишем в виде

$$\rho = \frac{4\rho_1}{(1+\sigma)^2},$$

$$\varphi_1 = \frac{\gamma \rho_1(u_1 - u_2)}{(3+\sigma)(1+\sigma)}, \quad \varphi_2 = \omega \varphi_1.$$
(14)

С учетом δ_i из (7) и *и* из (13) выражение для угла α , фактически определяемое уравнением (11), примет вид

$$\alpha \rho u^2 = \frac{\varphi_1 \omega (u_1 - u_2)}{1 + \omega}.$$

Окончательно все геометрические характеристики слоя, т.е. углы α , δ_1 , δ_2 , представим в виде, удобном для качественной оценки их зависимости от параметров u_i, ρ_i :

$$\alpha = \frac{\gamma}{4} (1+\sigma)(1+3\sigma)\xi^2,$$

$$\delta_1 = \frac{4\gamma\xi}{3+\sigma}, \quad \delta_2 = \frac{4\gamma\xi\sigma^2}{1+3\sigma},$$
(15)

где введены обозначения $\xi = (1-\mu)/((1+\omega\mu)(1+3\sigma)),$ $\mu = u_2/u_1$. С точки зрения возможной экспериментальной проверки представляют интерес оценки доли захватываемой массы внешней среды в объем ТСС на сечение слоя, записываемые с учетом равенств $\beta_i = \delta_i$ как $D_i = \rho_i \delta_i/(\delta_1 + \delta_2)$ или, после подстановки выражений для δ_i , в виде

$$D_1 = \frac{\rho_1(1+3\sigma)}{(1+\sigma)^3}, \quad D_2 = \frac{\rho_2\sigma^2(3+\sigma)}{(1+\sigma)^3}.$$
 (16)

6. КАЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ ПАРАМЕТРОВ ДВИЖЕНИЯ ТСС

Из полученных соотношений видно, что если в роли масштабов скорости и плотности задавать u_1 и ρ_1 , то все искомые величины, описывающие движение ТСС, будут зависеть от двух безразмерных групп, обозначенных как μ и σ и по охвату допустимых вариантов развития слоя изменяющихся в пределах $0 \leq \mu < 1$ и $0 \leq \sigma \leq 1$, где предел $\sigma \to 0$ соответствует варианту контакта газообразного и жидкого потоков. Под термином «качественный анализ» понимается оценка теоретически выводимых физических характеристик ТСС для режимов предельных значений независимых параметров течения, позволяющая, с одной стороны, в наглядном виде описать особенности развития ТСС, а с другой, на примере особых режимов развития слоя убедиться в физической непротиворечивости исходных положений теории. Основной кинематической характеристикой слоя является параметр μ , и для пределов $\mu \to 0$ и $\mu \to 1$ имеют место с учетом соотношений (13) – (15) следующие оценки параметров слоя.

1. В случае $\mu = 0$ — неподвижный поток снизу, $u = 1/(1 + \omega)$; при $\rho_1 = \rho_2$, т.е. для $\sigma = 1$, скорость в слое равна u = 1/2; углы разлета $\delta_1 = \delta_2 = \gamma/4$, $\alpha = \gamma/8$, $D_1 = D_2 = \rho_1/2$. В пределе $\sigma \to 0$, т.е. при смешении потока газа и неподвижной жидкости, u = 1/4, $\sigma_1 = (4/3)\gamma$, $\delta_2 = 4\gamma\sigma^2$, $\alpha = \gamma/4$, $D_1 = \rho_1$, $D_2 = 3\rho_1$. 2. Вариант $\mu = 1 - \varepsilon$, где $\varepsilon \ll 1$, т.е. для близких по скорости потоков, $u = 1 - \varepsilon/(1 + \omega)$ и углы разлета при любых σ малы: $\delta_1, \delta_2 \approx \gamma \varepsilon$, $\alpha \approx \gamma \varepsilon^2$.

Особые случаи смешения доставляют вариации параметра
 $\sigma.$ В случае $\sigma=1$

$$u = (1+\mu)/2, \quad \delta_1 = \delta_2 = \gamma \xi, \quad \alpha = 2\gamma \xi^2,$$
$$D_1 = D_2 = \rho_1/2,$$

а в пределе $\sigma \to 0$

$$u = (1+3\mu)/4, \quad \delta_1 = \gamma \xi/3, \quad \delta_2 = \gamma \xi \sigma^2,$$

$$\alpha = 4\gamma \xi^2, \quad D_1 = \rho_1, \quad D_2 = 3\rho_1,$$

$$\xi = \frac{1-\mu}{4(1+\mu)}.$$

Приведенные формулы и оценки параметров слоя дают наглядную иллюстрацию разнообразия картин развития и геометрической структуры слоя в зависимости от особых и характерных значений параметров, задающих конкретные варианты его развития. Можно отметить интересный факт: при $\sigma \to 0$, т.е., например, при смешении потока воздуха над водой, доля массы захватываемой жидкости в единице объема TCC равна $3\rho_1$.

7. ВЫВОДЫ

Подводя итоги проведенного исследования проблемы ТПС, отметим некоторые особенности из его результатов. В исходной системе уравнений (3), определяющих процесс развития TCC, а также в соотношениях (7), (8), задающих количественную оценку массы захватываемой внешней среды, в явном виде описание механизма вихреобразования как действия сил трения на границах TCC отсутствует. Но неожиданно этот механизм проявляет себя в уравнениях импульса и энергии в результате проведенных с ними тождественных преобразований, демонстрируя гармонию внутренних, т.е. неочевидных, взаимосвязей всех параметров и процессов, описывающих предложенный механизм развития турбулентного слоя смешения.

В основу понимания и последующего описания механизма турбулентности были положены представления о процессе вихреобразования на границах турбулентного течения слоя смешения. Как результат динамического взаимодействия TCC с внешними ламинарными потоками были получены выражения для скорости захвата (турбулизации) внешней среды. Это позволило написать уравнение баланса массы турбулентной жидкости (БМТ) и рассматривать геометрическую структуру слоя смешения как реальный физический объект исследования его свойств. Уравнение БМТ вместе с интегральными уравнениями баланса импульсов составили замкнутую систему уравнений для искомых переменных, описывающих процесс развития слоя при наличии множества независимых параметров, характеризующих общие условия развития турбулентного пограничного слоя. Поскольку механизм переноса кинетической энергии потока к энергии турбулентных пульсаций в рамках предлагаемой теории целиком обусловлен процессом образования вихрей на границах потока, при выводе уравнений использовалось условие однородности профиля скорости по сечению потока, не обедняя при этом сути физических механизмов, определяющих процесс развития ТСС. Что же касается сравнения с экспериментальными данными, то результаты представленной теории дают, скорее, повод или для постановки новых экспериментов, или для проведения численных расчетов, связанных с исследованием полученных в статье качественных оценок параметров ТСС в зависимости от многообразия внешних условий его развития.

ЛИТЕРАТУРА

- A. VanDine, H. T. Pham and V. Sarkar, J. Fluid Mech. 916, A42 (2021).
- Г. Шлихтинг, Теория пограничного слоя, Наука, Москва (1969).
- **3.** A. A. Townsend, *The Structure of Turbulent Shear Flow*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1980).
- Турбулентность: принципы и применение, под ред. У. Фроста, Т. Моулдена, Мир, Москва (1980).
- 5. Г. Н. Абрамович, *Теория турбулентных струй*, Наука, Москва (1984).
- Z. Cheng and G. Constantinescu, J. Fluid Mech. 916, A41 (2021).
- **7**. В. П. Воротилин, ЖЭТФ **153**, 313 (2018).
- **8**. В. П. Воротилин, ЖЭТФ **156**, 176 (2019).
- S. Corrsin and A. L. Kistler, Tech. Rep. TN-1244.NACA (1955).
- 10. В. П. Воротилин, ЖЭТФ 160, 587 (2021).

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ СВОЙСТВ ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНОЙ СИСТЕМЫ ЧАСТИЦ ЮКАВЫ В ПАРАБОЛИЧЕСКОМ КОНФАЙНМЕНТЕ

И. В. Воронов ^{a,b*}, В. С. Николаев ^{a,b}, А. В. Тимофеев ^{b,a,c}

^а Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет) 141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия

> ^b Объединенный институт высоких температур Российской академии наук 125412, Москва, Россия

^с Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» 101000, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 17 июня 2022 г., после переработки 27 июля 2022 г. Принята к публикации 2 августа 2022 г.

Исследуются динамические свойства системы из конечного числа одноименно заряженных частиц, взаимодействующих по экранированному кулоновскому потенциалу в поле параболической ловушки. Методом анализа нормальных мод в квазигармоническом приближении получено пространственное распределение амплитуд колебаний частиц в системе: высокочастотные колебания локализуются в ее центральной области. Это приводит к тому, что в разных областях структуры спектры колебаний частиц различны. Для обобщения этого результата на широкий температурный диапазон проведено численное моделирование систем из конечного числа заряженных частиц в ловушке методом классической молекулярной динамики. Показана пространственная неоднородность спектров тепловых колебаний частиц: происходит смещение спектра в низкочастотную область при увеличении расстояния от рассматриваемой подсистемы до центра структуры. Различные методы расчета амплитуды тепловых колебаний частиц — как в рамках квазигармонического приближения, так и методом молекулярной динамики — подтверждают неоднородность радиального профиля амплитуды: на периферии системы амплитуда тепловых колебаний частиц имеет более высокое значение, чем в центре структуры. Показано, что в локальном приближении динамические свойства подсистем структур из конечного числа заряженных частиц в ловушке при определенных условиях существенно отличаются от динамических свойств систем заряженных частиц близкой плотности в периодических граничных условиях. Результаты настоящего исследования могут быть полезны при описании динамических свойств лабораторных плазменно-пылевых и коллоидных систем.

DOI: 10.31857/S0044451022120197 **EDN:** LFJRGM

1. ВВЕДЕНИЕ

Система частиц, взаимодействующих по потенциалу Юкавы, используется в качестве модельной как для систем элементарных частиц [1], так и для коллоидной [2] и пылевой [3–18] плазмы. При описании систем одноименно заряженных частиц в плазме используется экранированный кулоновский потенциал, совпадающий с отталкивательным потенциалом Юкавы по функциональной форме:

$$U_{Coul}(r_{ij}) = \frac{Q^2}{r_{ij}} \exp\left(-\kappa r_{ij}\right),\tag{1}$$

где Q — электрический заряд частицы, $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ — расстояние между частицами i и j, κ — параметр экранирования. В силу своего отталкивательного характера потенциал такой формы может быть использован только для описания модельных «бесконечных» однородных систем заряженных частиц в периодических граничных условиях. Структурные, динамические и транспортные свойства таких систем детально изучены в работах [19–21]. В идеаль-

^{*} E-mail: ilya.v.voronov@gmail.com

ных условиях описанные структуры образуют кристаллическую решетку из одноименно заряженных частиц: в трехмерном случае ОЦК или ГЦК, в двумерном — гексагональную.

В лабораторных экспериментах исследуются структуры из конечного числа частиц с открытой границей. Примерами могут служить коллоидные системы, пылевая и однокомпонентная плазма. В таких системах одним из подходов для удержания отталкивающихся частиц от разлета является воздействие внешней электростатической ловушки. Например, в плазменно-пылевых системах конфайнмент может быть связан со следующими факторами: в тлеющем разряде ловушка вызвана амбиполярной диффузией [22], а в высокочастотном разряде она создается намеренно с помощью специального кольца [23]. В первом приближении конфайнмент в таких системах имеет параболический профиль [24]:

$$U_{trap}(x_i, y_i, z_i) = 0.5Q(\alpha x_i^2 + \beta y_i^2 + \gamma z_i^2), \quad (2)$$

где α, β, γ — параметры ловушки. В зависимости от их соотношения получаются трех-, двух- и одномерные системы. Обоснованность использования функциональной формы потенциалов (1), (2) подтверждается теоретическими результатами работ [12,25] по исследованию пространственного распределения плазмы в положительном столбе тлеющего разряда. Результаты этих работ указывают на то, что в области существования пылевой структуры профиль плотности ионов и электронов плазмы в радиальном направлении сглаживается, градиент плотности ионов и электронов вблизи оси разрядной трубки уменьшается. Радиальная компонента электрического поля в этих условиях имеет линейную зависимость от радиального расстояния, что соответствуют ловушке с параболическим профилем вблизи центра системы. Таким образом, модель, включающая в себя потенциалы (1) и (2), может использоваться в качестве первого приближения для описания подсистемы пылевых частиц в плазме газового разряда.

В данной работе в центре внимания находятся двумерные системы из конечного числа заряженных частиц в параболической ловушке, для которых $\alpha = \beta \ll \gamma$. Такие системы хорошо изучены с точки зрения структурных свойств [26–31]. Им присуща пространственная неоднородность, проявляющаяся в монотонном убывании плотности частиц с увеличением радиального расстояния как $n(r) = a - br^2$ [30]. Следовательно, среднее межчастичное расстояние $\Delta_{local}(r) \propto n^{-1/2}(r)$ в таких системах, наобо-

рот, увеличивается от центра системы к ее краю. В работах [26,27] подчеркивается, что структурная неоднородность системы заряженных частиц связана как с наличием удерживающей ловушки, так и с экранировкой ($\kappa \neq 0$) потенциала взаимодействия.

В работе [32] предлагается локальный подход к описанию динамических свойств пространственнонеоднородных систем заряженных частиц в удерживающей ловушке. Показано, что амплитуда тепловых колебаний частиц увеличивается от центра структуры к ее краю. Также в работе [32] обсуждается неоднородность пространственного распределения температуры плавления: отдельные области системы плавятся при различных температурах. Делается вывод, что в таких системах может наблюдаться сосуществование двух фаз: твердой в центре системы и жидкой на периферии. Это происходит из-за того, что от центра к периферии амплитуда тепловых колебаний частиц растет быстрее, чем среднее межчастичное расстояние. Отношение этих двух параметров определяет величину параметра Линдеманна, что в первом приближении и указывает на неоднородный характер процесса плавления. Позднее в работе [33] показано, что влияние неустойчивости связанных мод может привести к диаметрально противоположному эффекту: сначала плавится центральная часть квазидвумерной структуры, а затем периферия.

Наряду с амплитудными свойствами исследуются и спектральные характеристики систем из конечного числа заряженных частиц в ловушке [34, 35]. В работах [34, 35] для исследования спектральных свойств систем применяется метод анализа нормальных мод. Он позволяет получить информацию о колебательных модах и сравнить колебательные процессы между системой из конечного числа частиц и однородной системой в периодических граничных условиях. В работе [34] проведен анализ спектров колебаний частиц в системе из конечного числа частиц и приведено замечание, что существует некоторая максимальная частота колебаний частиц, ограничивающая спектр колебаний. Это ограничение частоты колебаний частиц в системе связано с числом частиц и, соответственно, с размером системы. В работе [35] показано, что колебания частиц в таких системах можно разделить на колебательные процессы, имеющие сходство с волнами сжатия и волнами сдвига в «бесконечных» юкавовских системах. Отметим, что в работах [34,35] анализ нормальных мод проведен для систем из малого числа заряженных частиц и не было уделено достаточно внимания влиянию неоднородности пространственных свойств систем в ловушке на их динамические свойства. В настоящем же исследовании проводится анализ нормальных мод с целью установления влияния неоднородности пространственных свойств таких систем на их динамические свойства.

Изучение влияния неоднородности пространственных свойств на динамические свойства могло бы быть полезным для описания некоторых экспериментальных результатов. К примеру, в экспериментальных работах [36–38] из плазменнопылевой структуры выделяется центральная область, свойства которой далее описываются с помощью численного моделирования в периодических граничных условиях. Заметим, что, несмотря на обилие работ, в которых используется данный подход, вопрос обоснованности его применения все еще нельзя считать закрытым [39–41].

Настоящая статья построена следующим образом. В разд. 2 подробно описываются рассматриваемая модель, методика исследования и локальный подход к изучению динамических свойств системы из конечного числа частиц в ловушке. В разд. 3 динамические свойства конечной системы рассматриваются в низкотемпературном квазигармоническом приближении с помощью метода анализа нормальных мод. Показано, что в зависимости от частоты колебательные процессы локализуются в различных областях системы. В разд. 4 исследуются динамические свойства системы из конечного числа заряженных частиц в ловушке с помощью метода молекулярной динамики, поскольку данный метод, в отличие от метода анализа нормальных мод, эффективен при большом числе частиц в системе и применим в широком диапазоне температур. Наблюдается совпадение результатов расчета динамических свойств в разд. 3 и 4. Показана неоднородность динамических свойств и предложены методы их расчета. В разд. 5 проводится сравнительный анализ динамических свойств «конечных» и «бесконечных» структур. В рассмотрении участвуют набор систем из конечного числа заряженных частиц в ловушке и набор однородных систем заряженных частиц в периодических граничных условиях (ПГУ). Набор систем в ловушке состоит из нескольких пространственнонеоднородных структур с совпадающим межчастичным расстоянием в центре и различным числом частиц. Набор систем в ПГУ состоит из нескольких однородных структур с совпадающей плотностью частиц и также различным числом частиц. Проводится сравнение спектров тепловых колебаний частиц в

неоднородных «конечных» и однородных «бесконечных» системах. Обнаружено различие в амплитудах тепловых колебаний частиц в центральной квазиоднородной подсистеме конечной структуры и однородной системе в ПГУ при совпадении их плотностей вплоть до числа частиц $N = 10^5$ в обеих системах.

2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ И ЛОКАЛЬНОГО ПОДХОДА К РАСЧЕТУ ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОНЕЧНОЙ СИСТЕМЫ

В настоящей работе с помощью численного метода, аналогичного методу классической молекулярной динамики, моделируется двумерная система одноименно заряженных частиц, взаимодействующих по экранированному кулоновскому потенциалу (1) и находящихся в поле параболической электростатической ловушки (2). Моделирование проводится с применением пакета LAMMPS. Полная потенциальная энергия системы записывается следующим образом:

$$E = 0.5\alpha \sum_{i=1}^{N} (x_i^2 + y_i^2) + \sum_{i=1}^{N} \sum_{i>j}^{N} \frac{Q^2}{r_{ij}} \exp\left(-\kappa r_{ij}\right), \quad (3)$$

где $\alpha = 0.09$ ед. СГСЭ, N = 500 частиц, Q = 5000e, $\kappa = 100 \text{ см}^{-1}$. Численное интегрирование уравнений движения выполняется с применением алгоритма Верле с шагом по времени $\tau = 10^{-5}$ с. Система подготавливается в мягком термостате Нозе–Гувера с температурой T = 300 К и параметром релаксации $T_{damp} = 1000\tau$ в течение $5 \cdot 10^6$ шагов. После релаксации системы происходит расчет интересующих характеристик в течение 10^6 шагов, мягкий термостат при этом остается включенным. Рассчитанные характеристики усредняются более чем по нескольким идентичным статистически независимым структурам. Контроль сходимости рассчитываемых характеристик проводится по зависимости усредненной величины от времени усреднения.

Для реализации метода анализа нормальных мод в разд. 3 используется динамическая матрица, полученная численно для исследуемой методом молекулярной динамики структуры с помощью пакета LAMMPS. Выражение для расчета динамической матрицы имеет вид

$$\hat{E}_{\alpha,\beta,i,j} = \frac{\partial^2 E}{\partial r_{\alpha,i} \partial r_{\beta,j}},\tag{4}$$

где $\alpha, \beta = \{x, y\}$, т.е. $r_{\alpha,i}$ обозначает координату xили y частицы с номером i из моделирования, а дифференцируемая величина E — полная потенциальная энергия системы (3). Затем с применением собственного программного кода происходит поиск собственных чисел и векторов динамической матрицы. Полученные характеристики усредняются по статистически независимым структурам.

В рамках численного моделирования в разд. 4 конечные системы заряженных частиц в ловушке рассматриваются с применением локального подхода. В структуре выделяются области, такие что в них плотность частиц приблизительно постоянна, а число частиц достаточно велико для проявления подсистемой макроскопических свойств. Целесообразность такого подхода заключается в том, что во многих классах систем из конечного числа частиц (например, пылевая плазма, коллоидные системы) наблюдается наличие зависимости плотности частиц от радиального расстояния. В силу цилиндрической симметрии рассматриваемой в данной работе системы, в качестве описанных выше областей в ней можно выделить кольца, в которых число частиц велико, и плотность частиц близка к постоянной. Характерное разделение исследуемой структуры на кольца можно видеть на рис. 1 А. В настоящей работе сравниваются характеристики, усредненные по всем частицам в указанных подсистемах. Также в настоящей работе в разд. 5 соотносятся свойства выделенных цветом квазиоднородных подсистем конечной системы со свойствами однородной системы в периодических граничных условиях с совпадающей плотностью (см. рис. 1 В). Рассматриваемая в работе структура из 500 частиц имеет радиус $R_0 \approx 0.15$ см. Разбиение системы на кольцевые фрагменты проводится с учетом неоднородности радиального профиля плотности частиц в системе [26,27]. Принцип выбора границ разбиения показан на рис. 2. Во фрагментах находится приблизительно следующее число частиц: I - 200, II - 150, III - 100, IV - 50.

3. АНАЛИЗ ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СИСТЕМ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ЛОВУШКЕ В НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОМ КВАЗИГАРМОНИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

В настоящей работе применяется метод анализа нормальных мод для исследования динамических свойств системы заряженных частиц в ловушке в рамках низкотемпературного квазигармонического приближения. Метод анализа нормальных мод используется для нахождения собственных частот и



Рис. 1. В конечной двумерной системе мысленно выделяются кольца, в каждое из которых входит подсистема с постоянной плотностью и числом частиц $N \gg 1$ (A). В разд. 5 каждому такому кольцу конечной структуры (A) ставится в соответствие однородная система в периодических граничных условиях с совпадающей плотностью (B)



Рис. 2. Радиальный профиль межчастичного расстояния $\Delta_{local}(r)$. Штриховыми линиями обозначено разбиение системы на кольцевые фрагменты в локальном подходе

векторов колебаний частиц в различных модах. Всего в произвольной системе из N частиц существует $\mathbb{D}N$ нормальных мод, где $\mathbb{D} = 2$ — размерность пространства. Из $\mathbb{D}N$ нормальных мод f_{trans} мод соответствуют поступательному движению центра масс системы, f_{rot} мод соответствуют вращению системы как целого. В рассматриваемом в работе двумерном случае $f_{trans} = 2, f_{rot} = 1$. Таким образом, в двумерной системе из N частиц наблюдается 2N - 3 нормальных колебательных мод. Поступательные и



Рис. 3. Спектральная плотность энергии колебаний частиц SPD(ω) в системе из конечного числа заряженных частиц в ловушке. Наблюдается ограничение спектра максимальной частотой колебаний частиц $\omega_{max}/2\pi \approx 125$ Гц

вращательные моды исключаются из рассмотрения в данной работе, поскольку именно колебательные моды представляют интерес.

Нормальные частоты и направления колебаний частиц могут быть найдены как собственные числа и векторы динамической матрицы \hat{E} (4) [42]. При расчете динамической матрицы используются координаты всех частиц системы, т.е. локальный подход в данном разделе не применяется.

В результате анализа нормальных мод получены частоты колебаний частиц в системе $\omega^{\mathfrak{m}}$ (\mathfrak{m} — номер моды), которые представлены на рис. З в виде спектра колебаний частиц. Спектр колебаний, полученный таким образом из анализа нормальных мод, принято называть спектральной плотностью энергии $(SPD(\omega))$ [35]. Диапазон частот, проявляющихся в спектре колебаний частиц, может быть оценен из структурных характеристик системы. В кристалле могут распространяться колебательные процессы с длиной волны из диапазона от $2\Delta_0$ до $2D_0$, где Δ_0 — межчастичное расстояние, D_0 — линейный размер системы. В таком случае максимальная частота колебаний частиц ω_{max} в спектре SPD(ω) зависит от числа частиц в системе и определяется минимальным межчастичным расстоянием Δ_{local}^{min} , о чем упоминается в том числе в работе [34]. Связь максимальной частоты и минимального межчастичного расстояния может быть в первом приближении оценена из закона дисперсии, который хорошо изучен для однородной системы Юкавы как в длинноволновом, так и в коротковолновом пределе [43,44].

Собственный вектор колебания u ^{m,p} показывает направление и безразмерную амплитуду смещения данной частицы **p** в моде колебаний **m**. Длину собственного вектора можно понимать как количественное описание того, насколько энергично частица участвует в данной моде колебаний. На рис. 4А-С положения точек соответствуют координатам частиц в конечной структуре, а яркость точек отражает величину собственного вектора колебания частиц в данной моде колебаний. Таким образом, рис. 4А-С изображает пространственное распределение приведенной к безразмерному виду амплитуды колебаний частиц в различных модах. На рис. 4D-F показан радиальный профиль амплитуды собственного вектора колебаний частиц в различных модах, полученный из соответствующих графиков на рис. 4А-С. Согласно рис. 4, при увеличении частоты моды колебаний колебания локализуются в области с большей плотностью (в рассматриваемой системе — в центре). Этот результат дополняет вывод, сделанный ранее по спектральной плотности энергии (рис. 3): колебания наивысшей доступной частоты ω_{max} тесно связаны с минимальным расстоянием между частицами в системе.

Из работ [26,27] известна связь среднего межчастичного расстояния с расстоянием до центра структуры:

$$\Delta_{local} \propto n^{-1/2}(r) = \sqrt{\frac{1}{a - br^2}},\tag{5}$$

где a, b — коэффициенты, определяемые параметрами системы. Следовательно, имеется тесная связь между максимальной частотой колебаний частицы в системе и расстоянием от данной частицы до центра. На рис. 5 показано, что максимальная доступная частицам частота колебаний ω_{max} уменьшается от центра к краю системы. Таким образом, происходит локализация колебаний высокочастотных мод в центре конечной системы.

Согласно стандартной формулировке метода анализа нормальных мод, амплитуда собственного вектора $\mathbf{u}^{m,p}$ приведена к безразмерному виду таким образом, что $\sum_{m} |\mathbf{u}^{m,p}|^2 = 1$. В случае, когда частицы испытывают тепловые колебания при произвольной температуре T, амплитуда этих колебаний может быть получена путем перенормировки суммарной длины собственных векторов $\mathbf{u}^{m,p}$ на абсолютную температуру по шкале Кельвина [45]. В результате имеем выражение для амплитуды тепловых колебаний частицы **р** в конечной системе:

$$A^{\mathfrak{p}} = \left| \sum_{\mathfrak{m}} \tilde{\mathbf{u}}^{\mathfrak{m}, \mathfrak{p}} \right| = \left| \sum_{\mathfrak{m}} \sqrt{\frac{\mathbb{D}k_B T^{\mathfrak{p}}}{M}} \frac{1}{\omega^{\mathfrak{m}}} \mathbf{u}^{\mathfrak{m}, \mathfrak{p}} \right|, \quad (6)$$



Рис. 4. Распределение длин собственных векторов колебаний всех частиц в конечной системе в трех различных модах колебаний m, соответствующих частотам колебаний $\omega^m/2\pi = \{3, 101, 125\}$ Гц. На рис. А–С показано распределение амплитуды собственного вектора каждой частицы по структуре. Чем ярче изображена точка, тем больше длина собственного вектора колебания соответствующей частицы в данной моде. На рис. D–F показана зависимость длины собственного вектора частицы от радиального расстояния, соответствующая графикам А–С для данной моды колебаний. Расстояния нормированы на радиус системы R_0

где \mathbb{D} — размерность пространства, k_B — постоянная Больцмана, M — масса частицы, а $T^{\mathfrak{p}} \equiv T$, поскольку температура в системе постоянна. Суммирование ведется по модам $\mathfrak{m} = \{f_{trans} + f_{rot} + 1, ..., \mathbb{D}N\}$. Таким образом, из суммирования исключаются поступательные и вращательные моды, присутствующие среди решений задачи на собственные значения динамической матрицы (4). Радиальный профиль амплитуды тепловых колебаний частиц в системе, по-



Рис. 5. Сверху показан нормированный на радиус системы R_0 радиальный профиль максимальной частоты колебаний частиц в системе ω_{max} — частоты, которой ограничен спектр на рис. 3. Снизу показан нормированный таким же образом радиальный профиль амплитуды тепловых колебаний частиц в системе, рассчитанной методом анализа нормальных мод с помощью формулы (6). Штриховые линии проведены для наглядности

лученный из анализа нормальных мод, показан на рис. 5: амплитуда тепловых колебаний в квазигармоническом приближении увеличивается от центра к краю системы. Этот результат согласуется с работой [32], где амплитуда тепловых колебаний заряженных частиц в ловушке рассчитана с применением метода классической молекулярной динамики.

4. ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СИСТЕМ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ЛОВУШКЕ В РАМКАХ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В численном моделировании, аналогичном методу классической молекулярной динамики, система из конечного числа заряженных частиц рассматривается в рамках описанного в разд. 2 локального подхода. Численное моделирование позволяет исследовать систему из значительно большего числа частиц и в более широком диапазоне параметров, чем метод анализа нормальных мод, примененный в разд. 3. В каждом выделенном кольце конечной системы (см. рис. 1) рассчитывается автокорреляционная функция скорости (АКФС):

$$VACF(t) = \frac{\langle \mathbf{v}_i(0) \cdot \mathbf{v}_i(t) \rangle_i}{\langle (\mathbf{v}_i(0))^2 \rangle_i},$$
(7)

где $\mathbf{v}_i(t)$ — скорость частицы i в момент времени t, а усреднение ведется по частицам в равно-

весном ансамбле. Затем в каждом кольце вычисляется плотность колебательных состояний частиц VDOS(ω) путем применения преобразования Фурье к AK Φ C [46]:

$$\mathrm{VDOS}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{VACF}(t) \exp(-i\omega t) \, dt. \quad (8)$$

Сравнение плотности колебательных состояний $VDOS(\omega)$ со спектральной плотностью энергии $SPD(\omega)$ при различных значениях температуры можно видеть на рис. 6. Частоты на рис. 6 нормированы на среднее значение «плазменнопылевой» частоты $\widetilde{\omega}_{pd} = \sqrt{Q^2/(M\langle\Delta_{local}\rangle^3)}$, где Q — электрический заряд частицы, M — ее масса, а $\langle \Delta_{local} \rangle = 1/\sqrt{N/S} = \sqrt{\pi R_0^2/N}$ — среднее межчастичное расстояние в системе, S — площадь структуры. Спектры колебаний частиц $VDOS(\omega)$ и $SPD(\omega)$ имеют схожий вид: наблюдаются два характерных пика. При этом наилучшее соответствие VDOS и SPD наблюдается в низкочастотной области спектра. Отметим, что при обоих значениях температур спектры SPD трудно различимы. Спектры VDOS, напротив, при разных температурах различаются значительно. Это связано с тем, что метод анализа нормальных мод не выходит за рамки квазигармонического приближения, а результаты его применения определяются силовыми константами и положениями частиц, т.е. зависят от структурных характеристик. Спектр VDOS, в свою очередь, получен напрямую из расчета динамики частиц, поэтому позволяет более точно описать вид спектра колебаний частиц в широком диапазоне температур.

На рис. 7 показаны спектры колебаний частиц VDOS(ω) в различных кольцах конечной системы. Частоты нормированы на среднее значение «плазменно-пылевой» частоты $\widetilde{\omega}_{pd}$. Наблюдается ограничение максимальной частоты спектра колебаний частиц величиной ω_{max} . Значение ω_{max} уменьшается с увеличением межчастичного расстояния.

Спектры колебаний частиц VDOS(ω) в различных кольцах конечной системы могут быть нормированы на локальную величину эйнштейновской частоты ω_E^{local} , которая зависит от локального значения межчастичного расстояния Δ_{local} . Для нормировки используются результаты расчета эйнштейновской частоты для однородных юкавовских систем из работы [47]. На рис. 8 показаны спектры колебаний частиц в различных кольцах конечной системы с описанной нормировкой на величину ω_E^{local} . При такой нормировке спектры ограничи



Рис. 6. Сравнение спектров колебаний всех частиц в конечной системе SPD(ω) (рис. 3) и VDOS(ω) (формула (8)) при двух значениях температуры: $\rightarrow T = 100$ K (A) и 300 K (B). Частоты нормированы на $\tilde{\omega}_{pd}$. Наблюдается схожесть положения характерных пиков, в особенности низкочастотного. Однако можно видеть различное поведение спектров в высокочастотной части. Видимая непрерывность спектров связана только со сглаживанием исходных дискретных спектров для наглядности

ваются приблизительно на одной и той же частоте ω_{max} , которая может быть оценена как

$$\omega_{max} \approx C \omega_E^{local},\tag{9}$$

где величина *C* не зависит от радиального расстояния.

Радиальный профиль максимальной частоты ω_{max} в различных безразмерных единицах представлен на рис. 9. Отметим, что величина С из выражения (9) приблизительно равна 1.5 в рассматриваемой в работе структуре. Величина $\widetilde{\omega}_E$ - среднее значение эйнштейновской частоты, рассчитанное для среднего значения межчастичного расстояния $\langle \Delta_{local} \rangle$ с использованием выражения из работы [47]. Причины ограничения максимальной частоты спектра обсуждаются в разд. 3 величина максимальной частоты ω_{max} тесно связана с межчастичным расстоянием в кольце и, соответственно, с радиальным расстоянием. Таким образом, неоднородность спектра колебаний частиц, определяющего динамические свойства системы, напрямую связана с неоднородностью структурных характеристик.



Рис. 7. (В цвете онлайн) Спектр колебаний частиц VDOS(ω) в областях конечной системы (синим цветом): центральной (А), промежуточной (В) и периферийной (С). Частоты нормированы на среднее значение «плазменнопылевой» частоты $\tilde{\omega}_{pd}$. Спектры ограничены величиной максимальной частоты $\omega_{max}/\tilde{\omega}_{pd}$, которая уменьшается с увеличением межчастичного расстояния. Оранжевой линии соответствует сглаженный для наглядности спектр

Как было отмечено выше, спектр колебаний частиц на рис. 6 состоит из двух пиков. Это можно связать с тем, что в структуре происходят колебательные процессы двух принципиально разных типов, которые можно сравнить с волнами сдвига (низкочастотный пик) и сжатия (высокочастотный пик) в «бесконечных» системах [35]. Сглаженные спектры на рис. 7 наглядно показывают, что наличие двух пиков в спектре выделенной подсистемы наблюдается при любом разбиении системы на кольца. Сохранение двух пиков в спектре колебаний позволяет сделать вывод о том, что на качественном уровне спектральные характеристики можно сопоставлять с бесконечным юкавовским кристаллом не только в конечной структуре целиком, но и в ее отдельных областях.

Амплитуда тепловых колебаний частиц может быть рассчитана по спектру колебаний частиц с применением низкотемпературного приближения теории динамики кристаллической решетки в каждом отдельном кольце конечной системы:

$$\langle u^2 \rangle = \frac{\mathbb{D}k_B T}{M} \left\langle \frac{1}{\omega^2} \right\rangle,$$
 (10)



ЖЭТФ, том **162**, вып. 6 (12), 2022

Рис. 8. (В цвете онлайн) Спектр колебаний частиц VDOS(ω) в областях конечной системы (синим цветом): центральной (А), промежуточной (В) и периферийной (С). Частоты нормированы на локальное значение эйнштейновской частоты ω_E^{local} . Спектры ограничены величиной максимальной частоты $\omega_{max}/\omega_E^{local}$, которая не зависит от радиального расстояния. Оранжевой линии соответствует сглаженный для наглядности спектр



Рис. 9. (В цвете онлайн) Приведенный к безразмерному виду радиальный профиль наивысшей доступной частоты колебаний частиц ω_{max} (см. рис. 5). Оранжевыми квадратами (■) обозначена величина $\omega_{max}/\tilde{\omega}_E$. Фиолетовыми звездами (★) обозначена величина $\omega_{max}/\tilde{\omega}_{pd}^{local}$. Зелеными ромбами (♦) обозначена величина $\omega_{max}/\tilde{\omega}_{pd}^{local}$. Штриховые линии проведены для наглядности



Рис. 10. Зависимости амплитуды тепловых колебаний частиц в конечной системе от безразмерного параметра экранирования $\kappa \Delta_{local}$. Круги (•) соответствуют RMSD (12), квадраты (**II**) соответствуют теоретической формуле (10), треугольники (**A**) обозначают результаты анализа нормальных мод (6). Штриховая линия соответствует аппроксимации $\langle u^2(r) \rangle \propto \Delta_{local}(r) \exp{(\kappa \Delta_{local}(r))}$ из работы [32]

где используется величина $\langle 1/\omega^2 \rangle$, полученная по спектру колебаний согласно следующему выражению [48, 49]:

$$\left\langle \frac{1}{\omega^2} \right\rangle = \frac{\int \text{VDOS}(\omega) \omega^{-2} \, d\omega}{\int \text{VDOS}(\omega) \, d\omega}.$$
 (11)

В некоторых случаях может быть более удобно провести расчет амплитуды тепловых колебаний как среднеквадратического отклонения частиц от их положений равновесия:

$$\langle u_i \rangle = \sqrt{\langle (\mathbf{r}_i(t) - \langle \mathbf{r}_i \rangle_t)^2 \rangle_t}.$$
 (12)

Результаты расчетов амплитуды тепловых колебаний заряженных частиц в ловушке, проведенных по формулам (6), (10) и (12), представлены на рис. 10. Показана неоднородность радиального профиля амплитуды тепловых колебаний. Наблюдается согласие предложенных методов расчета амплитуды тепловых колебаний как между собой, так и с теоретической оценкой из работы [32]:

$$\langle u^2(r) \rangle \propto \Delta_{local}(r) \exp\left(\kappa \Delta_{local}(r)\right).$$
 (13)

5. СРАВНЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОНЕЧНЫХ И БЕСКОНЕЧНЫХ СИСТЕМ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

С помощью приведенных в разд. 2 и 4 методов можно исследовать не только системы из конечного числа частиц в ловушке, но и однородные системы в периодических граничных условиях.

Предлагаемый локальный подход к описанию конечных систем позволяет сравнить с точки зрения динамических свойств различные области конечной системы с соответствующими им по плотности однородными системами в ПГУ. Структура из конечного числа частиц мысленно разбивается на участки с близкой к постоянной плотностью частиц. Каждая из полученных таким образом квазиоднородных подсистем сравнивается с однородной структурой в ПГУ (см. рис. 1). Это позволяет сделать выводы о границах применимости подхода к описанию конечных структур, который заключается в переносе хорошо изученных свойств систем в ПГУ на близкую к однородной внутреннюю область структур из конечного числа частиц.

5.1. Сравнение спектров колебаний частиц

На рис. 11 показан результат применения локального подхода к сравнению спектров колебаний частиц в конечной системе в ловушке со спектрами соответствующих по плотности однородных систем в ПГУ.

Особенности спектров колебаний частиц в конечной системе уже подробно описаны в разд. 3 и 4. В данном разделе мы отметим особенности спектров, проявляющиеся при сравнении систем из конечного числа частиц и однородных бесконечных систем в ПГУ.

Как в конечных структурах, так и в «бесконечных» системах спектр колебаний частиц ограничивается предельной частотой, причем величины ω_{max} имеют близкие друг к другу значения в обеих системах при одинаковом межчастичном расстоянии. Этот результат еще раз подчеркивает вывод о том, что максимальная частота колебаний частиц определяется минимальным межчастичным расстоянием в системе.

5.2. Сравнение амплитуд колебаний частиц

В настоящем разделе рассматриваются (а) центральная часть системы из конечного числа частиц и (б) система в ПГУ при той же плотности частиц. Двумерная постановка задачи требует исследования влияния числа частиц на величину амплитуды тепловых колебаний частиц, поскольку в двумерных системах наблюдается логарифмическая расходимость амплитуды тепловых колебаний по числу частиц [50–52]. Также отметим, что существенным



Рис. 11. (В цвете онлайн) Спектры колебаний частиц в выделенных подсистемах конечной системы (соответствуют буквам А, С) и соответствующих по плотности однородных системах (соответствуют буквам В, D). Частоты нормированы на локальное значение эйнштейновской частоты ω_E^{local} . Спектры ограничены величиной максимальной частоты ω_{max}^{local} . Спектр выделенной подсистемы с постоянной плотностью ограничивается приблизительно на той же частоте, что и соответствующая однородная система в ПГУ. Оранжевой линии соответствует сглаженный для наглядности спектр

отличием конечной системы от системы в ПГУ является отсутствие в последней удерживающей ловушки. В данном разделе проводится сравнение амплитуд тепловых колебаний частиц в близкой к однородной центральной области системы в ловушке и в системе в ПГУ.

Вопрос сравнения свойств конечной системы в ловушке и системы в ПГУ поднимался ранее [35,53, 54]. В работе [54] отмечено, что конечноразмерные эффекты в двумерной системе становятся незначительными с точки зрения влияния на структурные свойства при числе частиц в системе N > 50. При



 10^{4}

Number of particles in a whole system

 10^{5}

Рис. 12. Зависимость параметра Линдеманна $\sqrt{\langle u^2(r) \rangle} / \Delta_{local}$ от полного числа частиц в системе. Каждая точка соответствует отдельной системе. Закрашенные символы (•) соответствуют центральной области конечных систем в ловушке, светлые (\Box) — однородным структурам в ПГУ

10³

этом в центре конечной системы наблюдается гексагональная решетка, аналогичная решетке в структуре в периодических граничных условиях. В работе [53] сравнение конечной системы с системой в ПГУ проводится не только с точки зрения структурных свойств, но и с точки зрения упругих характеристик, в частности, модуля упругости. Выдвинуто предположение о том, что при числе частиц большем 3200 внутренняя область системы из конечного числа частиц может описываться с помощью теоретических представлений, существующих для систем в ПГУ. Этот результат получен для значений параметра экранировки потенциала из диапазона $0.2 < \kappa \Delta_{local} < 0.5$. В работе [35] отмечено сходство спектров колебаний частиц в конечной системе и в системе в ПГУ. Показано наличие в конечной системе колебательных процессов, аналогичных волнам сжатия и сдвига в «бесконечной» системе. Тем не менее полученные в приведенных работах результаты не позволяют разрешить вопрос о возможности переноса динамических свойств систем в ПГУ на конечные структуры в связи с ограниченностью рассмотренного диапазона числа частиц $N \leq 10^3$. В приведенных работах также не обсуждается вопрос обеспечения неизменного межчастичного расстояния в центре конечной системы. Этот вопрос имеет принципиальное значение, поскольку при увеличении числа частиц в конечной системе при постоянных Q, κ, α межчастичное расстояние в центральной области структуры монотонно уменьшается, что показано в работах [26, 30]. Таким образом, при увеличении числа частиц требуется уменьшать параметр ловушки α для обеспечения неизменности межчастичного расстояния в центральной области конечной структуры. При этом влияние ловушки на систему из конечного числа частиц уменьшается, и ее динамические свойства постепенно сходятся к свойствам системы в ПГУ.

На рис. 12 представлена зависимость параметра Линдеманна $\sqrt{\langle u^2 \rangle} / \Delta_{local}$ от полного числа частиц в системе. Величина параметра Линдеманна в конечной системе рассчитывается для центральной области, а в периодических граничных условиях — для всей системы. Как можно видеть из графика, амплитуда тепловых колебаний частиц в системе в ПГУ логарифмически растет с ростом числа частиц. Этот эффект подтверждается результатами работ [50–52]. В то же время амплитуда тепловых колебаний частиц в центре конечной системы монотонно уменьшается с ростом полного числа частиц в структуре. При значении числа частиц $N \approx 10^5$ величина амплитуды тепловых колебаний частиц в конечной системе сравнивается с величиной в системе в ПГУ в пределах ошибки расчета. Отметим, что структуры из 10⁵ частиц редко наблюдаются в лабораторных экспериментах [3]. Таким образом, перенос хорошо изученных свойств однородных систем в ПГУ на структуры из конечного числа частиц может приводить к заметным систематическим ошибкам при описании пылевой подсистемы в плазме в условиях лабораторного эксперимента.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе исследованы динамические свойства двумерной системы из конечного числа взаимодействующих по экранированному кулоновскому потенциалу одноименно заряженных частиц в ловушке: спектры, частоты и амплитуды тепловых колебаний частиц. Система рассматривается при сильной экранировке ($\kappa \Delta \gtrsim 1$).

Методом анализа нормальных мод показано пространственное распределение амплитуд колебаний частиц в различных модах. Сделан вывод о том, что в низкочастотные колебания вовлечены все частицы системы, в то время как высокочастотные колебания локализуются в области с наибольшей плотностью частиц. В рассматриваемой двумерной системе в параболической ловушке этой области соответствует центральная часть структуры.

Для обобщения результатов анализа нормальных мод на более широкий температурный диапазон проведено численное моделирование системы из конечного числа одноименно заряженных частиц в параболической электростатической ловушке методом классической молекулярной динамики. В локальном подходе рассмотрены спектры и амплитуды тепловых колебаний частиц. Показано, что от центра к краю структуры происходит смещение спектра колебаний частиц в низкочастотную область, что связано с увеличением межчастичного расстояния в системе от центра к краю. Неоднородность радиального профиля амплитуды тепловых колебаний частиц продемонстрирована как методом анализа нормальных мод, так и с помощью расчетов методом молекулярной динамики. Результаты расчетов величины амплитуды тепловых колебаний частиц различными методами согласуются друг с другом при низких температурах.

С помощью численного моделирования с применением локального подхода сравнивается центральная подсистема конечной структуры из заряженных частиц в ловушке и соответствующая ей по плотности «бесконечная» однородная система заряженных частиц в периодических граничных условиях. Даже при условии совпадения межчастичных расстояний при числе частиц меньшем 10⁵ наблюдается различие динамических свойств центральной подсистемы конечной структуры и соответствующей однородной системы в рассматриваемых условиях. Показано, что при малом числе частиц амплитуды тепловых колебаний частиц существенно различны в центре конечной системы в ловушке и в совпадающей с ней по плотности однородной системе в периодических граничных условиях. Таким образом, перенос динамических свойств однородных систем в периодических граничных условиях на системы из конечного и недостаточно большого числа частиц может приводить к ошибкам как при разработке теоретических моделей, так и при обработке экспериментальных результатов.

Финансирование. Работа В. С. Николаева была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС». Работа А. В. Тимофеева поддержана в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

ЛИТЕРАТУРА

- H. Yukawa, Proc. Phys.-Math. Soc. Jpn. 17, 48 (1935).
- 2. P. Pieranski, Contemp. Phys. 24, 25 (1983).

- **3.** V. E. Fortov and G. Morfill, *Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space*, CRC Press (2009).
- С. Н. Антипов, Э. И. Асиновский, А. В. Кириллин, С. А. Майоров, В. В. Марковен, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов, ЖЭТФ 133, 948 (2008).
- D. N. Polyakov, V. V. Shumova, and L. M. Vasilyak, Surf. Eng. Appl. Electrochem. 51, 143 (2015).
- V. N. Tsytovich, N. G. Gusein-Zade, and A. M. Ignatov, Plasma Phys. Rep. 43, 981 (2017).
- О. С. Ваулина, Э. А. Саметов, ЖЭТФ 154, 407 (2018).
- В. Е. Фортов, В. С. Филинов, А. П. Нефедов, О. Ф. Петров, А. А. Самарян, А. М. Липаев, ЖЭТФ 111, 889 (1997).
- В. Ю. Карасев, А. Ю. Иванов, Е. С. Дзлиева, А. И. Эйхвальд, ЖЭТФ 133, 460 (2008).
- 10. М. М. Васильев, Л. Г. Дьячков, С. Н. Антипов, О. Ф. Петров, В. Е. Фортов, Письма в ЖЭТФ 86, 414 (2007).
- О. С. Ваулина, Е. А. Лисин, А. В. Гавриков, . Ф. Петров, В. Е. Фортов, ЖЭТФ 137, 751 (2010).
- G. I. Sukhinin, A. V. Fedoseev, S. N. Antipov, O. F. Petrov, and V. E. Fortov, Phys. Rev. E: Stat., Nonlinear, Soft Matter Phys. 87, 013101 (2013).
- D. Samsonov, S. K. Zhdanov, R. A. Quinn, S. I. Popel, and G. E. Morfill, Phys. Rev. Lett. 92, 255004 (2004).
- 14. A. M. Ignatov, Plasma Phys. Rep. 31, 46 (2005).
- А. В. Филиппов, В. В. Решетняк, А. Н. Старостин, И. М. Ткаченко, В. Е. Фортов, Письма в ЖЭТФ 110, 658 (2019).
- **16**. Р. Е. Болтнев, ЖЭТФ **153**, 679 (2018).
- 17. O. S. Vaulina and X. G. Koss, Phys. Rev. E 92, 042155 (2015).
- О. С. Ваулина, И. И. Лисина, Е. А. Лисин, ЖЭТФ 148, 819 (2015).
- 19. M. O. Robbins, K. Kremer, and G. S. Grest, J. Chem. Phys. 88, 3286 (1988).
- 20. S. Hamaguchi, R. T. Farouki, and D. H. E. Dubin, J. Chem. Phys. 105, 7641 (1996).
- 21. S. Hamaguchi, R. T. Farouki, and D. H. E. Dubin, Phys. Rev. E 56, 4671 (1997).

- 22. D. N. Polyakov, V. V. Shumova, and L. M. Vasilyak, Plasma Sources Sci. Technol. 26, 08LT01 (2017).
- 23. T. S. Ramazanov, K. N. Dzhumagulova, A. N. Jumabekov, and M. K. Dosbolayev, Phys. Plasmas 15, 053704 (2008).
- 24. U. Konopka, G. E. Morfill, and L. Ratke, Phys. Rev. Lett. 84, 891 (2000).
- 25. D. N. Polyakov, V. V. Shumova, L. M. Vasilyak, and V. E. Fortov, Phys. Lett. A 375, 300 (2011).
- 26. C. Henning, H. Baumgartner, A. Piel, P. Ludwig, V. Golubnichiy, M. Bonitz, and D. Block, Phys. Rev. E 74, 056403 (2006).
- 27. C. Henning, P. Ludwig, A. Filinov, A. Piel, and M. Bonitz, Phys. Rev. E 76, 036404 (2007).
- 28. A. M. Ignatov, Plasma Phys. Rep. 46, 410 (2020).
- 29. N. P. Kryuchkov, Phys. Rev. Lett. 121, 075003 (2018).
- H. Totsuji, C. Totsuji, and K. Tsuruta, Phys. Rev. E 64, 066402 (2001).
- M.G. Hariprasad, P. Bandyopadhyay, G. Arora, and A. Sen, Phys. Plasmas 25, 123704 (2018).
- 32. V. S. Nikolaev and A. V. Timofeev, Phys. Plasmas 26, 073701 (2019).
- V. S. Nikolaev and A. V. Timofeev, Phys. Plasmas 28, 033704 (2021).
- 34. V. A. Schweigert and F. M. Peeters, Phys. Rev. B 51, 7700 (1995).
- 35. A. Melzer, Phys. Rev. E 7, 016411 (2003).
- 36. V. Nosenko and J. Goree, Phys. Rev. Lett. 93, 155004 (2004).
- 37. Z. Donkó, P. Hartmann, and J. Goree, Mod. Phys. Lett. B 21, 1357 (2007).
- 38. P. Hartmann, M. C. Sándor, A. Kovács, and Z. Donkó, Phys. Rev. E 84, 016404 (2011).
- 39. H. C. Lee, D. Y. Chen, and B. Rosenstein, Phys. Rev. E 56, 4596 (1997).
- 40. H. C. Lee and B. Rosenstein, Phys. Rev. E 55, 7805 (1997).
- 41. Б. А. Клумов, УФН 180, 1095 (2010).
- 42. A. Melzer, M. Klindworth, and A. Piel, Phys. Rev. Lett. 87, 115002 (2001).
- 43. L. Bonsall and A. A. Maradudin, Phys. Rev. B 15, 1959 (1977).

- 44. S. H. X. W. S. Nunomura, J. Goree, S. Hu, X. Wang, and A. Bhattacharjee, Phys. Rev. E 65, 066402 (2002).
- 45. Normal Mode Analysis: Theory and Applications to Biological and Chemical Systems, ed. by Q. Cui and I. Bahar, CRC press (2005).
- 46. P. Vashishta, R. K. Kalia, A. Nakano, and J. P. Rino, J. Appl. Phys. (Melville, NY, U. S.) 101, 103515 (2007).
- 47. S. Khrapak and B. Klumov, Phys. Plasmas 25, 033706 (2018).
- 48. D. A. Young and B. J. Alder, J. Chem. Phys. 60, 1254 (1974).

- 49. S. A. Khrapak, Phys. Rev. Res. 2, 012040 (2020).
- 50. Л. Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. V, *Статистическая физика*, ч. 1., Наука, Москва (1976).
- 51. S. Toxværd, Phys. Rev. Lett. 51, 1971 (1983).
- 52. N. D. Mermin, Phys. Rev. 176, 250 (1968).
- 53. T. E. Sheridan, Phys. Plasmas 14, 032108 (2007).
- 54. Yu. Ivanov and A. Melzer, Phys. Rev. B 79, 036402 (2009).

ФОРМИРОВАНИЕ ПУЧКОВ ИОНОВ ТИТАНА СУБМИЛЛИСЕКУНДНОЙ ДЛИТЕЛЬНОСТИ С ВЫСОКОЙ ИМПУЛЬСНОЙ ПЛОТНОСТЬЮ МОЩНОСТИ

А. И. Рябчиков^а, В. П. Тараканов^{b,c}, О. С. Корнева^{а*}, Д. О. Сивин^а

^а Национальный исследовательский Томский политехнический университет 634050 Томск, Россия

^b Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» 115409, Москва, Россия

^с Объединенный институт высоких температур Российской академии наук 125412, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 29 июня 2022 г., после переработки 5 июля 2022 г. Принята к публикации 6 июля 2022 г.

Представлены результаты численного моделирования и экспериментальных исследований по формированию импульсных и импульсно-периодических высокоинтенсивных пучков ионов металлов из плазмы вакуумной дуги. Численное моделирование выполнено с использованием кода КАРАТ. Исследовалась баллистическая фокусировка тяжелых ионов при токах инжекции от 0.1 до 1 А. Изучено влияние плотности ионного тока, ускоряющего напряжения и условий нейтрализации пространственного заряда пучка на транспортировку и фокусировку пучка ионов высокой плотности мощности. Определены и изучены условия возникновения виртуального анода. Установлено, что при больших длительностях формирования пучков ионов при низких давлениях остаточной атмосферы возможно многократное возникновение и исчезновение виртуального анода. Экспериментально показана возможность баллистического формирования очищенных от микрокапельной фракции пучков ионов титана субмиллисекундной длительности с импульсной плотностью мощностью в сотни киловатт на квадратный сантиметр.

DOI: 10.31857/S0044451022120203 **EDN:** LFKHGX

1. ВВЕДЕНИЕ

Импульсные мощные пучки заряженных частиц и плазменные потоки находят все большее применение для модификации свойств различных материалов и покрытий [1–17]. Новые методы высокоинтенсивной имплантации с применением пучков ионов низкой энергии, но высокой плотности мощности [18–20] демонстрируют возможность ионного легирования материалов на глубинах в десятки микрометров при флюенсах ионного облучения $10^{19}-10^{21}$ ион/см². Преимущества метода, обеспечивающего глубокое ионное легирование материалов в ряде перспективных применений, нивелируются нагревом всего образца до высоких температур, при которых наблюдается ухудшение микроструктуры материала из-за значительного роста зерна. В работе [21] описан новый метод, нацеленный на решение этой проблемы. Сущность метода заключается в использовании для высокоинтенсивной имплантации пучков ионов субмиллисекундной длительности с плотностью мощности от десятков до нескольких сотен киловатт на квадратный сантиметр. Импульснопериодическая имплантация с использованием таких ионных пучков может обеспечить импульсный разогрев локальной области вблизи поверхности с последующим быстрым отводом тепла внутрь материала мишени. Таким образом, достигается высокая температура в ионно-легируемом слое и одновременно исключается наличие высокой температуры во всем объеме облучаемого материала. Высокая температура и высокая плотность ионного тока способствуют радиационно-усиленной диффу-

^{*} E-mail: oskar@tpu.ru

зии имплантируемых атомов, обеспечивая ионное легирование материала на глубинах, существенно превышающих проективный пробег ионов. Эффект высокоскоростного охлаждения приноверхностного слоя будет способствовать улучшению микроструктуры ионно-легированного слоя. Высокая плотность ионного тока, значительная длительность импульсов и частотный режим формирования импульсов должен обеспечить высокую скорость набора флюенса ионного облучения, необходимого для глубокого ионного легирования материалов.

Настоящая статья посвящена численному моделированию и экспериментальному исследованию формирования мощных пучков ионов металлов субмиллисекундной длительности, на примере ионов титана, из плазмы вакуумной дуги, с импульсной плотностью мощностью до ста киловатт на квадратный сантиметр.

2. МЕТОДИКИ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

Для детального понимания всех процессов и построения целостной модели был проведен комплекс исследований с помощью численного моделирования посредством кода КАРАТ [22, 23]. Основой кода является решение уравнений Максвелла или, как в данном исследовании, когда можно ограничиться потенциальной моделью, уравнения Пуассона. Плотность тока или заряда вычисляется методом крупных частиц — методом PiC (Particle in Cell). Для разных сортов частиц используем разные сорта РіС-частиц, чтобы отследить роль ионов и электронов, имеющих различное происхождение. В описываемой серии расчетов масса ионов выбрана $10^5 m$, где *m* — масса электрона. Число узлов сетки в каждом направлении не меньше 100, и всегда шаг сетки значительно меньше любого характерного размера системы. Число частиц каждого сорта не меньше 10-100 в каждой ячейке в важных физически областях системы. Контролируется баланс энергии в системе.

Исследовалась плазменно-иммерсионная система формирования, впервые экспериментально апробированная для получения баллистическисфокусированных импульсно-периодических пучков ионов металлов с плотностью тока до 1 А/см² при амплитудах потенциала смещения до 3 кВ [18].

Исходя из конструкции реального устройства, при моделировании рассмотрены три области. Во-

первых, область формирования потока ионов из плазмы дугового разряда, с характерной особенностью в виде высокой плотности плазмы, во-вторых, область прохождения потока ионов сквозь сферическую сетку и, в-третьих, область баллистической фокусировки ускоренных ионов на мишеньколлектор в различных условиях динамической компенсации и декомпенсации пространственного заряда ионного пучка. Для упрощения получения результатов первоначально отдельно рассматривалась каждая из этих областей.

Экспериментальные исследования проводились на комплексной установке для ионно-лучевой и ионно-плазменной обработки материалов [24]. Формирование импульсных и импульсно-периодических пучков ионов титана осуществлялось с использованием модифицированного источника ионов и плазмы «Радуга 5» [25]. Система питания импульсного трансформатора была модернизирована таким образом, чтобы формировать пучки ионов различной длительности в диапазоне от 150 до 500 мкс. Плазменный поток формировался непрерывным вакуумно-дуговым разрядом с током дуги 160 А. Для очистки плазмы от микрокапельной фракции вместо плазменного фильтра жалюзийного типа была использована система «солнечного затмения» впервые предложенная в работе [18].

Для формирования пучка ионов с высокой импульсной плотностью мощности использовалась фокусирующая система, представляющая собой сеточный электрод в виде части сферы радиусом 120 мм с эквипотенциальным пространством для транспортировки и фокусировки ионного пучка. В экспериментах использовались три сеточных электрода с различными размерами ячеек: 0.5×0.5 , 1×1 и 1.4 × 1.4 мм². Дисковый электрод, препятствующий прямому пролету микрочастиц, продуктов взрывной электронной эмиссии, с рабочей поверхности катода в область фокусировки пучка, устанавливался по центру фокусирующего электрода. Экстракция ионов осуществлялась со свободной границы металлической плазмы, генерируемой дуговым разрядом при потенциалах смещения анода в диапазоне от 9 до 30 кВ.

В процессе экспериментов проводились измерения ускоряющего напряжения, тока на сеточный электрод, тока ионного пучка и полного тока генератора импульсов напряжения. Для измерения распределения плотности ионного тока по сечению фокусируемого ионного пучка использовались шесть радиально установленных коллекторов площадью 2×2 мм². В процессе исследований изменялась

амплитуда импульсного напряжения, длительность импульса. Импульс ионного тока пучка отличался значительной высокочастотной модуляцией. Это затрудняло оценку реальной амплитуды тока и ее плотности и, как следствие, достигаемой плотности мощности в ионном пучке. В этой связи для увеличения точности измерения амплитуды тока использовалось математическое сглаживание. В отдельных случаях применялось усреднение импульсов тока и напряжения по 15–25 осциллограммам с использованием математического аппарата осциллографа LeCroy.

3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ПУЧКОВ ИОНОВ ИЗ ПЛАЗМЫ

Источником ионов в экспериментах была плазма вакуумной дуги. Моделирование выполнялось в осесимметричном приближении в цилиндрической rz-геометрии. С границы первой области, соответствующей границе плазмы, задавался поток ионов с определенной плотностью тока. Одна из особенностей плазмы вакуумной дуги состоит в наличии у ионов значительной начальной энергии направленного движения. При моделировании начальная энергия направленного движения ионов задавалась равной 50 эВ. Одновременно с ионами запускался поток электронов, скорость которых совпадала со скоростью ионов. Таким образом, осуществлялась инжекция нейтрализованного по заряду потока частиц. На рис. 1 область инжекции совпадает с левой границей z = 0. На сферический электрод подается потенциал смещения отрицательной полярности, который обеспечивает ускорение ионов до нужной энергии в пределах 3-30 кэВ. При подлете частиц к электроду электронный поток тормозится, а ионы ускоряются в формирующемся слое разделения зарядов. На рис. 1а изображены векторы скорости небольшой части используемых в моделировании РіС-ионов. Видно, как поток ускоренных ионов проникает в эквипотенциальное пространство баллистической фокусировки через сетчатый электрод. На рис. 16 изображены электроны, между которыми и этим электродом имеется зазор, в котором ускоряются ионы. Их энергия соответствует потенциалу сетки. Первоначально проведено моделирование влияния отдельных элементов, а в завершении рассмотрена общая задача со всеми элементами.



Рис. 1. (В цвете онлайн) Расчетная область: *а* — поле скоростей ионов; *б* — поле электронов

4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОХОЖДЕНИЯ ИОННОГО ПУЧКА СКВОЗЬ СЕТКУ

Вторая область, с прохождением ионов сквозь сетку, моделируется в плоской xz-геометрии. Диаметр круглых проволок равен 0.01 см. Искажение формы и направления векторов скорости частиц связано с разными масштабами по осям x и y. Поток плазмы, состоящей из ионов и электронов, направления лен вдоль направления -x (рис. 2).

На рис. 2a изображены точками ионы и электроны. При данных параметрах электроны не продвигаются в область x < 1.5 см. Между сеткой и электронами область ускорения ионов. На рис. 2b для части счетной области изображены только ионы. Видно, как часть ионов поглощается на проволоках, а прошедшие ионы отклоняются электрическим полем



Рис. 2. (В цвете онлайн) Положение электронов и ионов на счетной области: *a*) зеленые точки — макрочастицы, моделирующие электроны, желтые точки — ионы; *б*) поле скоростей ионов на счетной части

проволок. Возникающая величина разброса учитывается на следующем этапе исследования. Наличие экстрактора ионов с сеточной структурой усложняет процесс моделирования. В то же время, поскольку моделируются процессы транспортировки и фокусировки пучка ионов с начальной плотностью, не превышающей 10 мА/см², при ускоряющих напряжениях в диапазоне от 3 до 30 кВ ширина слоя разделения зарядов (ускоряющий зазор) многократно превышает характерный размер ячеек сеточного электрода. Это означает, что тонкая структура сетки оказывает незначительное влияние на траектории отдельных ионов. Существенное влияние сетки связано с ее прозрачностью, от которой зависят потери ионного пучка на элементах сеточного электрода. Значительное влияние на динамику фокусировки и транспортировки ионного пучка может оказывать размер ячеек сетки. Через ячейки сетки

электрическое поле ускоряющего зазора проникает в пространство дрейфа ионного пучка на расстояние, сравнимое с размером ячейки. Это проникновение нарушает эквипотенциальность пространства и способствует формированию канала утечки электронов в ускоряющий зазор, влияя, таким образом, на декомпенсацию пространственного заряда пучка. Эти процессы не моделируются в рамках данной статьи.

5. МОДЕЛИРОВАНИЕ БАЛЛИСТИЧЕСКОЙ ФОКУСИРОВКИ ПУЧКОВ ИОНОВ

Рассмотрим третью область, область фокусировки. Моделирование выполнено в осесимметричном приближении в *rz*-геометрии. Нормально поверхности сферы внутрь инжектируется поток ионов. В реальном эксперименте для исключения прямого пролета микрочастиц вещества из области вакуумной дуги в область фокусировки ионного пучка центральная часть сетки закрыта сплошным дисковым электродом. В моделировании этому соответствует отсутствие инжекции ионов вблизи оси.

Данная работа имеет своей целью обеспечить на коллекторе-мишени многократное увеличение плотности мощности и энергии ионного пучка. Для достижения этой цели используется сеточный электрод в виде сферы радиусом r, предназначенный для фокусировки ионов в центр сферы, где установлен коллектор. Это мы называем баллистической фокусировкой ионов [18].

В моделировании в качестве первого шага исследовалась транспортировка и фокусировка ионного пучка в условиях вакуума, т.е. при отсутствии нейтрализации его пространственного заряда. При инжекции пучка ионов с током 0.01 А, что соответствовало начальной плотности тока $4 \cdot 10^{-4} \text{ A/cm}^2$, ионный пучок неплохо фокусируется, хотя из-за действия пространственного заряда профиль пучка в фокальной области оказывается размытым. По оси пучка плотность ионного тока в фокусе возрастает до 0.035 A/см², т.е. увеличивается почти на два порядка. Однако плотность мощности такого пучка не превышает 2.5 kBr/cm^2 , что не обеспечивает возможности реализации синергии высокоинтенсивной имплантации ионов и одновременного его энергетического воздействия на поверхность в соответствии с методом, предложенным в работе [21].

Поэтому в целях изучения возможности достижения более высоких плотностей мощности в ионном пучке и с учетом создания различных условий для компенсации его пространственного заряда исследованы закономерности транспортировки и фокусировки потока ионов с током инжекции 1 А, что соответствовало начальной плотности тока около $4\cdot 10^{-3}~{\rm A/cm^2}.$

Первоначально исследовалась инжекция такого тока ионов с энергией 30 кэВ. При этих параметрах в условиях вакуума, как видно на рис. 3, действие пространственного заряда пучка приводит к возникновению виртуального анода и срыву транспортировки пучка. На рис. 3a изображена геометрия счетной области и векторы скорости ионов. На рис. 36 представлено распределение потенциала. В некоторой области амплитуда потенциала достигает значения равного амплитуде ускоряющего потенциала. Это область виртуального анода. Видно, что на виртуальном аноде ионы рассеиваются. На рис. 36изображена плотность тока на коллекторе, свидетельствующая, что никакой фокусировки не происходит.

6. МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТИРОВКИ И ФОКУСИРОВКИ ИОННОГО ПУЧКА В УСЛОВИЯХ НЕЙТРАЛИЗАЦИИ ПРОСТРАНСТВЕННОГО ЗАРЯДА

При значениях тока, интересных для практических приложений, как видим из последнего варианта, электрическое поле пучка ионов вызывает их дефокусировку. Улучшению фокусировки должно способствовать создание условий для частичной или полной нейтрализации пространственного заряда ионного пучка, что можно обеспечить достаточным количеством электронов внутри ионного потока различными способами. Во-первых, в пространство дрейфа пучка может быть предварительно инжектирована плазма. Во-вторых, для наработки дополнительной плазмы может быть использована ионизация газа в области дрейфа ионного пучка. В-третьих, источником электронов может быть вторичная эмиссия электронов при попадании ионов на мишень. Дополнительные электроны могут создаваться и с помощью дополнительного термоэмиттера. При численном моделировании есть возможность раздельно рассмотреть влияние различных факторов.

Начнем с рассмотрения влияния наличия, в начальный момент, внутри дрейфовой области плазмы с плотностью $3 \cdot 10^9$ см⁻³. Ионы плазмы моделируются PiC-частицами сорта r, отличного от пучковых ионов y.



Рис. 3. (В цвете онлайн) Результаты моделирования процессов при инжекции ионного пучка с током 1 А, энергией ионов 30 кэВ в вакуум: *a* — векторы скоростей ионов; *б* распределение потенциала в пространстве дрейфа пучка; *в* — распределение плотности тока по сечению пучка

На рис. 4*a* изображена динамика изменения числа частиц, а именно, r — число ионов плазмы, g число электронов плазмы, y — число ионов пучка. К 100 мкс система достигла стационарного состояния, в котором ионы плазмы покинули счетную область, а часть электронов (рис. 4*6*) оказалась захвачена в потенциальное поле ионного потока (рис. 4*6*). Потенциал достигает 20 кВ (рис. 4*г*), т.е. виртуальный анод не образуется. Плотность тока ионов на коллекторе (рис. 4*d*) увеличилась в сравнении с предыдущим случаем с 12 мA/см² до 0.2 A/см².

В следующем варианте добавляем ионизацию газа, в качестве которого выбран азот плотностью 10^{12} см⁻³. Учитываются процессы упругого рассеяния электронов на нейтральных частицах и ионизация атомов электронами, ускоренными в поле потока ионов. Используются сечения ионизации, представленные в справочнике [26]. Возникающие ионы сорта r дрейфуют на стенки, а возникающие электроны сорта c компенсируют заряд ионов пучка сорта y. Также была рассмотрена ионизация ионами пучка с сечением $5 \cdot 10^{-16}$ см² [27], которая не оказала влияния на процесс фокусировки.

На рис. 5a представлена динамика изменения числа разных частиц. Теперь в стационарном состоянии заряд ионов пучка компенсируют электроны сорта c, а электроны начальной плазмы g ушли на стенки. Потенциал (рис. 5e) уменьшился до 12 кВ. Плотность тока на коллекторе изменилась незначительно (рис. 5e). Рисунки 5b и 5e демонстрируют, что хотя и достигается достаточно высокая плотность ионного тока по оси пучка, его фокусировка еще не оптимальна.

Следующий вариант оценивает только вклад вторичной эмиссии электронов сорта b с поверхности коллектора, эмитируемых после попадания ионов пучка y. Коэффициент вторичной эмиссии выбран равным 1 [28]. По данным рис. 6a видно, что система быстро выходит на стационар. Потенциал не больше 800 В (рис. 6a). Пучок хорошо фокусируется (рис. 6b). Плотность ионного тока пучка на коллекторе приближается к 3 А/см² (рис. 6s).

В следующем варианте исследовано действие всех рассматриваемых эффектов компенсации заряда ионов, а именно, наличие начальной плазмы, ионно-электронная эмиссия, ионизация нейтрального газа. По данным рис. 7*a* видно, что система к 10 нс достигает стационарного состояния, в котором ионы пучка сорта *y* компенсируются вторичными электронами сорта *b*, а продукты ионизации газа сортов *p* и *c* компенсируют по заряду друг друга. Потенциал в области фокусировки не превышает 50 В (рис. 7*e*). Плотность пучка на коллекторе оказывается максимальной (рис. 7*e*) и превышает 3 A/cm^2 .

Таким образом, совместное влияние всех реальных физических процессов компенсации заряда ионного пучка обеспечивает наибольшую плотность тока ионов на мишени. Максимальная плотность



Рис. 4. (В цвете онлайн) Влияние предварительной инжектированной в пространство дрейфа плазмы с плотностью $3 \cdot 10^9$ см⁻³ на характеристики ионного пучка: a — динамику изменения плотности электронов (g), ионов плазмы (r) и ионов пучка (y); δ — векторы скоростей ионов в пространстве дрейфа; e — распределение электронов в пространстве дрейфа; e — распределение потенциала; ∂ —

распределение плотности ионного тока





Рис. 5. (В цвете онлайн) Моделирование влияния инжектированной плазмы и ионизации газа (азота) на характеристики ионного пучка: a — динамику изменения плотности электронов (g) и ионов (r) инжектированной плазмы, электронов (c) и ионов (p) плазмы ионизованного газа и ионов пучка (y); δ — векторы скоростей ионов в пространстве дрейфа; e — распределение потенциала; e — распределение плотности ионного тока

Рис. 6. (В цвете онлайн) Моделирование влияния вторичной эмиссии электронов на характеристики ионного пучка: a — динамику изменения плотности эмитированных электронов (b) и ионов пучка (y); δ — векторы скоростей ионов в пространстве дрейфа; e — распределение потенциала; e — распределение плотности ионного тока по сечению пучка



Рис. 7. (В цвете онлайн) Моделирование совместного влияния инжектированной плазмы, ионизации газа и ионноэлектронной эмиссии на характеристики ионного пучка: a — динамику изменения плотности электронов (g)и ионов инжектированной плазмы (r), электронов (c) и ионов плазмы ионизованного газа (p) и ионов пучка (y), эмитированных электронов (b); б — векторы скоростей ионов в пространстве дрейфа; e — распределение потенциала; e — распределение плотности ионного тока

мощности ионного пучка в этом случае достигает 100 к $\rm Bt/cm^2.$

В реальном эксперименте учтенные физические эффекты проявляются всегда и их невозможно отключить. Перейдем к рассмотрению влияния физических параметров, которые реально меняются в эксперименте. В первую очередь, это энергия ионов при влете в пространство фокусировки.

Уменьшим начальную энергию с 30 до 10 кэВ. Как следует из данных численного моделирования, представленных на рис. 8, уменьшение энергии с 30 до 10 кэВ не приводит к качественным изменениям. Ионный поток фокусируется на коллекторе, виртуальный анод не возникает, и максимальная плотность ионного тока на коллекторе превышает 3 A/см².

Уменьшение энергии ионов с 10 до 3 кэВ приводит к драматическому изменению процессов в системе. Представленные истории потенциала в точке внутри пространства дрейфа и истории числа частиц показывают, что система не выходит на стационар (рис 9).

В ней возникают осцилляции с периодом около 40 мкс. Характерная особенность этих колебаний при выбранных параметрах состоит в том, что в течение примерно половины периода существует виртуальный анод. Из-за накопления электронов он разрушается, пучок ионов доходит до коллектора и одновременно снова начинает нарастать плотность ионов. Виртуальный анод вновь формируется. Следующий рис. 10 соответствует времени существования виртуального анода, когда поток ионов рассеивается и плотность тока ионов на коллекторе мала. На рис. 10 показаны распределения потенциала, скоростей ионов и плотности ионного тока.

На рис. 11 приведены данные, соответствующие отсутствию виртуального анода, когда потенциал в области виртуального анода снижается и ионы доходят до коллектора, но их фокусировка плохая. Максимальная плотность тока в пучке в этом случае не превышает 80 мA/см².

7. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ПУЧКОВ ИОНОВ ТИТАНА ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТИ МОЩНОСТИ

Первоначально были проведены эксперименты с сеточным электродом радиусом 120 мм с размером ячейки $0.5 \times 0.5 \text{ мm}^2$ при токе непрерывного дугового разряда 160 А. Этот ток в конкретных



Рис. 8. (В цвете онлайн) Моделирование совместного влияния инжектированной плазмы, ионизации газа и ионноэлектронной эмиссии на характеристики ионного пучка с энергией ионов 10 кэВ: a — динамику изменения плотности электронов (g) и ионов (r) инжектированной плазмы, электронов (c) и ионов плазмы ионизованного газа (p) и ионов пучка (y), эмитированных электронов (b); б — векторы скоростей ионов в пространстве дрейфа; e — распределение потенциала; e — распределение плотности ионного тока



Рис. 9. (В цвете онлайн) Моделирование совместного влияния инжектированной плазмы, ионизации газа и ионноэлектронной эмиссии на характеристики ионного пучка с энергией ионов 3 кэВ: a — динамику изменения потенциала в пространстве дрейфа во времени; б — динамику изменения плотности электронов инжектированной плазмы (g), ионов инжектированной плазмы (r), электронов плазмы ионизованного газа (c), ионов плазмы ионизованного газа (p) и ионов пучка (y), эмитированных электронов (b)

условиях эксперимента обеспечивал плазму титана вблизи сеточного электрода с плотностью ионного тока насыщения около 4 мА/см². Одиночные осциллограммы импульса тока фокусируемого ионного пучка демонстрируют значительную модуляцию амплитуды в течение всей длительности импульса (рис. 12). Эта модуляция обусловлена как закономерностями эмиссии ионов из катодного пятна вакуумно-дугового разряда, впервые описанными в работе [29], так и особенностями процессов формирования и транспортировки высокоинтенсивного пучка ионов.

Характерные осциллограммы импульса напряжения, полного тока высоковольтного трансформатора и плотности ионного тока в фокальной области по оси пучка, усредненные по 15 импульсам, пред-



Рис. 10. (В цвете онлайн) Распределение потенциала (*a*), скоростей ионов в пространстве дрейфа (*б*) и плотности ионного тока на коллекторе (*в*) в момент существования виртуального анода

ставлены на рис. 13. На усредненных осциллограммах значительная модуляция многократно уменьшается, что позволяет достаточно точно определять амплитуду импульсов.

Результаты исследования влияния ускоряющего напряжения на распределение плотности ионного тока по сечению пучка демонстрирует рис. 14. При амплитуде потенциала анода и, соответственно, потенциала плазмы 9 кВ плотность ионного тока в максимуме достигает около 2.75 A/см². Распределе-



Рис. 11. (В цвете онлайн) Распределение потенциала (а), скоростей ионов в пространстве дрейфа (б) и плотности ионного тока на коллекторе (в) при отсутствии виртуального анода

ние плотности тока по сечению оказывается достаточно узким. Ширина пучка на полувысоте не превышает 5 мм. Дальнейшее увеличение напряжения до 16 кВ приводит к росту максимальной плотности тока до 3.25 A/см². Заметим, что с учетом многозарядового состава титановой плазмы непрерывной вакуумной дуги [30, 31] средняя энергия ионов титана в этом случае будет около 30 кэВ, что соответствует максимальной энергии, использованной при численном моделировании. При этом наблюда-



Рис. 12. Осциллограмма импульса тока, полученная при амплитуде ускоряющего напряжения 20 кВ



Рис. 13. Осциллограммы плотности ионного тока в фокальной области по оси пучка, импульса напряжения и полного тока высоковольтного трансформатора, усредненные по 15 импульсам

ется незначительное уширение распределения плотности тока по сечению пучка. Характерно, что при дальнейшем увеличении напряжения до 30 кВ достигается плотность мощности около 100 кВт/см², хотя максимальная амплитуда тока в центре пучка немного уменьшается, а ширина пучка на полувысоте возрастает.

Такое поведение распределения плотности ионного тока может быть связано с особенностями процессов нейтрализации заряда ионного пучка в пространстве дрейфа. Первоначально при экстракции ионов и их инжекции в пространство дрейфа эффективная нейтрализация заряда пучка осуществляется за счет предварительно инжектированной в пространство дрейфа вакуумно-дуговой плазмы. Время нейтрализации определяется уходом ионов плазмы из пучка. Как показали результаты численного моделирования в рамках данной статьи, как и при формировании высокоинтенсивных пучков ионов металлов низкой энергии [14], это время не превышает нескольких микросекунд. На первом этапе в результате ускорения ионов их плотность в пучке на входе в пространство дрейфа почти на порядок меньше плотности электронов в плазме. Это обеспечивает хорошую степень нейтрализации заряда пучка ионов как вблизи сеточного электрода, так и на значительном расстоянии в пространстве дрейфа при его фокусировке с пропорциональным увеличением плотности ионов. Однако после того как вблизи сеточного электрода формируется слой разделения заряда, в котором происходит ускорение ионов, поступление плазмы, обеспечивающей поставку электронов в пространство дрейфа, прекращается. Рост числа электронов в случае формирования длинных импульсов, как показало численное моделирование, возможен преимущественно за счет ионно-электронной эмиссии с элементов конструкции системы формирования пучка, а также благодаря формированию плазмы за счет ионизации атомов остаточной атмосферы.

Исследования влияния длительности импульса ускоряющего напряжения при амплитуде 22 кВ на максимальную плотность ионного пучка не выявило значительных особенностей. На рис. 15 представлены одиночные осциллограммы импульсов тока при длительностях от 150 до 500 мкс. Можно отметить, что увеличение длительности импульсов сопровождается постепенным уменьшением амплитуды тока, что предположительно связано с постепенным ухудшением условий нейтрализации пространственного заряда пучка и его дефокусировкой.

Использование сеточного электрода радиусом 120 мм с размером ячейки 1 × 1 мм² повлияло на закономерности транспортировки и фокусировки пучка ионов титана. При ускоряющем напряжении около 16 кВ полный ток трансформатора возрастал до 3 А.



Рис. 14. (В цвете онлайн) Распределения плотности ионного тока по сечению пучка для системы формирования с сеточным электродом радиусом 120 мм с размером ячейки $0.5 \times 0.5 \text{ мм}^2$ при токе непрерывного дугового разряда 160 А при ускоряющих напряжениях в диапазоне от 9 до 30 кВ



Рис. 15. (В цвете онлайн) Одиночные осциллограммы импульсов тока при длительностях от 150 до 500 мкс при амплитуде ускоряющего напряжения 22 кВ

Осциллограммы, демонстрирующие изменение плотностей токов на трех коллекторах, расположенных на расстоянии 2.5 мм друг от друга, показали, что плотность тока на них оставалась примерно одинаковой с незначительной модуляцией в течение импульса (рис. 16). Увеличение ускоряющего напряжения до 25 кВ сопровождалось некоторым увеличением модуляции, как показано на рис. 17. В этом



Рис. 16. Осциллограммы плотности ионного тока на коллекторах в центре пучка при амплитуде ускоряющего напряжения 16 кВ



Рис. 17. Осциллограммы плотности ионного тока на коллекторах в центре пучка при амплитуде ускоряющего напряжения 25 кВ

случае плотность тока на центральном коллекторе драматично уменьшается. Значительное уменьшение плотности тока имеет место и на втором коллекторе. Такая динамика изменения распределения плотности ионного тока по сечению пучка при увеличении ускоряющего напряжения может быть объяснена ухудшением нейтрализации пространственного заряда пучка. Система фокусировки и транспортировки пучка в исходном состоянии представляет собой эквипотенциальное пространство. Однако, как показали представленные выше результаты численного моделирования, электроны плазмы, компенсирующие пространственный заряд ионов, могут уходить из пучка из-за их разогрева в динамически изменяющихся электрических полях пучка.

Важно отметить еще один канал ухода электронов из пучка. Наличие сеточного электрода нарушает условие эквипотенциальности пространства дрейфа и открывает возможность ухода электронов в ускоряющий зазор. Электрическое поле ускоряющего зазора проникает в пространство дрейфа через ячейки сетки и осуществляет экстракцию электронов, ухудшая тем самым нейтрализацию пространственного заряда пучка. Увеличение амплитуды ускоряющего напряжения может сопровождаться интенсификацией ухода электронов из пространства дрейфа, что должно привести к ухудшению условий фокусировки ионного пучка.

Аналогичная закономерность формирования высокоинтенсивного пучка ионов наблюдалась с сеточным электродом радиусом 65 мм с размером ячейки 1.4×1.4 мм². При ускоряющем напряжении 5 кВ импульсы тока на коллекторах имели максимум плотности тока в центре с амплитудой до 0.7 A/см². При увеличении амплитуды ускоряющего напряжения до 25 кВ плотность ионного тока уменьшалась почти до нуля, а на втором и третьем коллекторах от оси пучка осциллограммы показывали плотности тока до 0.25 A/см² с периодической модуляцией до нуля в течение всей длительности импульса.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Численное моделирование в потенциальном приближении формирования пучков тяжелых ионов металлов из плазмы вакуумной дуги с плотностью мощности до 100 кВт/см² выполнено посредством кода КАРАТ. Промоделированы формирование потока ионов из плазмы, прохождение его сквозь потенциальную металлическую сетку. Исследована баллистическая фокусировка ионов при начальной плотности тока до 4 мА/см². Изучено влияние величины ионного тока от 0.1 до 1 А, энергии ионов от 3 до 30 кэВ и условий нейтрализации пространственного заряда пучка на транспортировку и фокусировку пучка ионов высокой импульсной мощности. Определены и изучены условия возникновения виртуального анода. Установлено, что при больпих длительностях формирования пучков ионов при низких давлениях остаточной атмосферы и низкой энергии возможно многократное возникновение и исчезновение виртуального анода.

Впервые экспериментально показано, что применение непрерывного вакуумно-дугового разряда с током до 160 А в сочетании с аксиальносимметричной фокусирующей системой в виде сеточного электрода обеспечивает возможность формирования пучка ионов титана с плотностью мощности, приближающейся к 100 кВт/см², с субмиллисекундной длительностью импульса. Показана возможность генерации импульсных пучков ионов высокой плотности мощности с длительностью в диапазоне от 150 до 500 мкс. Установлено, что размеры ячеек фокусирующего электрода существенно влияют на динамику нейтрализации пространственного заряда ионного пучка и, как следствие, на его фокусировку и транспортировку. Показано, что при определенных условиях распределение плотности ионного тока по сечению пучка трансформируется и сплошной пучок становится полым.

Финансирование. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00051, https://rscf.ru/project/22-19-00051/

ЛИТЕРАТУРА

- J.M. Poate, G. Foti, and D. C. Jacobson, Surface Modification and Alloying by Laser, Ion, and Electron Beams, Springer, Berlin (2013).
- D. Wang Y. Yang, T. Guoet et al., Sol. Energy 213, 118 (2021).
- 3. J.Huang, Optik 226, 165437 (2021).
- Y. Li, Y. Wu, W. Wang et al., Surf. Coat. Technol. 405, 126567 (2021).
- A. I. Ryabchikov, V.S. Skuridin, E.V. Nesterov et al., Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B 213, 364 (2004).
- V. A. Shulov, A. G. Paikin, D. A. Teryaev et al., Inorganic Mater., Appl. Res. 4, 189 (2013).
- Б. А. Коваль, Г. А. Месяц, Г. Е. Озур и др., в сб. Сильноточные импульсные электронные пучки в технологии, Наука, Новосибирск (1983), с. 26.
- G. E. Ozur and D. I. Proskurovsky, Plasma Phys. Rep. 44, 18 (2018).

- M. Vorobyov, A. Teresov, P. Moskvin et al., J. Phys.: Conf. Ser. 1393, 012141 (2019).
- M. Kaikanov, A. Kozlovskiy, A. Abduvalov et al., J. Mater. Sci., Mater. Electron. 30, 15724 (2019).
- X. Kuang, L. Li, L. Wang et al., Surf. Coatings Technol. 374, 72 (2019).
- A. I. Ryabchikov, S. V. Dektyarev, O. S. Korneva et al., Proc. 7th Int. Congr. Energy Fluxes. Radiat. Effects, EFRE (2020), 9242058.
- D. J. Rej, H. A. Davis, and J. C. Olson, J. Vac. Sci. Technol. A 15, 1089 (1997).
- V. A. Shulov, N. Nochovnaya, G. Remnev et al., Surf. Coat. Technol. 99, 74 (1998).
- A. N. Bandura, O. V. Byrka, V. V. Chebotarev et al., Intern. J. Plasma Environ. Sci. Technol. 5, 2 (2011).
- I. E. Garkusha, O.V.Byrkaa, V.V.Chebotarevet et al., Vacuum 58, 195201 (2000).
- 17. V. V. Uglov, N. N. Cherenda, V. M. Anishchik et al., Vacuum 81, 1341 (2007).
- A.I. Ryabchikov, P.S. Ananin, S.V. Dektyarev et al., Vacuum 143, 447 (2017).
- А.И. Рябчиков, А.Э. Шевелев, П.С. Ананьин и др., ЖТФ 88, 1564 (2018).

- N.N. Koval, A.I. Ryabchikov, D.O. Sivin et al., Surf. Coat.Technol. 340, 152 (2018).
- A.I. Ryabchikov, IEEE Trans. Plasma Sci. 49, 2529 (2021).
- **22.** V. P. Tarakanov, *User's Manual for Code KARAT*, Berkley Research Associates, Springfield, VA (1992).
- 23. В. П. Тараканов, в сб. Математическое моделирование. Проблемы и результаты, Наука, Москва (2003), с. 456.
- A.I. Ryabchikov, I.A. Ryabchikov, I.B. Stepanov et al., Vacuum 78, 445 (2005).
- A.I. Ryabchikov, I.B. Stepanov, S.V. Dektjarev et al., Rev. Sci. Instrum. 69, 893 (1998).
- **26**. А.П. Бабичев, *Физические величины. Справочник*, Энергоатомиздат, Москва (1991).
- 27. В.Ю. Баранов, Изотопы: свойства, получение, применение, ИздАТ, Москва (2000).
- **28**. Н. Н. Петров, *Физическая энциклопедия*, Советская энциклопедия, Москва (1990).
- 29. А.А. Плютто, В.Н. Рыжков, ЖЭТФ 47, 494 (1964).
- И.И. Аксенов, В.Г. Падалка, В.М. Хороших, ТВТ 21, 219 (1983).
- 31. J. Kutzner and H.G. Miller, J. Phys. D 25, 686 (1992).

ПИКОСЕКУНДНАЯ МОДУЛЯЦИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ СВЕТА — ОТОБРАЖЕНИЕ ОСЦИЛЛЯЦИЙ И ОБЕДНЕНИЯ НАСЕЛЕННОСТИ ЭЛЕКТРОНОВ В ПОЛЕ СОБСТВЕННОГО ИНТЕНСИВНОГО СТИМУЛИРОВАННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ Al_xGa_{1-x}As-GaAs-Al_xGa_{1-x}As (ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ)

Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой^{*}, А. Н. Кривоносов

Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова Российской академии наук 125009, Москва

> Поступила в редакцию 18 марта 2022 г. после переработки 15 июня 2022 г. Принята к публикации 27 июня 2022 г.

Описывается новое, экспериментально обнаруженное, явление квантовой оптики. В начале мощной пикосекундной оптической накачки слоя GaAs гетероструктуры в нем возникает интенсивное пикосекундное стимулированное излучение. При этом огибающая спектра фундаментального поглощения света становится модулированной. Эта модуляция меняется со временем циклически и, в целом, отображает осциллирующее во времени и в энергетическом пространстве отклонение от фермиевского распределения электронов, возбуждаемое излучением. Прииходящие при этом осцилляции электронов приводят к модуляции излучения во времени. В исследовании этого явления, помимо прочего, выявились фундаментальные процессы, требующие объяснения в нелинейной оптике полупроводников, а также получили объяснение некоторые нестабильности излучения полупроводниковых лазеров.

EDN: LFPECX

DOI: 10.31857/S0044451022120215

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение 1019 2. Аппаратура и методика измерений 1019	 Частота модуляции
 Собственное пикосекундное стимули- рованное излучение GaAs	чения и синхронизация межзонных ос- цилляций электронов — следствие вы- нужденного комбинационного рассея-
4. Интерференция з-излучения и наведе- ние им брэгговской решетки населен- ности	ния мод
5. Образование модуляции спектра по- глощения света из-за выжигания <i>s</i> - излучением частотных дыр 1028	 10. Роль автосинхронизации модуляции населенности при зондировании 1044
6. Циклическое изменение модуляции спектра поглощения	Заключение

1. ВВЕДЕНИЕ

Обзор представляет читателю результаты цикла экспериментальных работ, в которых была обнаружена и исследовалась автомодуляция фундаментального поглощения света, а также собственного стимулированного (усиленного спонтанного) и зондирующего излучений в слое GaAs гетероструктуры. Фундаментальное поглощение — это поглощение фотона электроном, благодаря чему он переходит из валентной зоны в зону проводимости. Автомодуляция представляла собой возникновение и исчезновение локальных максимумов и минимумов в спектре. Исследование проводилось в пикосекундном временном диапазоне. Обнаружив новые взаимосвязанные оптоэлектронные эффекты автомодуляции, возникающие при высокой интенсивности излучения, эти исследования подняли важные вопросы фундаментального и прикладного характера. Первые относятся к когерентности стимулированного излучения, аномально быстрому возникновению и релаксации излучения, наведению излучением брэгговской решетки населенности, межзонным осцилляциям электронов в поле собственного излучения в полупроводнике, синхронизации осцилляций, неразрушению этих осцилляций рассеянием носителей друг на друге, восстановлению детального равновесия при «выжигании» излучением дыры в спектре усиления, нефермиевскому распределению электронов в части зоны проводимости, возбуждению осцилляциями вынужденного комбинационного рассеяния (ВКР) излучения, роли ВКР в синхронизации осцилляций, сходству осциллирующих электронов с ансамблем связанных осцилляторов, и т. д. Значительная часть из перечисленного объясняется количественно или качественно в обзоре, остальное составляет новые задачи для физики полупроводников и нелинейной оптики. Учитывая «родственность» стимулированного и лазерного излучений, эти исследования дали новые объяснения таким нестабильностям излучения полупроводниковых лазеров, как многомодовость, конкуренция и переключение спектральных мод, колебания интенсивности излучения.

Автомодуляция изменения интенсивности излучения со временем была обнаружена в работе [1]. Но это было излучение полупроводникового лазера. Тогда дальнейшего исследования автомодуляции, насколько нам известно, не последовало. Большинство описываемых в обзоре экспериментов проводилось при сходной накачке похожих образцов. Это обеспечивало многоплановость исследования, сопоставление различных аспектов одного явления, большую возможность приблизиться к пониманию физического механизма изучаемых явлений. Использование GaAs в качестве основной части образца объясняется следующим. Во-первых, этот материал, широко используемый в полупроводниковой оптоэлектронике, является удобнейшим для таких исследований. Во-вторых, его свойства хорошо изучены. В-третьих, генерация излучения и сопутствующие процессы не вуалируются теми особенностями, которые привносили бы, например, низкоразмерные структуры. Количество ссылок на наши работы вызвано только необходимостью указать на единственно известные нам источники информации требуемого рода и дать возможность ознакомиться с ней детально или проверить ее достоверность.

2. АППАРАТУРА И МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЙ

2.1. Лазерный пикосекундный спектрофотохронометрический комплекс

Эксперименты проводились при комнатной температуре T_R на пикосекундном лазерном спектрофотохронометрическом комплексе, рис. 1. В первоначальном виде комплекс был изготовлен в НЦЛИ ВГУ [2]. После существенной модернизации, впоследствии проведенной нами, комплекс состоит из следующих компонент: задающего YAGлазера с диодной накачкой PL PDP1-300; системы усилителей лазерного импульса, накачиваемых источниками питания серии 700TC; удвоителей частоты светового импульса (кристаллов KDP); двух параметрических генераторов света на LiNbO₃ с температурной перестройкой длины волны один для генерации накачивающего, второй зондирующего или др. импульсов длительностью (FWHM) примерно 10 пс с линейной поляризацией света: спектрофотохронометрической системы. Наиболее важными компонентами последней являются а) двойной спектрограф SpectraPro-2500i, используемый как для спектральных измерений, так и (в режиме вычитания дисперсии) в качестве полосового фильтра длин волн, не искажающего длительность излучения; б) пикосекундная электронно-оптическая камера (ЭОК) PS-1/S1; в) ПЗС-камеры PIXIS и CoolSNAP:HQ2 для регистрации: первая — спектра излучения, вторая —

^{*} E-mail: bil@cplire.ru

изменения со временем интенсивности интегрального по спектру излучения или его спектральной компоненты, пропущенной спектрографом (ПЗС — прибор с зарядовой связью); г) ФЭУ — фотоэлектронный умножитель.

2.2. Исследуемый образец

Исследуемый образец представлял собой гетероструктуру Al_{0.22}Ga_{0.78}As-GaAs-Al_{0.4}Ga_{0.6}As с толщиной слоев соответственно около 1.3-1.5-1.2 мкм, с площадью поверхности 8 × 8 мм². Гетероструктура была выращена молекулярно-лучевой эпитаксией на подложке (100) GaAs. Предназначавшаяся для исследований область гетероструктуры размером 4×4 мм² была освобождена от подложки с помощью химико-динамического травления. Концентрации донорных и акцепторных примесей в гетероструктуре не превышали 10¹⁵ см⁻³. Слои $Al_xGa_{1-x}As$, предназначенные для стабилизации поверхностной рекомбинации и механической прочности, были прозрачны для света, используемого в эксперименте. На поверхности образцов, параллельные эпитаксиальным слоям, было нанесено двухслойное антиотражающее покрытие из SiO₂ и Si₃N₄. Благодаря этому отражение света, направленного близко к нормали к поверхности образца, не превышало 2 % в реальных условиях наших экспериментов.

2.3. Методика измерений пикосекундного стимулированного излучения GaAs

При оптической накачке (ex), т. е. межзонном поглощении мощного светового импульса с энергией фотона $\hbar\omega_{ex} > E_q^0$, падающего на образец под углом 10° относительно нормали к его поверхности, в слое GaAs генерировалась электроннодырочная плазма (ЭДП), здесь E_q^0 — ширина запрещенной зоны невозбужденного GaAs. Плотность ЭДП $(n = p \ge 1.3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3})$ была достаточной для образования инверсии населенности и сверхбыстрого возникновения в GaAs стимулированного излучения длительностью (FWHM) примерно 10 пс с энергией фотона $\hbar\omega_S$ [3]. Вышесказанное иллюстрирует рис. З и вставка на нем. Излучение усиливалось преимущественно при его распространении вдоль слоя GaAs. Диаметр луча накачки (FWHM) в местоположении образца равнялся $D_{ex} \approx 0.5-0.6$ мм.

В экспериментах исследовалось как излучение, выходившее из торца гетероструктуры, так и часть излучения, выходившая из накаченной области слоя и распространявшаяся внутри телесного угла $\Omega \approx 1.2 \cdot 10^{-2}$ ср с осью, перпендикулярной поверхности гетероструктуры. Указанная часть излучения была выбрана для измерения по тому, что выходит прямо из активной области, не изменяясь из-за поглощения в пассивной области и отражения от торцов образца. Излучение, выходившее из торца гетероструктуры, попадало в кварцевый световод, по которому транспортировалось к монохроматору (эти измерения выполнялись еще с помощью монохроматора МДР-23 и ФЭУ, см. рис. 1 в работе [4]). Вышедшее из световода излучение фокусировалось на щель монохроматора и регистрировалось на его выходной щели фотоэлектронным умножителем (ФЭУ). Часть излучения, выходившая перпендикулярно поверхности гетероструктуры, направлялась в двойной спектрограф. Интегральный по времени спектр стимулированного излучения регистрировался ПЗС-камерой PIXIS, установленной у выходной щели первой ступени спектрографа.

При измерении временной формы (огибающей) световых импульсов двойной спектрограф был настроен в режим вычитания дисперсии. Промежуточную щель между первой и второй ступенями спектрографа раскрывали так, чтобы она пропускала излучение заданной спектральной ширины $\delta\hbar\omega$. В результате через выходную щель спектрографа выходила только требуемая для измерения спектральная компонента излучения с той же длительностью, которая была у нее при входе в спектрограф. Эта компонента излучения направлялась в ЭОК PS-1/S1, где зависимость интенсивности излучения от времени преобразовывалась в пространственную зависимость интенсивности. Последняя зависимость, далее называемая хронограммой, регистрировалась ПЗСкамерой CoolSNAP:HQ2 (см. ниже рис. 3).

Представление о погрешностях измерений ЭОК PS-1/S1 дано в работе [5]. В экспериментах в расчет принимались только те акты накачки, для которых отклонения энергии импульса накачки от заданного значения не превышало $\pm(4-5)$ %. Накопление данных продолжалось до тех пор, пока усредненный спектр (или хронограмма) не переставал с точностью 3 % зависеть от числа импульсов накачки. При накоплении хронограмм осуществлялась автоматическая компенсация джиттера (нестабильности запуска линейной развертки) ЭОК PS-1/S1. Сам же джиттер не превышал ± 4.5 пс.



Рис. 1. Схема лазерного пикосекундного спектрофотохронометрического комплекса

2.4. Математический алгоритм устранения джиттера при измерении хронограмм излучения

Стандартная программа WinSpec32, управляющая ПЗС-камерой CoolSNAP:HQ2, позволяет регистрировать хронограммы в двух режимах: a) «однократном», когда на одном снимке присутствует одна хронограмма светового импульса; б) в режиме «суммирования», когда проводится суммирование заданного количества хронограмм и «усредненная» хронограмма выводится на один снимок. На хронограмме, измеренной в однократном режиме, присутствуют шумовые импульсы, сильно искажающие ее вид (рис. 2). Для усреднения шумовых импульсов хронограммы пикосекундных импульсов измеряют в режиме суммирования. Однако из-за джиттера полученный после суммирования импульс сильно уширен. Для решения этой проблемы был разработан алгоритм устранения джиттера.

Суть разработанного и реализованного в интегрированной среде "Visual Basic" алгоритма заключалась в совмещении хронограмм импульсов по вертикальной линии, условно делящей площадь под графиком каждого импульса на некотором задан-



Рис. 2. Демонстрация работы алгоритма устранения джиттера

ном диапазоне на две равные части [6]. Таким образом, задача сводилась к нахождению положения этой средней линии на каждой из измеренных хронограмм. Работу алгоритма демонстрирует рис. 2. Перед началом измерений выбираются значения *a* и *b*, такие, чтобы на оси времени диапазон 2*a* примерно соответствовал ширине измеряемого импульса по основанию, а диапазон 2*b* — ширине области, представляющей интерес для исследования и включающей в себя измеряемый импульс. Во время измерений программа, осуществляющая заданный алгоритм обработки экспериментальных данных, находит точку на оси абсцисс, соответствующую значению максимума хронограммы (точка M). В диапазоне (M-a; M+a) рассчитывается площадь под графиком хронограммы. Далее на оси абсцисс определяется значение положения вертикальной линии, делящей эту площадь на две равные части (точка C). Вырезается диапазон (C-b; C+b). Часть графика, ограниченная этим диапазоном, участвует в дальнейшей обработке данных, в том числе в суммировании хронограмм для нахождения их усредненного значения.

На рис. 3 представлены хронограммы, полученные в результате суммирования одиночных хронограмм с применением алгоритма исключения джиттера (*ej*-хронограммы). Как видно, эти хронограммы имеют гладкую форму. Шумовые импульсы, присутствующие на хронограммах, измеренных в однократном режиме, нивелируются. Характерные параметры *ej*-хронограмм соответствуют среднему значению для хронограмм,



Рис. 3. (В цвете онлайн.) Хронограммы импульсов накачки $I_{ex}(t)$ (кривая 1), *s*-излучения, интегрального по спектру $I_{\Sigma}(t)$ (кривая 2), спектральных компонент излучения $I_R(t)$ при $\hbar\omega_s = 1.401$ эВ (кривая 3) и при $\hbar\omega_s = 1.396$ эВ (кривая 4). К фронту хронограммы 2 проведена касательная 5, иллюстрирующая линейный рост интенсивности *s*-излучения. На вставке: схема оптических переходов в GaAs. Здесь С — зона проводимости, V₁, V₂ — валентная зона соответственно тяжелых и легких дырок, V₃ — зона, отщепленная из-за спин-орбитального взаимодействия. Показаны возможные переходы при накачке и зондировании светом с энергией фотонов $\hbar\omega_{ex}$ и $\hbar\omega_p$, соответственно, а также вынужденные рекомбинационные переходы с излучением фотонов $\hbar\omega_s$

однократно измеренных. При фиксированных условиях эксперимента длительность излучения (FWHM), определявшаяся по *ej*-хронограммам, обычно флуктуировала в пределах 1 пс.

2.5. Корреляционный метод измерения поглощения света

Для измерений коэффициента α поглощения света использовался зондирующий импульс (p) света с энергией фотона $\hbar \omega_p$, который проходил через фотовозбужденную область слоя GaAs перпендикулярно плоскости слоя (см. рис. 1 и вставку на рис. 3). Лучи возбуждающий и зондирующий были параллельно линейно поляризованы. Диаметр зондирующего луча (FWHM) D_p составлял около 0.2–0.3 мм. Интегральная энергия возбуждающего импульса W_{ex} была больше на два-три порядка интегральной энергии зондирующего импульса W_p . Изменение интенсивности света по сечению возбуждающего и зондирующего лучей было приблизительно гауссовым.

Поглощение света определялось следующим образом. При минимальной энергии зондирующего импульса измеряли оптическую плотность невозбужденного образца

$$\alpha_0 d = \ln \frac{T^0(\hbar \omega_p^*)}{T^0(\hbar \omega_p)},\tag{1}$$

где α_0 — коэффициент поглощения света невозбужденного образца, d — толщина слоя GaAs, T — прозрачность образца, $\hbar \omega_p^*$ — энергия фотона зондирующего импульса, при которой еще не возникает фундаментального поглощения света; индекс «0» означает (здесь и далее) отсутствие накачки. Затем измеряли просветление $\ln(T^1/T^0) = f(\hbar\omega_p)$, представляющее и уменьшение оптической плотности GaAs при его накачке (здесь и далее индекс «1» означает наличие возбуждения). Для этого проводились измерения энергии прошедшего через образец зондирующего импульса, поочередно по 10 измерений при накачке и без нее. Учитывались только те измерения, для которых интегральные энергии опорных импульсов в каналах зондирования и накачки отклонялись от заданных значений не более чем на ±4 %. По результатам сделанных измерений рассчитывалось просветление

$$\ln \frac{T^1}{T^0} = \ln \frac{(E_p^1/E_r^1)}{(E_p^0/E_r^0)},\tag{2}$$

где E_p — средняя энергия зондирующего импульса, E_r — средняя энергия опорного импульса в канале
зондирования. Измерение просветления продолжалось, пока оно не переставало с точностью 3 % зависеть от числа указанных измерений энергии зондирующего импульса.

Коэффициент поглощения света α в оптически накаченном слое GaAs определяли, пользуясь выражением

$$\alpha = \alpha_0 - \frac{\ln(T^1/T^0)}{d}.$$
(3)

Коэффициент α определялся при фиксированной задержке τ зондирующего импульса относительно импульса накачки. Корреляционным методом, варьируя τ , получали из зависимости $\alpha(\tau)$ косвенное представление об изменении α со временем.

Следует отметить, что фундаментальное поглощение света связано с функциями распределения f_c и f_v и энергиями электронов ϵ_c и ϵ_v в зонах проводимости и валентной, соответственно, соотношением

$$\alpha \propto \left[f_v(\mathbf{k}) - f_c(\mathbf{k}) \right] \delta \left[\epsilon_c(\mathbf{k}) - \hbar \omega - \epsilon_v(\mathbf{k}) \right], \quad (4)$$

где **k** — волновой вектор. Таким образом, коэффициент фундаментального поглощения отображает разность населенностей неравновесными носителями заряда энергетических уровней в валентной зоне и зоне проводимости, связанных прямым оптическим переходом.

2.6. Измерение поглощения света в реальном времени

Измерялись хронограммы зондирующего импульса $I_n(t)$. Промежуточную щель между первой и второй ступенями спектрографа раскрывали так, чтобы она пропускала излучение спектральной шириной $\delta\hbar\omega \approx 0.5$ мэВ. Через выходную щель спектрографа выходила только требуемая для измерения спектральная компонента зондирующего импульса той же длительности, которая была у нее при входе в спектрограф. Определяли, как описано выше, оптическую плотность $\alpha_0 d$ невозбужденного образца. Затем просветление $\ln(T^1/T^0) = f(t)$ измеряли в функции от времени t. Для этого проводились циклами измерения хронограмм $I_p(t)$ прошедшего через образец зондирующего импульса. Цикл состоял из десяти измерений при накачке и десяти измерений без накачки. Рассчитывалось просветление

$$\ln \frac{T^1}{T^0} = \ln \frac{I_p^1}{I_p^0} = f(t), \tag{5}$$

где I_p — интенсивность зондирующего импульса в момент времени t, средняя по всем циклам. С помощью формулы (3) определяли зависимость $\alpha(t)$. Точность измерений обеспечивалась следующим. Среднее по каждому циклу просветление рассчитывалось по формуле (2), однако здесь

$$E_p = \int_{-8 \text{ nc}}^{8 \text{ nc}} I_p(t) dt$$

— интегральная в указанном интервале времени энергия зондирующего импульса, прошедшего через образец, t = 0 в максимуме импульса. Затем рассчитывалось среднее просветление по всем прошедшим к этому моменту циклам, и оно отображалось на экране монитора в режиме онлайн. Измерение заканчивалось, когда новые циклы измерений гарантированно не меняли в пределах 1 % среднее по всем циклам просветление.

3. СОБСТВЕННОЕ ПИКОСЕКУНДНОЕ СТИМУЛИРОВАННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ GaAs

Причиной автомодуляции фундаментального поглощения света в слое GaAs гетероструктуры $Al_xGa_{1-x}As$ -GaAs-Al_xGa_1-xAs является собственное пикосекундное стимулированное излучение GaAs. Для краткости оно называется далее sизлучение. В настоящем разделе дается краткое представление об его обнаружении и исследовании. В работах [7, 8] при измерении спектра просветления слоя GaAs обнаружилось, что площадь под спектральной кривой, соответствующая плотности неравновесных носителей, возрастала и убывала в пикосекундном диапазоне времени. Одним из двух возможных объяснений аномально быстрого убывания было предположение о возникновении стимулированной пикосекундной рекомбинации, генерирующей *s*-излучение. Позднее аналогичные опыты и предположение были сделаны в работах [9, 10]. То, что подобное излучение возникает в $Al_x Ga_{1-x} As$, было показано в работе [9] сравнением интегральных по времени спектров излучения, измеренных через 12 и 24 пс после начала накачки. В работе [11] возникновение *s*-излучения доказывалось характером зависимости энергии излучения GaAs от пикосекундной задержки между двумя импульсами накачки с различающимися энергиями фотонов. В реальном времени хронограммы *s*-излучения впервые измерены в работах [3, 12]. «Разгоралось» s-излучение, отставая от начала накачки на несколько пикосекунд, см. рис. 3. Пороговая плотность неравновесных носителей, при которой при температуре T_R в GaAs возникает стимулированное (усиленное спонтанное) излучение, равна $n_{th} = p_{th} \approx 1.3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Из аномально быстрого возникновения *s*-излучения следовало, что скорость спонтанной рекомбинации приобретает значение, соответствующее плотности n_{th} накаченных носителей, с инерционностью не более нескольких пикосекунд. Экспериментально доказано присутствие у *s*-излучения характерных свойства стимулированного излучения, перечисленных ниже.

• Наличие в спектре фундаментального поглощения света области усиления света [13, 14].

• Появление излучения при пороговой энергии накачки W_{ex-th} и плотности n_{th} [11].

• Узкая диаграмма направленности излучения, при которой основная часть излучения выходит из торцов образца [14].

• Спектр *s*-излучения у́же спектра спонтанного излучения и сужается при увеличении энергии импульса и диаметра луча накачки [15]. Последнее объяснено в работе [16].

Обозначим аббревиатурой ЭТН транспорт неравновесных носителей в энергетическом пространстве на уровни в области экстремумов зон проводимости и валентной, откуда они рекомбинируют. Из-за высокой интенсивности *s*-излучения (до 1 ГВт¤/см²) устанавливается режим насыщения усиления. Это возникает, когда для баланса скоростей вынужденной рекомбинации и ЭТН появляется провал в спектре усиления [14] и пр. До этого усиление *s*-излучения происходит экспоненциально, в режиме усиления «слабого» сигнала по закону Бугера. Режим насыщения усиления осуществляется на большей части *s*-излучения, и интенсивность s-излучения возрастает линейно, см. рис. 3 (кривая 5). Условие перехода от экспоненциального к линейному возрастанию теоретически получено в работе [17], а экспериментально для *s*-излучения — в работе [18]. Связь между энергиями спектральных компонент *s*-излучения (в режиме насыщения усиления), W_{s-m} , и спонтанного излучения, W_{sp} , экспериментально подтверждена в работах [19, 20] и описывается выражением

$$W_{s-m} \approx -W_{sp}\alpha(1+R_B)L,\tag{6}$$

где $\alpha < 0$ — коэффициент поглощения зондирующего света в той области спектра $\alpha(\hbar\omega)$, где свет усиливается (см. ниже рис. 7, приведеннный в разд. 5), L — диаметр активной области спектральной компоненты *s*-излучения (называемой далее *s*-компонентой), R_B — коэффициент отражения *s*-излучения брэгговской решеткой населенности элек-

тронов, наводимой в гетероструктуре *s*-излучением (см. разд. 4).

Независимо от энергий импульса $W_{ex} > W_{ex-th}$ и фотона $\hbar \omega_{ex} > E_g$ накачки, но с диаметром фокусного пятна ее луча на образце $D_{ex} \gtrsim 0.5$ мм устанавливается пороговое состояние ЭДП при окончании *s*-излучения. В этом состоянии выполняются условия электронейтральности и отсутствия усиления,

$$n = p, \quad \mu_e - \mu_h \approx E_g, \tag{7}$$

где n и p — плотности, μ_e и μ_h — квазиуровни Ферми соответственно электронов и дырок, E_a — ширина запрещенной зоны [21]. При насыщении усиления расстояние между квазиуровнями Ферми близко к соотношению (7). В пренебрежении той малой долей плотности ЭДП, которая образует инверсию населенностей, это приближение позволило объяснить в GaAs следующее: обратимое пикосекундное просветление [22, 23], распределение электронов между долинами зонной структуры, величину сужения запрещенной зоны из-за кулоновского взаимодействия носителей заряда, усиление sизлучения в результате стимулированного им рамановского рассеяния света накачки на плазмонфононных колебаниях [24, 25]. В приближении (7) возникает и взаимосвязь между плотностью n и температурой T_c ЭДП [25,26]:

$$n - n_{th} = k(T_c - T_R)^{3/2},$$
 (8)

где k — коэффициент, не требующий здесь уточнения. Влияние разогрева носителей, вызванного внутризонным поглощением ими света, на просветление слоя GaAs, а значит, и на плотность носителей было прямо доказано в эксперименте [27].

В теории [28] получено аналитическое выражение характерного времени τ_T остывания оптически накаченных носителей заряда в присутствии *s*-излучения. Соотношение (8) позволяет связать время τ_T с измеряемым характерным временем $\tau_R \approx 10$ пс релаксации плотности носителей и интенсивности *s*-излучения, интегральной по спектру [26]:

$$\tau_R \approx \frac{2}{3} \tau_T \approx \frac{2}{3} (A + B \tau_p T_c^{1/2} E_g) \tau_h, \qquad (9)$$

$$\tau_p^{-1} \approx \frac{c_0}{n_0} (\gamma + D^{-1}),$$
 (10)

где $A = 6.3, B = 0.36, \tau_h \approx 0.8$ пс — время релаксации энергии ЭДП за счет эмиссии оптических фононов с учетом разогрева последних [29], τ_T, τ_p, τ_h измеряются в пс, T_c — в К, E_g — в эВ, c_0 — скорость света в вакууме, $n_0 = 3.6$ — показатель преломления GaAs, $\gamma = \sigma n$ — коэффициент внутризонного поглощения света, $\sigma = 1.5 \cdot 10^{-17}$ см² [30], D —

диаметр активной области. Из аналитического определения τ_T следует, что взаимодействие излучения с неравновесными носителями приводит к замедлению их энергетической релаксации. Упрощенно это взаимодействие включает 1) вынужденную рекомбинацию «холодных» носителей, энергия которых меньше средней энергии носителей в ЭДП; 2) внутризонное поглощение электронами излучения. Теоретическое значение $\tau_R \approx (2/3) A \tau_h$ остаточного характерного времени релаксации в формуле (9), к которому при уменьшении D стремятся τ_R и характерное время τ_r релаксации *s*-компоненты, подтверждается экспериментом [20]. Это значение представляется на сегодня универсальным в том смысле, что никакая миниатюризация активной области предположительно не может сделать его меньше при горячей ЭДП. Экспериментально обнаружено, что время τ_T , а наряду с ним τ_R и τ_r , может характеризовать замедление ЭТН, возникающее из-за взаимодействия s-излучения с носителями, не только на спаде, но и на фронте, и в максимуме как интегрального по спектру *s*-излучения, так и *s*-компонент.

Можно упомянуть еще следующие экспериментально доказанные свойства *s*-излучения с существенной ролью ЭТН: антикорреляция между максимальной интенсивностью *s*-излучения и временем τ_T [16]; влияние замедления ЭТН на максимальную плотность энергии *s*-компоненты в активной среде, на время достижения максимума и на длительность *s*-компоненты [20, 31]; уменьшение как дифференциального коэффициента усиления, так и инверсии населенности при линейном возрастании интенсивности *s*-компоненты [18]. Эти и другие свойства *s*-излучения подробно представлены в посвященном им обзоре [32].

4. ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ *s*-ИЗЛУЧЕНИЯ И НАВЕДЕНИЕ ИМ БРЭГГОВСКОЙ РЕШЕТКИ НАСЕЛЕННОСТИ

В работе [12] с начала *s*-излучения наблюдалась не предполагавшаяся ранее автомодуляция спектра его интенсивности $I_s(\hbar\omega_s)$. Модуляционная компонента спектра δI_s определяется как разность экспериментального (кривая 1) и усредненного сглаженного (кривая 2) спектров, рис. 4*a*. На рис. 4*б* приведены примеры модуляционной компоненты $\delta I_s/I_{s-max} = f(\hbar\omega_s)$, нормированной на амплитуду сглаженного спектра I_{s-max} . Рассмотрим эволюцию модуляционной компоненты. В начале *s*-



Рис. 4. а) Экспериментальный спектр *s*-излучения в момент времени t = 6 пс (кривая 1). Усредненный сглаженный спектр *s*-излучения — штриховая кривая 2. Стрелки показывают модуляционную компоненту спектра излучения δI_s при некоторых энергиях фотона $\hbar \omega_s$. 6) Модуляционная компонента спектра излучения, нормированная на амплитуду сглаженного спектра, $\delta I_s/I_{s-max} = f(\hbar \omega_s)$, в моменты времени 6 пс (3), 14 пс (4), 19 пс (5), 26 пс (6), 32 пс (7)

излучения, например при t = 6 пс, на спектре (кривая 3 на рис. 4б) обнаруживаются эквидистантные локальные максимумы (ЛМ) при фиксированных энергиях фотона $\hbar \omega_s \approx 1.405$ эВ $\pm k\xi$, где k = 0, 1, 2и $\xi \approx 10$ мэВ. Излучение, составляющее локальную особенность спектра при такой величине $\hbar \omega_s$, названо *i*-модой.

С ростом интенсивности I_{Σ} *s*-излучения, интегрального по спектру, глубина модуляции и число ЛМ уменьшались. Ко времени t = 14 пс в спектре (кривая 4) остались явно выделенными две *i*моды. В области максимума интенсивности I_{Σ} при t = 19 пс и эти ЛМ почти нивелировались, см. кривую 5. При спаде *s*-излучения, на месте бывших локальных минимумов возникали уже ЛМ и наоборот. Так проявились четыре новых (два из них слабые) ЛМ, означающих усиление на спектре мод с энергиями фотона $\hbar\omega_s \approx 1.40$ эВ $\pm k\xi$, которые названы *h*-модами, кривая 6. Из этих ЛМ к t = 32 пс (кривая 7) остались четко выраженными ЛМ, соответствующие *h*-модам с $\hbar\omega_s \approx 1.40$ эВ и с $\hbar\omega_s \approx 1.39$ эВ, а остальные нивелировались.

Образование ЛМ представляется следующим [33]. В волноводной гетероструктуре плоские однородные волны s-излучения, называемые парциальными, двигаются зигзагообразно, отражаясь от гетерограниц. Поле в волноводе рассматривают как результат сложения парциальных волн (концепция Бриллюэна [34]). При используемой накачке GaAs суперпозиция парциальных волн должна быть симметричной. Рассмотрим ее для парциальных волн *s*-компоненты с длиной волны в вакууме λ_0 , распространяющихся в слое GaAs в направлении вдоль диаметра активной области. Выделим две симметричные траектории, наклоненные под углом β к гетерограницам, показанные штриховой и сплошной линиями на рис. 5а. По каждой траектории навстречу друг другу движутся две парциальные волны, как указано стрелками на рис. 5а, формируя почти стоячую волну. Расположение в пространстве пучностей образовавшихся стоячих волн схематически показано на рис. 5б. Один набор эквидистантных параллельных пучностей показан сплошной линией, а второй штриховой.

Пучности составляют симметричную решетку, удовлетворяющую следующим граничным условиям. Пересечение с гетерограницей двух соседних пучностей (штриховой и сплошной линий) из одного и другого наборов происходит в одном и том же месте, как, например, в точках C и G на рис. 5 δ . Каждому пересечению пучностей на одной гетерогранице соответствует такое пересечение пучностей на противоположной гетерогранице, что эти пересечения находятся на концах одной нормали к гетерограницам, например, в точках C и G на рис. 5 δ . Для получающейся решетки пучностей угол β должен удовлетворять соотношению

$$\sin\beta = \frac{k\lambda_0}{2n_0d},\tag{11}$$

где k — целое число, отчего решетка (точнее угол β) может меняться только дискретно. Структура решетки для k = 1 приведена на рис. 5 δ , а для k = 2— на рис. 5 ϵ . Что определяет, какое именно целочисленное значение приобретает k, пока не име-

A β C G $\lambda_0/(2n_0 \cdot \cos\beta)$ B) $\lambda_0/(n_0 \cdot \cos\beta)$

Рис. 5. а) Схема движения в слое GaAs навстречу друг другу парциальных волн спектральной компоненты излучения с длиной волны λ_0 . б) и в) Схемы расположения в слое GaAs пучностей стоячих волн при k = 1 и k = 2 в формуле (11)

ет объяснения. Примем для оценки, что k = 1и $\lambda_0 = 0.886$ мкм *h*-моды с $\hbar\omega_0 = 1.40$ эВ, составляющей максимум спектра на спаде *s*-излучения. Для такой моды показатель преломления GaAs $n_0 = 3.6$ при $T_R \approx 300$ K [30]. Получаем $\beta \approx 4.7^{\circ}$. Решетка узлов подобна решетке пучностей, но сдвинута в диаметральном направлении на $\lambda_0/4n_0 \cos\beta$. Пучности создают ЛМ распределения интенсивности sизлучения в пространстве. В них населенность энергетических уровней зоны проводимости обедняется s-излучением по сравнению с населенностью в местоположении локальных минимумов интенсивности, т. е. узлов. В результате возникает модуляция распределения в пространстве плотности *n* неравновесных электронов. Из-за зависимости показателя преломления n₀ от плотности n возникает аналогичная модуляция n₀ в пространстве, которую можно рассматривать как модификацию брэгговской решетки.

a)

Положительная обратная связь (ПОС) для излучения создается брэгговской решеткой, когда волна, рассеиваясь на периодических неоднородностях, меняет направление распространения на обратное. При этом все отраженные волны должны быть синфазны и интерферировать конструктивно. Условие такого отражения от периодической структуры выполняется для лучей обоих направлений. В результате возникают две связанные волны одинаковой частоты, распространяющиеся в противоположных направлениях. Таким образом, периодическая решетка создает обратную связь в обоих направлениях и на всей протяженности решетки. Этот эффект реализуется, если один из оптических параметров среды промодулирован в направлении распространения волны по какому-либо периодическому закону, причем период модуляции а удовлетворяет условию Брэгга-Вульфа

$$a = \frac{m_0 \lambda_0}{2n_0},\tag{12}$$

где m_0 — целое число. В направлении вдоль любой из траекторий на рис. 5a набор перпендикулярных ей пучностей и узлов вызывает осцилляции n_0 в пространстве с периодом

$$a_1 = \frac{\lambda_0}{2n_0}.\tag{13}$$

Выражение (13) — это условие Брэгга-Вульфа для то = 1. Следовательно, каждый из двух вышеназванных наборов пучностей и узлов наводит свою брэгговскую решетку модуляции показателя преломления n₀, создающую ПОС для излучения с длиной волны λ_0 , движущегося перпендикулярно плоскостям этой решетки. Благодаря ПОС, эта спектральная мода усиливается и создает ЛМ на спектре. Заметим, что для этого излучения при пересечении им второй решетки под углом 2β к ее нормали преломление на пути между двумя противоположными гетерограницами пренебрежимо мало. Согласно, например, работе [35], брэгговская решетка должна способствовать появлению в спектре излучения помимо ЛМ при λ_0 еще других ЛМ, приблизительно разделенных с ним интервалами, кратными

$$\xi_B \left[\Im \mathbf{B} \right] = \frac{hc_0}{2n_0 l},\tag{14}$$

где l — протяженность брэгговской структуры, h — постоянная Планка, c_0 — скорость света в вакууме. Каждая из мод, создающих ЛМ в спектре, будет создавать свою брэгговскую решетку населенности, подобную описанной для моды λ_0 . Эти ре-

шетки совместимы, поскольку каждая будет способствовать созданию ЛМ, расположенных в спектре там же, где и ЛМ, созданные модой λ_0 . Похожего мнения придерживаются, например, авторы работы [36], поскольку оно согласуется с их лазерными экспериментами. Относительно решетки с k = 1и $\beta = 4.7^{\circ}$ заметим, что движение в GaAs наиболее интенсивной части *s*-излучения под близким углом $\beta \approx 5^{\circ}$ следовало и из диаграммы направленности *s*-излучения (см. рис. 3 в [33]). Согласно этой диаграмме, излучение максимальной интенсивности выходило из торца образца под углом к гетерограницам $\phi \approx 20^{\circ}$, как и следовало по закону Снеллиуса: $n_0 \sin \beta = \sin \phi$. Эквидистантные ЛМ в спектре *s*-излучения разделены интервалом $\xi \approx 10$ мэВ, см. выше. Интервал ξ близок к оценке интервала $\xi_{B1} = 9.4$ мэВ, получаемой в случае, если в выражении (14) принять за *l* длину участка траектории, проходимого излучением между двумя последовательными его отражениями от гетерограниц, например отрезок AB на рис. 5a, т. е. $l = d/\sin\beta$, где $\beta = 4.7^{\circ}$ при k = 1. Таким образом, экспериментально установленный интервал ξ близок к интервалу ξ_{B1} , который должен возникать под влиянием брэгговской решетки.

Образование пространственной решетки обеднения населенности предполагалось ранее в лазерах [37]. Авторы статьи [36] объясняли наблюдавшуюся модуляцию спектра мощного излучения (предполагаемого сверхизлучением) полупроводникового лазера, как и ряд обнаруженных ими эффектов [38], образованием решетки населенности в активной среде лазера.

Оценка изменения плотности носителей из-за обеднения их населенности выполнена в [33]. Допускалось, что обеднение населенности сконцентрировано там, где располагаются пучности, а в местоположении узлов обеднения нет. Для оценок воспользовались спектром просветления $lg(T^1/T^0)$, характеризующего увеличение прозрачности из-за неравновесных носителей заряда. Плотности носителей с обеднением n_d и без него n_F соотносятся, по оценке, как $n_F/n_d = 1.1$. Для излучения с длиной волны λ_0 и $n = 5 \cdot 10^{18}$ см⁻³, как в [14], получалось изменение показателя преломления, вызванное наличием неравновесных электронов, без обеднения населенности $\Delta n_{0-F} \approx -0.0068$, а с обеднением $\Delta n_{0-d} \approx -0.0062$. Отношение показателей преломления областей с обеднением населенности и областей без обеднения составляет

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{n_0 + \Delta n_{0-d}}{n_0 + \Delta n_{0-F}} = 1.00017.$$
 (15)

Для оценки коэффициента отражения излучения вышеописанной брэгговской решеткой, или, иначе, распределенным брэгговским отражателем (РБО), использовалось выражение [39]

$$R_B = \left[\frac{1 - (n_1/n_2)^{2m}}{1 + (n_1/n_2)^{2m}}\right]^2,$$
(16)

где $m \approx 2Dn_0 \cos \beta / \lambda_0 = 4048$ — число периодов осцилляций показателя преломления на всей длине РБО. Принимая величину *D* равной диаметру $D_{ex} = 0.05$ см фокусного пятна луча накачки на полувысоте (FWHM), получаем $R_B \approx 0.36$, т. е. созданный излучением РБО должен отражать с коэффициентом R_B те спектральные компоненты излучения, которые движутся под углом β к гетерограницам и составляют ЛМ на спектре излучения. Оказалось, что полученное значение $R_B \approx 0.36$ согласовалось с оценками коэффициента отражения полного *s*-излучения, сделанными двумя другими методами [33], что соответствует и эксперименту [20]. Причина этого, возможно, в том, что а) спектральные компоненты, составляющие ЛМ — это значительная часть полного излучения; б) в области максимума излучения происходит переключение мод и решетки, описываемое в разд. 8, и т. д. То, что РБО создается еще и модуляцией в пространстве коэффициента усиления [35], пока игнорировалось.

Для появления ПОС, например, для *i*-мод, и образования ими ЛМ в спектре необходимо еще, чтобы коэффициент оптического усиления моды превышал некоторый порог [35]. Этот порог тем выше, чем а) дальше ЛМ отстоит в спектре от ЛМ, образованного самой интенсивной *i*-модой; б) меньше глубина пространственной модуляции показателя преломления. Разное изменение порогов для разных мод во время эволюции излучения приводит к различию в возникновении и затем исчезновении ЛМ (подробнее см. [33]). Последнее, в случае лазеров, называют конкуренцией мод. Так что возникает объяснение конкуренции мод, как следствия наведения излучением брэгговской решетки.

В итоге оказалось, что *s*-излучение создает в слое GaAs гетероструктуры брэгговскую решетку населенности электронов. Для ее образования существенно отражение *s*-излучения от гетерограниц и выполнение выявленных граничных условий. Решетка может являться причиной появления такой «многомодовости» излучения лазера, параметры которой определяются размерами его волновода. Вышеизложенному предшествовало исследование эффекта выжигания пространственных дыр и многомодовой генерации в твердотельном [40, 41], следом в полупроводниковом [42] лазере, а позднее в лазерах на квантовых точках [43,44].

Интерференционная картина спектра sизлучения свидетельствовала о когерентности спектральных мод *s*-излучения. Поскольку спонтанное излучение считается стохастическим, его усиление не должно было приводить к существенно когерентному стимулированному излучению, при этом без влияния отражения от торцов или зеркал, считаемого атрибутом когерентизации в лазере. Из когерентности следует, что электроны, излучая фотоны одинаковой энергии, колеблются сфазировано. Следовательно, их можно представлять как связанные осцилляторы. Подобное предполагалось Дике как результат воздействия электромагнитного поля, излучаемого одним осциллирующим электроном, на осцилляции других излучающих электронов [45]. По Дике, это должно приводить к сверхизлучению, но не оно, а *s*-излучение возникало в описанных условиях. Кроме того, вывод Дике получен для инвертированных двухуровневых атомов и, значит, монохроматического излучения, что существенно отличается от ЭДП полупроводника в поле собственного излучения, представляющего световой континуум. На будущее возникает задача выяснения механизма обнаруженной когерентизации *s*-излучения и корреляции излучающих его электронов.

5. ОБРАЗОВАНИЕ МОДУЛЯЦИИ СПЕКТРА ПОГЛОЩЕНИЯ СВЕТА ИЗ-ЗА ВЫЖИГАНИЯ *s*-ИЗЛУЧЕНИЕМ ЧАСТОТНЫХ ДЫР

В работе [46] обнаружилось, что в присутствии *s*излучения возникает модуляция спектра фундаментального поглощения света в слое GaAs. Это следовало из модуляции измеренного спектра просветления, которое связано с поглощением выражением (3). Наиболее простая форма модуляции просветления представлена кривыми 1 и 2 на рис. 6*a*. Подобная модуляция просматривалась в графиках работы [9], но не получила серьезного внимания.

Появление такой модуляции объясняется следующим. S-излучение создает обеднение инверсной населенности энергетических уровней на дне зоны проводимости, иначе говоря, выжигает дыру в спектре усиления. Созданное обеднение населенности электронов транслируется вверх по зоне с периодом, равным энергии продольного оптического (LO) фонона $\hbar\omega_{LO}$. Это происходит для восстановления детального равновесия переходов электронов с из-



Рис. 6. а) Зависимость просветления $\lg(T_1/T_0)$ от энергии фотона $\hbar\omega_p$ зондирующего импульса при $\tau = -3$ пс: $1 - \hbar\omega_{ex} = 1.558$ эВ; $2 - \hbar\omega_{ex} = 1.579$ эВ. 3 - 3ависимость амплитуды спектра *s*-излучения от энергии фотона накачки, $A = f(\hbar\omega_{ex})$. 6) 1 - спектр поглощения света, измеренный при $\tau = -0.3$ пс и фиксированной энергии W_{ex} ; 2 -участок параболы, касательный к спектру 1. На вставке: разность Θ между спектром поглощения 1 и касательной 2 в спектральных интервалах $\hbar\omega = 1.413 - 1.454$ эВ (3), 1.454 - 1.495 эВ (4)

лучением и с поглощением *LO*-фононов, нарушенного появлением дыры [14]. Из-за образовавшегося в зоне проводимости периодического обеднения населенности электронов и возникает модуляция спектров просветления и поглощения. В согласии с этим период модуляции равен

$$\Delta_{LO} \approx \hbar \omega_{LO} (1 + m_e/m_h), \tag{17}$$

где m_e и m_h — эффективные массы электрона и тяжелой дырки.

На рис. 7 представлены измеренные при одинаковой накачке спектр энергии *s*-излучения $W_{s-m}(\hbar\omega)$, интегральной по времени; область усиления света и граничащий с ней выступ в спектре поглощения света. Спектр выжигаемой дыры определяется в области усиления света выражением

$$\alpha_H(\hbar\omega) = \alpha_{FD}(\hbar\omega) - \alpha(\hbar\omega), \qquad (18)$$

где $\alpha_{FD}(\hbar\omega)$ — расчетный спектр поглощения света при фермиевском распределении ЭДП, $\alpha(\hbar\omega)$ — экспериментальный спектр поглощения света. Выступ определялся выражением

$$\alpha_P(\hbar\omega) = \alpha(\hbar\omega) - \alpha_{FD}(\hbar\omega). \tag{19}$$

У названных спектров на рис. 7 обнаруживается следующее подобие.

1. Спектральные положения максимальной глубины дыры и максимума спектра *s*-излучения совпадали. Максимум спектра *s*-излучения и максимум выступа в спектре поглощения разделены спектральным интервалом Δ_{LO} .



Рис. 7. Спектр энергии $W_{s-m}(\hbar\omega)$ *s*-излучения (кривая 1). Спектр поглощения света $\alpha(\hbar\omega)$ при $\tau = -3$ пс (кривая 2). Спектр поглощения, рассчитанный для фермиевского распределения ЭДП, $\alpha_{FD}(\hbar\omega)$ при $T_c = 52$ мэВ, $n = p \approx 4.7 \cdot 10^{18}$ см⁻³ (кривая 3). Кривая 4 — $\alpha_{FD}(\hbar\omega) + b[W_{s-m}(\hbar\omega) - W_s^t]$; кривая 5 — $\alpha_{FD}(\hbar\omega) + b_1[W_{s-m}(\hbar\omega - \hbar\omega_{LO}) - W_s^t]$. $\hbar\omega_{ex} = 1.558$ эВ

2. Спектральная ширина выступа в спектре поглощения, как и спектральная ширина дыры в области усиления, оказалась равной Δ_{LO} . По-видимому, процессы излучения электронами *LO*-фононов, стимулированные невыполнением принципа детального равновесия, ограничивают спектральную ширину и дыры, и выступа.

3. Обозначим W_s^t энергию *s*-излучения при тех двух значениях $\hbar \omega$, при которых находятся границы дыры. Часть спектра *s*-излучения, расположенная выше уровня W_s^t , подобна по форме дыре в области усиления,

$$W_{s-m}(\hbar\omega) - W_s^t \propto -\alpha_H(\hbar\omega), \qquad (20)$$

и выступу в спектре поглощения,

$$\alpha_P(\hbar\omega) \propto W_{s-m}(\hbar\omega - \Delta_{LO}) - W_s^t.$$
(21)

4. Соответственно дыра в области усиления и выступ в спектре поглощения тоже подобны по форме $\alpha_P(\hbar\omega) \propto -\alpha_H(\hbar\omega - \Delta_{LO}).$

Описанное выше подобие выступа, дыры и спектра излучения, установленное в работе [14], подтверждает интерпретацию представленной на рис. 6а модуляции, где каждый выступ имел гладкую колоколообразную форму. Такая модуляция наблюдалась при определенных задержках т. В промежутках между ними, при других задержках, огибающая каждого выступа дополнительно модулировалась как, например, на рис. 66 кривая 1 или ниже на рис. 9 в разд. 6 кривые 1 и 3. Эта модуляция тоже является результатом «выжигания» модулированным излучением обеднения (или частотных дыр) в населенности электронов в зоне проводимости. Подтверждается это опять же подобием модуляции спектров излучения и поглощения света. Так, очевидно сходство модуляции 1) спектра поглощения 1 на рис. 6б и спектра *s*-излучения на рис. 4*a*; 2) спектров поглощения 1 и 3 на рис. 9 и спектра s-излучения 4 на рис. 4б. То, что интервалы между ЛМ на спектрах поглощения и s-излучения немного различаются, связано с тем, что спектры измерялись в разных работах на разных образцах с несколько различающейся толщиной слоя GaAs. Обсуждаемая модуляция приближенно соответствует брэгговской решетке с k = 1 в формуле (11) и интервалом ξ_{B1} .

В работе [33] на рис. 5 приведены два спектра поглощения (кривые 1 и 3), измеренные при меньших интенсивностях накачки и на других образцах. В этих спектрах интервал между ЛМ составлял 23 и 21 мэВ соответственно, что приблизительно соответствует решетке с интервалом ξ_{B2} при k = 2. Наблюдение модуляции с ξ_{B1} и ξ_{B2} подтверждает, что наводимая *s*-излучением брэгговская решетка меняется дискретно, в соответствии с целым *k*. Трансляция с периодом Δ_{LO} модуляции, у которой интервал между выступами равен ξ_{B1} , подтверждается приближенно спектром поглощения на рис. 6*б*.

Таким образом, выясняется, что выжигание пространственных дыр в населенности носителей приводит, через посредство создаваемой интерференции *s*-излучения, к выжиганию модулированного обеднения населенности электронов в зоне проводимости (иначе, частотных дыр). Последнее вызывает модуляцию спектра поглощения. Хотя, казалось бы, электрон-электронное рассеяние не позволит образовываться частотным дырам. В работе [47] предполагается, что образование модуляции населенности в зоне проводимости становится возможным из-за возникающего замедления «залечивания» отклонений от фермиевского распределения носителей заряда. Подразумевается залечивание посредством взаимодействия носителей заряда. С этим согласуется утверждение [48], что в вырожденной плазме, электрон-электронное рассеяние преимущественно «заморожено» в силу принципа Паули. Электронный газ в зоне проводимости в нашем случае в значительной степени вырожден [21]. Модуляция поглощения наблюдалась в интервале значений $\hbar\omega$ от E_g до $\hbar\omega_{ex}$. Значит, в области от энергетического уровня, на который накачивались электроны, до дна зоны проводимости не экранировалось электрон-LO-фононное взаимодействие, несмотря на высокую плотность носителей. Возможно, направленный транспорт электронов в этой области затрудняет им перераспределение для экранирования и для залечивания [47, 49]. Однако окончательно причины замедления залечивания и отсутствия экранирования пока не установлены.

6. ЦИКЛИЧЕСКОЕ ИЗМЕНЕНИЕ МОДУЛЯЦИИ СПЕКТРА ПОГЛОЩЕНИЯ

Обнаружилось, что модуляция спектра поглощения циклически меняется (осциллирует) при изменении задержки τ , но при фиксированной энергии накачки W_{ex} [50]. Измерения проводились внутри спектрального интервала шириной не более Δ_{LO} . В указанной работе на рис. 2 представлены измеренные спектры поглощения света а) в невозбужденном образце; б) в накачиваемом образце при различных $-7 \text{ пс} \le \tau \le -2 \text{ пс. } B$ случае б) на спектрах обнаружились локальные увеличения поглощения в виде ЛМ либо излома. Ступенеобразный излом на спектре возникал, когда локальное увеличение поглощения было не настолько сильным, чтобы на фоне «гладкого» возрастания α с ростом $\hbar\omega_n$ образовывать ЛМ. В оптической спектроскопии подобную особенность называют «плечо». ЛМ или излом на спектре далее обобщенно называем «выступом». Будем характеризовать положение выступа на спектре энергией фотона $\hbar \omega_{jut}$, при которой располагается вершина выступа. Это либо вершина ЛМ, либо та точка излома на спектре, где находится максимум отрицательной кривизны. При изменении τ в указанной области положение выступов на спектре менялось приблизительно циклически, как представлено символами 1 на графике $\hbar \omega_{jut} = f(\tau)$, рис. 8. Средняя скорость такого перемещения выступа примерно 6 мэВ \mathbb{Z} /пс.



Рис. 8. (В цвете онлайн.) Зависимости энергии фотона $\hbar\omega_{jut}$, при которой в спектре поглощения располагается вершина выступа, от времени задержки τ , когда вершина зондирующего импульса сдвигается вдоль фронта (1), вдоль спада (2), в области вершины импульса *s*-излучения (3–5) (подробные пояснения см. в тексте)

При той же W_{ex} , но большей на 1.8 пс длительности (FWHM) импульсов накачки и зондирующего вместо выступа на спектре при $\tau = -2$ пс возникал локальный минимум. С ростом задержки при $\tau = -2, 0, 2$ пс на спектре поглощения, приблизительно при фиксированных энергиях фотонов, возникали два ЛМ. Эта модуляция нивелировалась при $\tau = -3, -1, 1, 4$ пс. Такое циклическое изменение модуляции для интервала $\tau = 0-4$ пс иллюстрируст рис. 9. Значениям τ и $\hbar \omega_{jut}$ указанных ЛМ соответствуют на рис. 8 символы 3, 4, а τ и энергии фотона, при которых провал между ЛМ достигал наибольшей глубины — символы 5. В области задержек 4 пс $\leq \tau \leq 12$ пс измеренную пока при трех значениях au модуляцию спектра можно приближенно характеризовать как образование одного «широкого» выступа, перемещение которого по спектру показано на рис. 8 символами 2.

Вырисовывается следующая картина. В области $\tau < -2$ пс, когда вершина зондирующего импульса «сдвигалась» вдоль фронта *s*-излучения, перемещение выступов по спектру соответствовало осцилляциям поглощения света с разными энергиями фотонов, когда спектр фазовых постоянных ос-



Рис. 9. а) Спектры поглощения зондирующего импульса света при задержке τ [пс]: 0 (1), 1 (2), 2 (3), 4 (4) и энергии накачки $W_{ex} = 1.6$ отн. ед. Для наглядности спектры 1–3 сдвинуты по оси ординат относительного своего истинного положения на величину, указанную справа от кривых. Штриховыми линиями показаны математически нивелированные спектры поглощения; 6) Спектры фазовых постоянных первой ϕ_1 (3) и второй ϕ_2 (2) гармоник при $W_{ex} = 0.2$ отн. ед. и первой ϕ_1 (1) гармоники при $W_{ex} = 1.6$ отн. ед.

цилляций квазилинейный. При фиксированном значении τ спектральный интервал между двумя выступами $\xi_{T2} \approx 22$ мэВ. В области значений τ от -2 пс до 4 пс, когда вершина зондирующего импульса «сдвигалась» в области вершины импульса *s*-излучения, возникновению и исчезновению ЛМ соответствует спектр фазовых постоянных осцилляций, имеющий форму меандра (кривая 1 на рис. 96), подробнее см. в разд. 7. Спектральный интервал между ЛМ составлял $\xi_{T1} \approx 13$ мэВ. В области $\tau > 6$ пс, когда вершина зондирующего импульса сдвигалась вдоль спада *s*-излучения, спектр фазовых постоянных осцилляций поглощения подобен отрезку параболы с отрицательным коэффициентом. В значительной части спектра поглощения его модуляция менялась синхронизовано (но не везде синфазно). Приближенно повторяющееся (циклическое) появление и исчезновение локальных особенностей, составляющих автомодуляцию спектра поглощения, наблюдалось и при изменении энергии W_{ex} , но теперь уже при фиксированном значении $\tau = 3$ пс. Это описывается в работе [51].

Из обнаруживаемого циклического изменения модуляции спектра поглощения естественно следовало следующее предположение. Поглощение зондирующего импульса с «фиксированной» энергией фотона $\hbar\omega_p$, выбранной с учетом модуляции спектра, должно иметь компоненту, осциллирующую а) с изменением т при фиксированной величине W_{ex} ; б) с изменением W_{ex} при фиксированной задержке т. Осциллирующий вклад в зависимость $\alpha(\tau)$ для случая а) был обнаружен в работе [52]. На зависимости $\alpha(\tau)$, измеренной при $\hbar\omega_p = 1.44$ эВ и представленной кривой 1 на рис. 10, наблюдалось монотонное уменьшение интервала между вершинами выступов, происходившее при изменении au(об этом еще см. в разд. 7). Осцилляционная компонента $\delta \alpha(\tau)$, представляющая разность между экспериментальной зависимостью $\alpha(\tau)$ (кривая 1) и ее гладкой компонентой (кривая 2), показана кривой 3на том же рисунке. Для случая б) осциллирующий вклад в зависимость $\alpha(W_{ex})$ при фиксированных τ и $\hbar \omega_p$ был обнаружен в работе [52].

Таким образом, выявилось, что модуляция спектра поглощения меняется циклически (осциллирует) при изменении задержки τ или энергии W_{ex} . В согласии с этим, в поглощении зондирующего импульса с «фиксированной» энергией фотона возникает компонента, осциллирующая при изменении указанных параметров. Дальнейшее исследование этих осцилляций описывается в последующих разделах.

7. ЧАСТОТА МОДУЛЯЦИИ

Циклически меняющуюся модуляцию можно представить внутри спектрального периода Δ_{LO} как разность экспериментального α и математически нивелированного $\alpha_F(\hbar\omega)$ спектров поглощения: $\alpha_u = \alpha - \alpha_F = f(\omega, \tau)$. Из совокупности спектров $\alpha_u = f(\hbar\omega)$ для разных задержек -4 пс $> \tau > 4$ пс были получены зависимости $\alpha_u = f(\tau)$ при различных $\hbar\omega$ и W_{ex} . Зависимости $\alpha_u = f(\hbar\omega)$ и $\alpha_u = f(\tau)$, которые будем называть экспериментальными, представляли колебания. В указанном интервале задержек τ оказалось возможным приближенно представить зависимость $\alpha_u = f(\tau)$ при энергиях $W_{ex} = 0.2, 0.8$ отн.ед. как сумму постоянной A_0 и двух гармоник:

$$\alpha_u = A_0 + A_1 \cos(2\pi F \tau + \phi_1) + A_2 \cos(4\pi F \tau + \phi_2). \quad (22)$$

При $W_{ex} = 1.6$ отн.ед. в подобном представлении нет второй гармоники, т. е. $A_2 = 0$. Параметры A_0 , $A_i, F, \phi_i,$ где i — номер гармоники, определялись подгонкой. Рассчитанные при подстановке этих параметров в (22) зависимости $\alpha_u = f(\tau)$ и полученные из них $\alpha_u = f(\hbar \omega)$ удовлетворительно отображали экспериментальные зависимости, см. рис. 2 и рис. 3 в [53]. Таким образом, модуляция зависимости $\alpha_u = f(\tau)$ коэффициента поглощения света с фиксированной энергией фотона $\hbar\omega$ может быть представлена как автоколебания с частотой F, составленные одним или еще и вторым (с частотой 2F) гармоническими колебаниями, плюс постоянная A₀. При фиксированной энергии $W_{ex} \leq 1.6$ отн. ед. частота F не зависела от $\hbar\omega$ в заметной части интервала Δ_{LO} . Это говорит о синхронизации автомодуляции поглощения света с разными $\hbar\omega$. Такую модуляцию будем называть синхронизованной. Вышеизложенное количественно поясняет циклическое повторение формы автомодуляции спектра поглощения через время $T_{\alpha} = F^{-1}$. Полученные указанным образом три экспериментальных значения F представлены символами 1 в функции от W_{ex} на рис. 11*а*. Такая зависимость $F(W_{ex})$ объясняла еще циклическое появление и исчезновение локальных особенностей, составляющих автомодуляцию спектра поглощения, при изменении энергии импульса накачки W_{ex} и фиксированной задержке τ [51].

В работе [15] было установлено, что энергия *s*-излучения, интегрального по спектру, пропорциональна W_{ex} . Отсюда предполагалось, что и максимальная интенсивность $I_{\Sigma-max}$ *s*-излучения, интегрального по спектру, пропорциональна энергии W_{ex} . Позднее появилась возможность измерять хронограммы излучения, и этому предположению не противоречили изменения $I_{\Sigma-max}$ при изменении W_{ex} в работе [54]. С учетом этого удается получить оценку зависимости F от интенсивности *s*-излучения. Сначала сделаем оценку интенсивности $I_{\Sigma-max}$ в абсолютных единицах для эксперимента с $W_{ex} = 1.6$ отн. ед. В единице объема скорость генерации излучения со средней по его спектру энергией фотона $\hbar\omega = 1.4$ эВ равна

$$\chi = \frac{\hbar\omega}{\tau_R} \left(n_{max} - \frac{n_{max}}{e} \right) =$$

= 3.4 \cdot 10^{29} \cdot B \cdot cm^{-3} \cdot c^{-1}. (23)

Максимальная плотность n_{max} носителей заряда в GaAs при его накачке пикосекундным импульсом света с диаметром фокусного пятна $D_{ex} = 0.06$ см определялась по ширине запрещенной зоны E_q , перенормированной из-за кулоновского взаимодействия носителей и, соответственно, зависящей от их плотности [25]. Значение E_q определялось по длинноволновому краю интегрального по времени спектра *s*-излучения. В работе [16] с условиями экспериментов, близкими к рассматриваемому случаю, были получены зависимости $n_{max}(D_{ex})$ и $\tau_R(D_{ex})$, где τ_R — характерное время релаксации s-излучения. В соответствии с этими зависимостями $n_{max} = 6.06 \cdot 10^{18}$ см⁻³, $\tau_R = 13$ пс при $D_{ex} = 0.06$ см. Скорость генерации излучения в зондируемой части активной области слоя GaAs равна

$$X = \chi(\pi D_p^2/4)d = 4.34 \cdot 10^{22} \text{ sB} \cdot \text{c}^{-1}, \qquad (24)$$

здесь $D_p \approx 0.3$ мм — диаметр (FWHM) зондирующего импульса, d = 1.5 мкм.

Интенсивность излучения, выходящего из зондируемой части активной области, равна

$$I_{\Sigma} \approx X/\pi D_p d = 4.9 \cdot 10^8 \text{ Br/cm}^2.$$
 (25)

Считая эту интенсивность излучения максимальной $I_{\Sigma-max}$ при $W_{ex} = 1.6$ отн. ед., можем теперь хронограмму *s*-излучения представить в абсолютных единицах. Сопоставляя ее затем с хронограммой накачки, определяем мгновенные интенсивности I_{Σ} *s*-излучения в течение той модуляции, для которой преобразованием (22) определялась частота *F*. Полагая, что интенсивности $I_{\Sigma-max}$ соотносятся, как энергии накачки, получаем их абсолютные значения для двух оставшихся энергий $W_{ex} = 0.2$, 0.8 отн. ед., а потом вышеописанным способом определяем I_{Σ} . На основании таких оценок получен график зависимости $F = f(I_{\Sigma})$, рис. 11*a*. На графике каждый горизонтальный отрезок показывает интервал интенсивности I_{Σ} , на протяжении которого частота синхронизованной модуляции оставалась приблизительно неизменной, а точки, показанные символами 1, обозначают частоту F при средней интенсивности $I_{\Sigma-m}$ такого интервала.

Зависимости $F = f(I_{\Sigma-m})$ не противоречит и модуляция спектра поглощения в интервале τ от -7 пс до -2 пс. Эта модуляция описана в начале разд. 6. Частота F для этой модуляции определяется с помощью графиков экспериментальных зависимостей $\hbar \omega_{jut} = f(\omega)$, см. рис. 8. Из приблизительно эквидистантных кривых, аппроксимирующих экспериментальные точки, следовало, что выступы возникали повторно в той же точке спектра через $T_{\alpha} \approx 4$ пс. Соответствовавшая этой модуляции средняя интенсивность $I_{\Sigma-m}$ в указанном временном интервале определена описанным выше способом. Полученная в результате частота F = 0.25 ТГц при $I_{\Sigma-m} = 0.16 \ \Gamma \mathrm{Bt} \mathrm{Z}/\mathrm{cm}^2$ представлена символом 2на рис. 11а и согласуется с линейной аппроксимацией 4 экспериментальной зависимости $F = f(I_{\Sigma-m})$.

Фундаментальное поглощение света связано с функциями распределения электронов соотношением (4). Учитывая это, вышеописанные осцилляции модуляции поглощения обнаруживают синхронизованные осцилляции населенности электронов. Инверсная населенность уровней в области дна зоны проводимости осциллирует из-за предположительно межзонных осцилляций электронов, возбуждаемых полем *s*-излучения. А населенность расположенных выше уровней осциллирует для поддержания детального равновесия, как описано в разд. 5. При межзонных осцилляциях электрон совершает прямые оптические переходы между двумя квантовыми состояниями, одно из которых находится в зоне проводимости, а другое — в валентной зоне. В таком представлении F является не только частотой осцилляций поглощения, но одновременно и частотой межзонных осцилляций электронов. Последние осцилляции аналогичны тем анализировавшимся в теории возмущений осцилляциям системы между двумя состояниями с разными энергиями, которые должны возникать при наличии периодического возмущения с резонансной или близкой к ней частотой [55]. Зависимость $F = f(I_{\Sigma})$ свидетельствует о том, что частоту осцилляций определяет интенсивность интегрального по спектру *s*-излучения. С появлением возможности измерения хронограмм излучения уточнилось, что это относится к синхронизованным осцилляциям коэффициентов поглощения света с разными энергиями фотонов (кратко, к синхронизованной модуляции поглощения).

На рис. 10 приведена осциллирующая зависимость коэффициента а поглощения зондирующего импульса с энергией фотона $\hbar \omega_{p1} = 1.44$ эВ в функции от задержки т. Как следует из хронограмм на рис. 3, эта задержка менялась так, что вершина зондирующего импульса перемещалась а) вблизи максимума *s*-излучения, где I_{Σ} меняется мало и немонотонно; б) при сильном возрастании интенсивности I_R (вдоль фронта) *s*-компоненты с энергией фотона $\hbar \omega_{s1} = \hbar \omega_{p1} - \Delta_{LO} = 1.40$ эВ. Если бы частота F осцилляций коэффициента α зависела только от I_{Σ} , то она при том же возрастании τ менялась бы или немонотонно, преимущественно уменьшаясь, или оставалась неизменной. Но этого не происходит. Учитывая трансляцию модуляции населенности электронов по зоне проводимости, видимо, указанная интенсивность I_R определяет период T_{α} осцилляций поглощения света с энергией фотона $\hbar \omega_{p1}$. Из графиков $\alpha(\tau)$ и $I_R(t)$ (соответственно рис. 10 и 3) следует, что период T_{α} уменьшался и, значит, частота F возрастала при возрастании I_R . Соответствующая зависимость $F(I_R)$ представлена на рис. 116 символами 1. Влияния на эту зависимость синхронизации с осцилляциями поглощения света с другими $\hbar\omega$ не наблюдалось, видимо, поскольку не удовлетворялись условия синхронизации, о которых см. разд. 10. Уточним еще, что на рис. З показана хронограмма, измеренная [12] для s-компоненты с максимумом интенсивности при $\hbar \omega_s = 1.401$ эВ, а не при $\hbar \omega_{s1} = 1.40$ эВ. Но при спектральной ширине 7.6 мэВ измеряемой s-компоненты (это обеспечивало интенсивность, требуемую для пикосекундного временного разрешения измерений) различие в 1 мэВ не существенно.

В согласии с вышеизложенным предполагаем, что частоту собственных осцилляций электронов между двумя энергетическими уровнями, разность энергий которых равна $\delta E > E_g$, определяет интенсивность I_R резонансной *s*-компоненты излучения, у которой энергия фотона $\hbar \omega = \delta E$. Оценить спектральную ширину $\delta \hbar \omega$ такой компоненты можно попробовать из принципа неопределенности [56],

$$\delta_1 \hbar \omega \ge \hbar T_\alpha = 0.66 \text{ M} \Im B,$$
 (26)

где $T_{\alpha} = 1$ пс. При близкой спектральной ширине $\delta_2 \hbar \omega \approx 0.4$ –0.8 мэВ измеряемой части зондирующего импульса удавалось регистрировать модуляцию



Рис. 10. Зависимости коэффициента поглощения α от задержки τ при $\hbar \omega_p = 1.44$ эВ (1), ее гладкой $\alpha(\tau)$ (2) и осцилляционной $\delta \alpha(\tau)$ (3) компонент

поглощения света с периодами $T_{\alpha} \geq 1$ пс. В реальном времени измерялась модуляция поглощения спектральных компонент шириной $\delta_3\hbar\omega = 0.5$ мэВ мощного зондирующего импульса [57,58]. Поскольку три указанных ширины, $\delta_1\hbar\omega$, $\delta_2\hbar\omega$, $\delta_3\hbar\omega$, близки, можно принять их среднее $\delta\hbar\omega \approx 0.6$ мэВ за ширину резонансной *s*-компоненты, интенсивность I_R которой определяет частоту собственных осцилляций электронов.

Оценка интенсивности I_R s-компоненты с энергией фотона $\hbar \omega_{p1}$ и спектральной шириной $\delta \hbar \omega$ была выполнена по следующей схеме, близкой к методу определения I_{Σ} . Используется сделанная выше оценка $I_{\Sigma-max} = 0.49 \ \Gamma \text{Bt} \square/\text{см}^2$. Определяется отношение S_m/S_{Σ} , где $S_{\Sigma} = 49.9$ отн. ед. — площадь спектра излучения в тот момент t_{max} , когда достигается интенсивность $I_{\Sigma-max}$, а $S_m = I_R \delta \hbar \omega =$ = 0.83 отн. ед. — часть площади, занимаемая компонентой I_R в спектре излучения в момент t_{max} . Определяется интенсивность компоненты излучения $I_R = I_{\Sigma-max}(S_m/S_{\Sigma}) = 8.2 \cdot 10^6 \text{ BTC/cm}^2$ в момент t_{max} . Зная I_R в момент t_{max} , можно перевести хронограмму компоненты из относительных в абсолютные единицы. Такой оценке соответствуют экспериментальные точки зависимости $F(I_R)$, показанные символами 1 на рис. 116.

Таким образом, можно принять, что частоту собственных осцилляций электронов определяет интенсивность I_R соответствующей резонансной *s*-



Рис. 11. (В цвете онлайн.) а) Зависимости частоты F осцилляций поглощения света от энергии импульса накачки W_{ex} (1), от средней $I_{\Sigma-m}$ (1, 2) и мгновенной I_{Σ} интенсивностей s-излучения, интегрального по спектру. Горизонтальный отрезок показывает интервал интенсивности I_{Σ} , на протяжении которого частота синхронизованной модуляции оставалась приблизительно неизменной. Приведены также частота автомодуляции огибающей импульса лазерного излучения в работе [1], см. разд. 9 (3) и аппроксимация (4) экспериментальных точек (1–3) линейной зависимостью $F = f(I_{\Sigma-m})$. 6) Зависимость частоты F осцилляций поглощения света с энергией фотона $\hbar \omega_{p1} = 1.44$ эВ от интенсивности I_R *s*компоненты с энергией фотона $\hbar \omega_{s1} = 1.401$ эВ (1), средняя интенсивность I_M синхронно модулированных с частотой F = 0.48 ТГц *s*-компонент (2), аппроксимация (3) экспериментальных точек 1, 2 отрезком параболической зависимости $F = f(I_R)$, для наглядности

компоненты. S-излучение представляет собой световой континуум, в котором І_R существенно меняется с $\hbar\omega$. Синхронизованная модуляция поглощения означает, что происходят связанные синхронизованные межзонные осцилляции электронов, т. е. осцилляции электронов между одной парой уровней происходят синхронизовано с осцилляциями электронов между другими парами уровней с другими значениями δE и I_R . В этой ситуации частоту синхронизованных осцилляций может определять помимо I_{Σ} , возможно, еще и средняя интенсивность I_M sкомпонент. Подразумевается средняя для той части спектра *s*-излучения, которая создает синхронизованную модуляцию соответственной области спектра поглощения. Экспериментальных данных хватает пока только на то, чтобы показать это для осцилляций с частотой F = 0.48 ТГц. Сделаем оценку I_M для этого случая.

Фазовая характеристика модуляции поглощения, следующая из фурье-разложения (22), для указанного случая имеет форму приблизительно прямоугольного меандра, см. рис. 96. Скачок фазы между верхним и нижним горизонтальными участками меандра равен π . Сопоставляя мгновенный спектр *s*-излучения в момент t = 14 пс (соответствующий $\tau \approx 0$, см. кривую 2 на рис. 3 в [12]) с фазовой диаграммой, определяем границы $\hbar\omega_1 = 1.391$ эВ, $\hbar\omega_2 = 1.418$ эВ той части (обозначим ее 1) спектра, внутри которой осцилляции синхронизованы. Для указанного времени t интенсивности излучения интегрального по части 1 спектра $(I_{\Sigma-1})$ и по всему спектру ($I_{\Sigma} = 0.408 \ \Gamma \text{Bt} \square / \text{см}^2$) относятся, как площади под спектральными кривыми части 1 спектра $(S_1 = 38.3 \text{ отн. ед.})$ и всего спектра (S = 47.2 отн.)ед.). Отсюда получаем $I_{\Sigma-1} = 0.33 \, \Gamma \text{Bt} \Xi/\text{см}^2$. Предполагаем, что часть 1 спектра разбита на N равных интервалов шириной $\delta\hbar\omega = 0.6$ мэВ, откуда N = $=(\hbar\omega_2-\hbar\omega_1)/\delta\hbar\omega\approx 45.$ С помощью этого получаем оценку $I_M = I_{\Sigma-1}/N \approx 7.3 \text{ MBt} \square/\text{см}^2$. Соответствующая этой интенсивности и частоте F = 0.48 ТГц точка, показанная символом 2 на рис. 116, согласуется с предположением, что $F(I_M) \approx F(I_R)$. Мы отметили это обстоятельство как возможный первый шаг на пути к выяснению связи между частотными зависимостями собственных и синхронизованных осцилляций.

Подчеркнем еще, что зависимость $F = f(I_{\Sigma})$ на рис. 11*a* обнаруживает следующее важное свойство синхронизованной модуляции поглощения, отображаемое горизонтальными прямолинейными отрезками, составляющими график зависимости. Хотя частота *F* зависит от интенсивности *s*-излучения, которая непрерывно меняется во времени, но при образовании синхронизованной модуляции ее частота *F* становится на некоторое время устойчивой к изменению интенсивности *s*- излучения, оставаясь неизменной. Это тоже может составить предмет будущих исследований.

Таким образом, частотные характеристики осцилляций поглощения света представляются на сегодня экспериментальными зависимостя-МИ $F(I_{\Sigma})$ для синхронизованных осцилляций и $F(I_R)$ для собственных осцилляций. Оценка по теории возмущений интенсивности излучения, возбуждающего осцилляции электронов, которые приводили бы к модуляции поглощения с частотой F = 0.48 ТГц, в 19 раз меньше оценки интенсивности $I_M \approx 7.3 \text{ MBt} \square/\text{см}^2$ или $I_R \approx 7.7 \text{ MBt} \square/\text{сm}^2$, полученной выше из эксперимента. Очевидно, условия, в которых экспериментально обнаруживаются описываемые в обзоре оспилляции, находятся за рамками применимости теории возмущений.

8. ПЕРЕКЛЮЧЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ МОД ИЗЛУЧЕНИЯ И СИНХРОНИЗАЦИЯ МЕЖЗОННЫХ ОСЦИЛЛЯЦИЙ ЭЛЕКТРОНОВ — СЛЕДСТВИЕ ВЫНУЖДЕННОГО КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ МОД

В физике полупроводниковых лазеров известно явление, называемое переключением спектральных мод излучения. В нашем случае — это когда на месте ЛМ интерференционной картины спектра излучения со временем образуются локальные минимумы, а на месте локальных минимумов — ЛМ. В монографии [59] приведены допускаемые причины этого явления, в частности, флуктуации спектра спонтанного излучения. Описываемые ниже результаты экспериментальных исследований обнаруживают еще один механизм переключения мод. В его основе лежит вынужденное комбинационное рассеяние (ВКР) *s*-компонент. О ВКР вообще см. [60,61]. Есть основания считать, что и синхронизацию осцилляций электронов осуществляет ВКР, по крайней мере в описываемой ниже ситуации. В ней ВКР предположительно происходит с участием взаимодействия электронов в валентной зоне, которое усиливается, когда входит в состав ВКР. Возникает ВКР исходно для того, чтобы скомпенсировать те отклонения населенности носителями энергетических уровней, которые возникают при осцилляциях электронов.

Как описано в разд. 4, в начале *s*-излучения на его спектре выделились эквидистантно расположенные ЛМ, образованные *i*-модами (см. рис. 4). Такая модуляция спектра слабела со временем. К моменту t = 14 пс в спектре остались явно выделенными только две *i*-моды. Ко времени t = 20 пс изначально возникшие ЛМ заменились слабыми локальными минимумами. А на спектре, посередине между *i*-модами, проявились четыре слабых новых ЛМ, означающих усиление *h*-мод. Из этих слабых ЛМ ко времени t = 26 пс значительно усилился ЛМ, соответствующий *h*-моде с $\hbar\omega_s \approx 1.40$ эВ, и в меньшей степени ЛМ при $\hbar\omega_s \approx 1.39$ эВ, остальные ЛМ нивелировались. Сосредоточим внимание на том, что вместо двух ЛМ, образованных сначала на спектре i_1 - и i_2 -модами с $\hbar\omega_s \approx 1.400$ эВ и $\hbar\omega_s = 1.405$ зВ, возник затем ЛМ с $\hbar\omega_s \approx 1.400$ зВ, образованный *h*-модой. Это преобразование на спектре, иллюстрируемое кривыми 2-5 на рис. 46, можно называть переключением мод.



Рис. 12. Изменение со временем а) интенсивности модуляционной компоненты моды δI_s , нормированной на интенсивность моды на сглаженном спектре I_{s-sm} , при энергиях фотона излучения $\hbar\omega_s = 1.395$ эВ (кривая 1) и 1.4 эВ (кривая 2); 6) суммарной интенсивности $I_{(i1+i2)}$ мод i_1 и i_2 (кривая 3) и производной $d(\delta I_{s-h}/I_{h-sm})/dt$ в области, где эта производная положительная (кривая 4). I_{th} — пороговая для образования ВКР сумма интенсивностей мод i_1 и i_2

8.1. Доказательство ВКР спектральных мод

Из-за отсутствия полноценной аналитической теории изучаемой области будем в дальнейшем изложении, соответствующем работе [47], использовать известные соотношения, близкие к нашим случаям, порою адаптируя их к ним. Чтобы исключить из рассмотрения изменение модуляции просто при релаксации излучения, использована нормировка. Для i_1 -, i_2 - и h-мод определено изменение со временем модуляционной компоненты интенсивности моды, показанной на рис. 4a, нормированной на интенсивность моды на сглаженном спектре I_{s-sm} :

$$\delta I_S / I_{s-sm} = f(t). \tag{27}$$

На рис. 12а представлены графики зависимости (27) для i_2 - и h-мод (кривые 1 и 2). Для i_1 -моды зависимость (27) не иллюстрируется, поскольку аналогична зависимости для i_2 -моды. Из графиков следует, что при t > 32 пс отношение $\delta I_S/I_{s-sm}$ не меняется со временем. Таким образом, нормировка позволила разделить по времени области линейного и нелинейного изменений модуляции спектра. Установившаяся к $t \approx 32$ пс модуляция сохраняется при релаксации излучения и далее благодаря брэгговской решетке. В данном разделе внимание сосредоточено на нелинейном изменении модуляции спектра в интервале 6 пс < t < 32 пс, где зависимости (27) соответствуют ВКР между i_1 -, i_2 - и h-модами, как показано далее.

В известных нам монографиях, например [60], обычно теоретически рассматривается ВКР двух мод при фиксированной интенсивности «накачивающей» моды и отмечается, что развитая теория — это грубое приближение. Комбинационный переход приводит к поглощению волны с частотой ω_1 и усилению волны с частотой ω_2 . Его характеризует следующее соотношение. Изменение среднего числа комбинационных фотонов волны с частотой ω_2 на единицу длины равно

$$dn_2/dz = (G_R - \alpha_2)n_2,$$
 (28)

где G_R играет роль коэффициента вынужденного усиления, пропорционального интенсивности I_1 накачивающей моды,

$$G_R \propto I_1(\rho_e - \rho_f),\tag{29}$$

 ρ_e и ρ_f — населенности состояний начального $|e\rangle$ и конечного $|f\rangle$, α_2 — коэффициент потерь на частоте ω_2 . Изменение длины z сопровождается изменением времени t, в течение которого происходит ВКР. Поэтому соотношение (28) с учетом (29), повидимому, можно упрощенно представить в более близком для нашего случая виде:

$$dI_2/dt \propto I_1 I_2 - \eta I_2, \tag{30}$$

где η — константа с размерностью интенсивности света, I_2 — интенсивность усиливаемой моды.

В приведенном выше случае получают, что, вопервых, скорость энергообмена при ВКР должна быть пропорциональна интенсивностям взаимодействующих мод. В выбранном нами приближении функцию накачивающей моды предположительно выполняет сумма i_1 - и i_2 -мод, а усиливаемой модой можно считать h-моду. Во-вторых, ВКР возникает порогово, когда $I_1 > \eta$. Представленные на рис. 126 графики экспериментальных зависимостей (кривые 3 и 4), описываемые соотношениями

$$I_{i1+i2} = I_{i1} + I_{i2} = f(t), (31)$$

$$d(\delta I_{s-h}/I_{h-sm})/dt = f(t) \tag{32}$$

в области, где приведенная выше производная положительна, совпадают по форме при $I_{i1} + I_{i2} > I_{th}$ (физический смысл I_{th} выясняется несколько ниже). Таким образом, экспериментально обнаруживается возникающая порогово пропорциональность

$$d(\delta I_{s-h}/I_{h-sm})/dt \propto I_{i1} + I_{i2} - I_{th}.$$
 (33)

Обозначая δI^R_{s-h} вклад в величину δI_{s-h} предполагаемого ВКР, выражение (33) можно представить как

$$d(\delta I_{s-h}^R/I_{h-sm})/dt \propto I_{i1} + I_{i2} - I_{th}.$$
 (34)

Дифференцирование в левой части соотношения (34), см. [47], приводит его к виду

$$\frac{d(\delta I_{s-h}^R)}{dt} \propto I_{h-sm}(I_{i1}+I_{i2}) - I_{h-sm}I_{th} + \frac{\delta I_{s-h}^R}{I_{h-sm}}\frac{d(I_{h-sm})}{dt}, \quad (35)$$

близкому к приведенному выше для ВКР соотношению (30). Тем самым подтверждается, что энергообмен между i_1 -, i_2 -модами и h-модой осуществляется через ВКР и I_{th} — пороговая для образования ВКР сумма интенсивностей i_1 - и i_2 -мод. Наличие третьего слагаемого в (35), возможно, возникает из-за различия условий ВКР в теории [60] и в эксперименте.

8.2. Межзонные осцилляции электронов и ВКР

Для образования ВКР необходимо наличие отклонений, желательно противоположного знака, от квазиравновесного (в нашем случае метастабильного) распределения носителей заряда в энергетическом пространстве. Межзонные осцилляции электронов и создают такие отклонения. Метастабильным можно предполагать такое распределение носителей, при котором излучение «выжигает» определенное обеднение инверсной населенности энергетических уровней на дне зоны проводимости. Это — то обеднение, из-за которого возникают «гладкие» провал в области усиления и граничащий с ним выступ на спектре поглощения, показанные выше на рис. 7. Обеднение обеспечивает сбалансированность ЭТН и вынужденной излучательной рекомбинации носителей.

При межзонных осцилляциях электронов модулируется населенность энергетических уровней, между которыми осциллируют электроны. Поскольку интервал между ЛМ на спектре излучения $\xi \approx 10$ мэВ (см. рис. 4*a*), то этому соответствуют осцилляции спектра поглощения с похожим интервалом между ЛМ, представленные выше на рис. 9а. Близкие по форме, гладкие штриховые кривые на этом рисунке, нивелирующие экспериментальные спектры, показывают, какими бы были спектры поглощения при метастабильном распределении носителей. Изменение формы спектров при изменении au, демонстрируемое рис. 9а, создает следующее упрощенное представление. После установления метастабильного распределения одни группы электронов в процессе первого полупериода межзонной осцилляции рекомбинируют, излучая фотоны *i*₁- и *i*₂-мод и образуя на спектре поглощения два ЛМ. В то же время другая группа электронов поглощает фотоны *h*-моды, углубляя локальный минимум между образовавшимися ЛМ. Так формируются спектры 1 и 3 на рис. 9а. В следующие полпериода осцилляции происходит обратное. Две группы электронов поглощают фотоны i_1 - и i_2 -мод, а третья группа излучает фотоны *h*-моды. В итоге спектр поглощения будет опять соответствовать метастабильному распределению: спектры 2 и 4 на рис. 9а.

Предположим теперь, какой может быть схема, при которой ВКР удовлетворяет следующим необходимым условиям: 1) должны выполняться законы сохранения энергии и импульса; 2) включать межзонные переходы электронов в поле излучения, составлявшие некоторую долю от осцилляционных переходов, т. е. комбинационные переходы при ВКР должны быть согласованы с межзонными осцилляциями электронов; 3) должен возникать как бы энергообмен между модами *s*-излучения; 4) ВКР стремится скомпенсировать отклонения от метастабильного распределения носителей заряда, создаваемые осцилляциями электронов.

Возможная схема ВКР, рис. 13а, относится к тому полупериоду осцилляций, когда осуществляется переход от максимальной модуляции населенности электронов к их метастабильному распределению. Два электрона с двух различных квантовых состояний энергетического уровня E_{h-c} зоны проводимости из области максимума населенности (создающего локальный минимум поглощения света) стимулированно рекомбинируют, излучая два *h*-фотона (на рис. 13*a* это переходы 1). Перейдя на уровень E_{h-v} валентной зоны, эти два электрона неупруго взаимодействуют, переходя с уровня E_{h-v} на уровни E_{i1-v} и E_{i2-v} (переходы 2). Затем с уровней E_{i1-v} и E_{i2-v} эти электроны, поглощая соответственно i_1 - и i_2 -фотоны, переходят на уровни $E_{i_1-c_1}$ и Е_{i2-с} зоны проводимости, нивелируя там минимумы населенности (переходы 3). Происходит сглаживание локальных экстремумов населенности электронов в зоне проводимости. В обратном направлении ВКР не происходит в следующий полупериод по двум причинам. Во-первых, межзонные переходы в этот полупериод создают и увеличивают отклонения от метастабильного распределения, а это противоречит пункту 4) схемы ВКР. Во-вторых, вероятность переходов, обратных переходам 2, очень мала. Приведенная схема ВКР, по-видимому, соответствует сохранению энергии и импульса.

Переходы 2 (см. рис. 13а) уводят электроны с уровня E_{h-v} валентной зоны. Тем самым они замедляют уменьшение инверсии населенности уровня E_{h-c} зоны проводимости, способствуя вынужденной рекомбинации электронов с этих уровней с излучением *h*-фотонов. Усилние этой рекомбинации вызывает увеличение ЭТН на уровень E_{h-c} , что тоже поддерживает излучательную рекомбинацию, но замедляет уменьшение максимума населенности, расположенного на этом уровне. Те же переходы 2 доставляют электроны на уровни E_{i1-v} и E_{i2-v} . Этим они тормозят уменьшение коэффициента поглошения *i*₁- и *i*₂-фотонов, соответственно, поддерживая их поглощение. Тем самым увеличивается и приток электронов, поглотивших эти фотоны, на уровни E_{i1-c} и E_{i2-c} . От этого замедляется ЭТН на эти уровни. В итоге в один полупериод осцилляций возникает ВКР, ЭТН на уровни $E_{h-c}, E_{i1-c}, E_{i2-c}$ пере-



Рис. 13. Схемы вынужденного комбинационного рассеяния: а) *h*-моды и *i*₁- и *i*₂-мод, б) *s*- и *p*-компонент с участием *LO*-фононов, см. разд. 9

распределяется, а излучение *h*-фотонов и поглощение i_1 - и i_2 -фотонов происходят в большем количестве, чем поглощение *h*-фотонов и излучение *i*₁- и *i*₂фотонов в следующий полупериод осцилляции, протекающий без ВКР. Этот дисбаланс поддерживается благодаря тому, что осцилляции электронов в поле *s*-излучения регулярно восстанавливают модуляцию населенности. Со временем это приводит к сглаживанию модуляции спектра излучения. Исчезает и брэгговская решетка, созданная самой интенсивной в начале *i*₁-модой. Потом возникает пик (максимум) на спектре излучения при энергии *h*-фотона $\hbar\omega_s = 1.40$ эВ. И уже *h*-мода создает свою брэгговскую решетку. В результате последнего на спектре выделялись и усиливались *h*-моды. Так, благодаря ВКР, возникающему из-за осцилляций населенности, происходит переключение мод.

8.3. Синхронизация осцилляций электронов посредством ВКР

Очевидно, имеется некоторая вероятность, что электрон, в процессе осцилляций излучающий hфотон, примет участие в ВКР. Координируя межзонные переходы электронов, происходящие с излучением фотонов h-моды и поглощением фотонов i_1 - и i_2 -мод, ВКР синхронизирует осцилляции. Предположению о синхронизации осцилляций благодаря ВКР соответствует и следующее изменение фурье-представления модуляции поглощения (22). При $W_{ex} = 0.2$ отн. ед. синхронизация осцилляций была не полной. Во-первых, фурье-представление состояло из первой и второй гармоник. Во-вторых, спектры фазовых постоянных этих двух гармоник $\phi_{1,2}(\hbar\omega_n)$ имели неправильную форму, например, кривые 3 и 2 на рис. 96. При увеличении энергии до $W_{ex} = 1.6$ отн. ед. вторая гармоника исчезла, а спектр фазовой постоянной первой гармоники $\phi_1(\hbar\omega_p)$ приобрел форму прямоугольного меандра (кривая 1 на рис. 9 δ). Это упорядочение модуляции сопутствовало увеличению интенсивности s-излучения, а значит, и ВКР. Последнее, усилившись, усовершенствовало синхронизацию осцилляций. Скачок фазы между верхним и нижним горизонтальными участками вышеуказанного меандра приблизительно равен π . Последнее соответствует противоположному направлению межзонных электронных переходов 1 и 3 в процессе ВКР, рис. 13а. Установление единой частоты F и единой фазовой характеристики — меандра — соответствует предположению о синхронизующем действии ВКР. Для других объектов синхронизующее действие ВКР проявлялось неоднократно, например, в генерации когерентных фононов [62]. С помощью ВКР происходит резонансная раскачка и фазирование молекулярных колебаний [63].

Очевидно, внутризонные электронные переходы 2, рис. 13*a*, интенсифицируются, когда становятся составной частью ВКР. То, что световым воздействием можно интенсифицировать внутризонные переходы электронов в GaAs, доказывает ВКР *s*-излучения и света накачки а) при участии плазмонов [24, 25]; б) создававшее *LO*-фононные осцилляции амплитуды спектра *s*-излучения в функции от энергии фотона накачки, кривая 3 на рис. 6*a* [49]. Селективное наведение или усиление определенных процессов в среде мощным световым воздействием известно и используется в активной спектроскопии.

Таким образом, показано, что переключение спектральных мод *s*-излучения является результатом их ВКР. При этом ВКР еще и синхронизует межзонные осцилляции электронов. В подтверждении того,что ВКР возникало для устранения отклонений от метастабильного распределения носителей, интегральный по времени спектр *s*-излучения и огибающая импульса *s*-излучения, интегрального по спектру, имели гладкую форму без локальных особенностей [12].

9. АВТОМОДУЛЯЦИЯ В GaAs СОБСТВЕННОГО И НАПРАВЛЯЕМОГО ИЗВНЕ ИЗЛУЧЕНИЯ

9.1. Исследование автомодуляции собственного излучения корреляционными методами

Межзонные осцилляции электронов, возбуждаемые излучением, должны происходить с эмиссией/поглощением фотонов. При синхронизации осцилляций это должно приводить к модуляции интенсивности излучения. Подобная модуляция проявлялась в экспериментальных работах. Так, с помощью интерферометрического автокорреляционного метода в работе [1] была обнаружена автомодуляция огибающей светового импульса длительностью (FWHM) 3 пс, генерировавшегося AlGaAs/GaAs-лазером. Частота модуляции была 1–1.1 ТГц при интенсивности излучения лазера примерно 1 ГВт¤/см². Такие параметры модуляции согласуются с зависимостью $F(I_{\Sigma-m})$, см. символ 3 на рис. 11а. В работе допускалось, что модуляция вызвана межзонными осцилляциями электронов (автор работы использовал термин «осцилляции Раби»). То, что период осцилляций $T_L = 0.9-1.0$ пс, несмотря на изменение интенсивности излучения в течение лазерного импульса, существенно не менялся со временем, теперь кажется допустимым, если осцилляции электронов относились к создающим синхронизованную модуляцию населенности. В работе [4] была обнаружена согласованная автомодуляция характеристик *s*-излучения, выходившего из торца слоя GaAs. Это следовало из экспериментально установленного соотношения

$$\frac{2\pi}{\Delta\omega_s} \approx \Delta\tau \approx \frac{4\Delta Y}{c_g} \approx T_s, \tag{36}$$

обозначения поясняются далее вместе с интерпретацией этого соотношения, выявляющей, что $T_s \approx 4$ пс — это период модуляции *s*-излучения. Соответствующая периоду частота F = 0.25 ТГц совпадает с частотой одной из экспериментальных точек на графике $F(I_{\Sigma-m})$ на рис. 11*a*.

Спектр исследовавшейся части *s*-излучения, интегральной по времени, оказался автомодулирован, рис. 14 кривые 2 и 4. Для спектра $W_{s-m} = f(\hbar\omega_s)$ степень модуляции можно представить по графику $(W_{s-m} - W_B)/W_B = f(\hbar\omega_s)$, вставка к рис. 14. Здесь W_{s-m} — энергия *s*-компоненты, интегральная по времени, $W_B = f(\hbar\omega_s)$ — участок параболы, касательный к спектру, например, кривая 5 на рис. 14. Объяснить такую модуляцию как результат образования резонатора торцами образца невозможно [4]. Известно [64], что при сложении двух гармоник, собственная частота которых отличается на $\Delta \omega_s$, биения результирующего колебания должны происходить с периодом $T_s = 2\pi/\Delta \omega_s$. Так что обнаруженная модуляция спектра *s*-излучения может рассматриваться как признак модуляции этого излучения с периодом T_s . Модуляция спектра лазерного излучения с подобным соотношением между интервалом, разделяющим ЛМ, и периодом T_L наблюдалась в работе [1].



Рис. 14. Спектры *s*-излучения при различных сдвигах δY фокусного пятна накачки к торцу образца: 0.16 мм (1); 0.18 мм (2); 0.20 мм (3); 0.24 мм (4). Приведен участок параболы, касательный к спектру (5). На вставке — спектры относительной модуляции $(W_{s-m} - W_B)/W_B = f(\hbar\omega_s)$ $\delta Y = 0.18$ мм (6), $\delta Y = 0.24$ мм (7). Для наглядности каждая кривая на рисунке и вставке к нему сдвинута по оси ординат относительно истинного положения на величину, указанную справа от кривой

В работе [4] был также поставлен опыт, в котором помимо накачки образец облучался извне еще мощным световым *p*-импульсом. Энергия фотона *p*-импульса равнялась $\hbar \omega_p \approx 1.43$ эВ. Измерялись зависимости $W_{s-m}(\tau)$, где τ — время задержки *p*-импульса относительно накачки. Обнаружилось, что зависимость энергии $W_{s-m}(\tau)$ для *s*₁-компоненты с энергией фотона $\hbar \omega_1 = 1.387$ эВ



Рис. 15. Зависимости от времени задержки τ энергии W_{s-m} s-излучения при фиксированной энергии фотона: $1 - \hbar \omega_s = 1.387$ эВ, $\delta Y = 0.29$ мм; $2 - \hbar \omega_s = 1.388$ эВ, $\delta Y = 0.15$ мм. Кривая 1 сдвинута по оси ординат относительно истинного положения на величину, указанную справа от кривой

и $\delta Y = 0.29$ мм промодулирована осцилляциями с периодом $\Delta \tau \approx T_s$ (рис. 15, кривая 1), а для s_2 -компоненты с $\hbar\omega_2 = 1.388$ эВ и $\delta Y = 0.15$ мм зависимость гладкая (рис. 15, кривая 2). δY сдвиг фокусного пятна накачки к торцу образца, уменьшающий исходную дистанцию Y = 1.2 мм. Причина осцилляций может состоять в следующем. Пусть в поле *s*-излучения происходят с эмиссией/поглощением фотона $\hbar\omega_1$ осцилляции электронов между уровнем E_{c-s} зоны проводимости и уровнем Е_{v-s} валентной зоны. Осцилляции модулируют населенность электронами уровня E_{c-s} . Аналогично в поле *р*-импульса возникают осцилляции электронов, в частности, между уровнем E_{c-p} зоны проводимости и уровнем E_{v-p} валентной зоны, происходящие с эмиссией/поглощением фотона $\hbar \omega_{p1} = \hbar \omega_1 + \Delta_{LO} p_1$ -компоненты *p*-импульса. Эти осцилляции модулируют населенность электронами уровня E_{c-p} . Уточним, что спектральная ширина *p*-импульса (FWHM) равна примерно 3.5 мэВ, к тому же m_e перенормируется из-за кулоновского взаимодействия носителей. Поэтому допустимо, что уровни E_{c-p} и E_{c-s} разделены интервалом $\hbar\omega_{LO}$. Исходные модуляции населенности уровня E_{c-s} и уровня E_{c-p} различны. Это различие приводит к нарушению детального равновесия переходов электронов с поглощением и излучением LO-фононов между этими уровнями. Чтобы восстановить его, а для этого нужно и синхронизовать модуляции этих уровней, возникает ВКР s₁и р₁-компонент. В ВКР участвуют переходы электронов между уровнями E_{c-p} и E_{c-s} , происходящие путем поглощения и излучения LO-фононов. Схема ВКР приведена выше на рис. 136. Интенсивность и направление ВКР зависят, в частности, от разности фазовых постоянных модуляций одного и другого уровня, которая меняется при изменении т. Из-за этого интенсивность ВКР должна модулироваться осцилляциями с периодом $\Delta \tau$, меняя с той же периодичностью энергию $W_{s-m}(\tau) s_1$ компоненты и энергию p_1 -компоненты, участвующих в ВКР. Подобное изменение $W_{s-m}(\tau)$ в функции τ и наблюдалось в эксперименте, рис. 15 кривая 1. Период $\Delta \tau$ равен наименьшему из исходных периодов двух синхронизуемых модуляций. Согласие $\Delta \tau$ с соотношением (36) позволяет считать, что наименьшим является период T_s модуляции sизлучения, а значит, и населенности уровня E_{c-s} . Заметим, что ВКР *s*-излучения, подобное описанному, но со светом накачки, создавало LO-фононные осцилляции на зависимости амплитуды спектра sизлучения от $\hbar \omega_{ex}$ (см. выше рис. 6*a*, кривая 3). Как оно влияет на другие параметры спектра sизлучения, на ЭТН и на обратимое просветление GaAs, фактически показано в работе [65].

Как обсуждалось выше, модуляции населенностей должны быть синхронизованы для поддержания детального равновесия внутри зоны проводимости. Для его восстановления возникает ВКР, благодаря чему модуляции становятся связанными. Здесь уместно напомнить следующее. Параметры осцилляторов — это период или частота осцилляций, их фазовая постоянная и амплитуда. Согласно работе [66], взаимодействие между осцилляторами селективно по отношению к этим параметрам. В нашем случае к этим параметрам надо еще, видимо, добавить скорость изменения со временем частоты осцилляций (частотную модуляцию). Если исходное различие параметров не выходит за определенные пределы (иначе, зоны захвата), то осцилляторы, взаимодействуя, синхронизуются. Синхронизация включает в себя 1) установление определенной разности фазовых постоянных осцилляторов, которая может быть и не нулевой; 2) установление одинаковой или кратной частоты осцилляторов; 3) энергообмен между осцилляторами. С последним согласуется вышеприведенное объяснение модуляции зависимости $W_{s-m}(\tau)$ для s_1 -компоненты. Если различие параметров осцилляторов оказывается вне области захвата, то, в частности, возможно гашение осцилляций. Последним, видимо, объясняется отсутствие модуляции зависимости $W_{s-m}(\tau)$ для s_2 -компоненты с $\hbar\omega_1 = 1.388$ эВ, рис. 15 кривая 2.



Рис. 16. Зависимости от сдвига δY : 1 — энергии V *s*-излучения из торца, интегральной в диапазоне $\hbar\omega_s = 1.385 - 1.390$ эВ; 2 и 3 (на вставке) — энергии W_{s-m} *s*-излучения при энергии фотона $\hbar\omega_s = 1.386$ эВ (кривая 3 измерена в отдельном опыте, где энергия излучения была больше, чем при измерении кривой 2)

На рис. 16 кривой 1 представлена зависимость $V(\delta Y)$, где V — энергия *s*-излучения из торца, интегральная и по времени, и по спектру в диапазоне $\hbar \omega_s = 1.385 - 1.390$ эВ. Зависимость $V(\delta Y)$ промодулирована так, что интервал между ЛМ $\Delta Y \approx 60$ мкм. Пространственный интервал между ЛМ *s*-излучения в GaAs должен составлять $L_m \approx c_0 T_s / n_g = 235$ мкм, где $n_g \approx 5.1 -$ групповой показатель преломления GaAs, $c_0/n_g = c_g - группо$ вая скорость. Каждый сдвиг $\delta Y = \Delta Y \approx L_M/4$ приводит к тому, что отраженная от торца s-компонента окажется в активной области в фиксированный момент времени сдвинутой по фазе на π . В активной области движущаяся к торцу *s*-компонента возбуждает осцилляции между одними парами квантовых состояний, а отраженная от торца s-компонента — между другими парами состояний. Возникает ВКР, стремящееся синхронизовать созданные модуляции населенности. Интенсивность ВКР должна меняться в функции от разности фазовых постоянных $\Delta \phi$ указанных *s*-компонент, а значит, от δY , приблизительно периодически. Зависимость $V(\delta Y)$ соответствует такому процессу синхронизации модуляций, сопровождаемому энергообменом между s-компонентами через ВКР, меняющемуся с равным π периодом при изменении $\Delta \phi$. По-видимому,

при каких-то $\Delta \phi$ происходит синхронизация, при других — гашение модуляций населенности, создаваемых *s*-компонентами, движущейся к торцу и отраженной от него. Поэтому зависимость $W_{s-m}(\hbar \omega_s)$ оказывается при изменении δY то модулированной, то гладкой, см. рис. 14.

На рис. 16 еще представлена зависимость от δY энергии W_{s-m} s-компоненты с $\hbar\omega_s = 1.386$ эВ, кривая 2. Эта зависимость модулирована практически так же, как $V(\delta Y)$. На вставке дан график $W_{s-m}(\delta Y)$ для *s*-компоненты с той же $\hbar \omega_s$, полученный в отдельном опыте, где W_{s-m} была больше, чем при измерении кривой 2. В этом случае зависимость $W_{s-m}(\delta Y)$ модулирована с интервалом 40 мкм между ЛМ. Такое уменьшение интервала согласовалось с уменьшением периода T_s (до 2.7 пс), которое должно возникать при увеличении интенсивности s-компоненты, сопровождавшем увеличение W_{s-m} . Это тоже свидетельствует о том, что модуляция зависимости $W_{s-m}(\delta Y)$ проистекает от модуляции *s*-излучения. В целом, сам факт согласованной, как показывает соотношение (36), автомодуляции характеристик *s*-излучения, их интерпретация, а также вытекающий из этого период T_s модуляции s-излучения, соответствующий частоте одной из экспериментальных точек на графике $F(I_{\Sigma-m})$ на рис. 11а, — все это указывает на автомодуляцию s-излучения, соответствующую автомодуляции населенности.

9.2. Автомодуляция зондирующего импульса в реальном времени

Наблюдать модуляцию на измерявшихся нами ранее хронограммах *s*-излучения практически невозможно из-за следующего. Ограниченная чувствительность ЭОК вынуждает увеличивать интенсивность измеряемой части s-излучения за счет увеличения ее спектральной ширины до 7.5 мэВ. А это уже сравнимо с периодом модуляции спектра *s*-излучения. Измеряется *s*-излучение, рассеянное в активной области, значит, усредненное по ней, выходящее ортогонально поверхности гетероструктуры. На крутых фронте и спаде импульса sизлучения модуляция становилась бы трудно заметной. Чтобы выявить ее, надо было бы к тому же сравнивать огибающие s-излучения при наличии и в отсутствие модуляции, что пока не осуществимо. Этих препятствий не возникает, если измеряется автомодуляция во времени *p*-компоненты зондирующего импульса, падающего на образец извне. Одно из преимуществ такого измерения в том, что излу-

чение на всей приемной площадке фотоприемника имеет приблизительно одинаковую фазу модуляции в один и тот же момент времени. Модуляция зондирующего импульса, возникавшая при его прохождении через гетероструктуру, когда в слое GaAs генерировалось *s*-излучение, была измерена в реальном времени в работе [57]. Измерялись, см. разд. 2, огибающие $I_p(t)$ *p*-компонент зондирующего импульса, энергия фотона которого $\hbar \omega_p = 1.44$ эВ. Для возможности измерений с ЭОК энергия зондирующего импульса более чем на порядок превышала энергию в экспериментах, в которых использовался корреляционный метод. Поглощение *p*-компоненты в GaAs, подвергнутом накачке, определяли, пользуясь выражениями (5) и (3). Изменение коэффициента поглощения *а* в зависимости от времени *t* определяли при различных временах задержки τ . Анализировали зависимость $\alpha(t)$, измеренную центральной частью зондирующего импульса, для которой исправление отклонений, связанных с аппаратной функцией ЭОК, было просто и надежно.

Примеры зависимостей $\alpha(t)$, которые получены из хронограмм $I_p(t)$, измеренных при разных τ , представлены на рис. 17. Как и предполагалось, зависимости $\alpha(\tau)$ модулированы. Их модуляция менялась при изменении τ . Для анализа модуляции поглощения *p*-компоненты при фиксированной τ удобнее выделить разность $\alpha_M = \alpha(t) - \alpha(t = 0)$. Обнаружилось, что $\alpha_M(t)$ можно аппроксимировать выражением, основной составляющей которого является участок синусоидальной зависимости:

$$\alpha_M = A \sin[(2\pi/T_M)(t + (\tau_0 - \tau)) + \phi] + kt + b, \quad (37)$$

где τ_0 — начальная задержка τ для каждой серии измерений для фиксированной *p*-компоненты, A амплитуда колебаний, T_M — период модуляции, ϕ — фазовая постоянная, k, b — константы. Примеры экспериментальной зависимости $\alpha_M = f(t)$ (сплошные линии) и ее синусоидальной аппроксимации (37) (штриховые) представлены на рис. 18.

Экспериментально полученные графики на рис. 17 и 18 показывают, что поглощение *p*-компоненты, а значит, и ее интенсивность модулируются при прохождении через GaAs, в котором высокая плотность $n = p \ge 1.3 \cdot 10^{18}$ см⁻³ неравновесных носителей и *s*-излучение. Параметры этой модуляции и ее соответствие процессу синхронизации через ВКР обсуждаются в разд. 10. Таким образом, экспериментально обнаруженная модуляция в реальном времени *p*-компоненты прямо подтверждает, что при прохождении через накаченный GaAs интенсивное электромагнитное



Рис. 17. Зависимости коэффициента поглощения $\alpha(t)$, полученные из хронограмм *p*-компоненты мощного зондирующего импульса для различных $\tau = -2 \operatorname{nc}(1), -1 \operatorname{nc}(2),$ 0 nc (3), 1 nc (4), 2 nc (5)



Рис. 18. Разность $\alpha_M = \alpha(t) - \alpha(t=0)$ (сплошные линии) и ее синусоидальная аппроксимация в соответствии с (37) (штриховые линии) для $\tau = -1$ пс (1), 0 пс (2), 2 пс (3)

излучение с $\hbar \omega > E_g$ автомодулируется. Предположительно это вызвано возбуждаемыми им межзонными осцилляциями электронов.



Рис. 19. Зависимости осциллирующей составляющей $\delta \alpha$ коэффициента поглощения от задержки τ для $\hbar \omega_p = 1.44$ эВ (p_1 -компонента) при $W_{ex} = 2.5$ отн. ед. и $W_p = 12$ отн. ед. (1), при $W_{ex} = 3.5$ отн. ед. и $W_p = 22$ отн. ед. (3), 27 отн. ед. (4), а также для $\hbar \omega_p = 1.4405$ эВ (p_2 -компонента) при $W_{ex} = 2.5$ отн. ед. и $W_p = 12$ отн. ед. (2). Приведена зависимость коэффициента поглощения α от задержки τ для p_1 -компоненты при $W_{ex} = 3.5$ отн. ед. (5). Штрихами показана гладко спадающая компонента этой зависимости. Сплошные линии здесь и на следующем рисунке проведены для наглядности

10. РОЛЬ АВТОСИНХРОНИЗАЦИИ МОДУЛЯЦИИ НАСЕЛЕННОСТИ ПРИ ЗОНДИРОВАНИИ

Численное моделирование показывает, что зондирующим гауссовым импульсом длительностью на полувысоте (FWHM) 10 пс выявить модуляцию поглощения света, когда период модуляции около 1 пс, мало реально, если импульс только пассивно поглощается в GaAs. Однако зондирование отображало такую модуляцию. Это объясняется процессом BKP, см. рис. 136, возникающим для синхронизации модуляций населенности уровней E_{c-p} и E_{c-s} , чтобы восстановить детальное равновесие. Как пояснялось в разд. 9, при изменении τ интенсивность ВКР должна осциллировать с периодом $\Delta \tau \approx T_s = 1/F$, меняя с той же периодичностью энергии s-компоненты и p-компоненты, участвующих в ВКР. Подобное изменение энергии выявилось в эксперименте: для s-компоненты это описано в разд. 9, а для p-компоненты — ниже. Процесс синхронизации модуляций населенности обеспечивает временное разрешение зондирования, позволявшее обнаружить пикосекундную модуляцию поглощения.

Возникновение при зондировании процессов, стремящихся синхронизовать названные модуляции населенности, подтверждалось экспериментально еще и соответствием модуляции поглощения следующему, уже называвшемуся в разд. 9, условию. Если исходное различие параметров не выходит за пределы зон захвата, то осцилляторы, взаимодействуя, синхронизуются. В противном случае возникают биения или еще более сильные искажения формы осцилляций, вплоть до их гашения [66]. В работе [57] зависимость $\alpha(\tau)$ определялась корреляционным методом по отдельности для p_1 и *p*₂-компонент зондирующего импульса. Середина р1-компоненты совпадала с максимумом спектра зондирующего импульса, прошедшего через образец в отсутствие накачки. Середина *p*₂-компоненты была сдвинута по спектру от середины p_1 -компоненты в коротковолновую сторону на 0.5 мэВ. Соответственно, ее интенсивность была меньше. Ширина каждой компоненты $\delta \hbar \omega_p = 0.4$ мэВ. На рис. 19 кривая 5 представляет пример измеренной модулированной зависимости $\alpha(\tau)$ для p_1 -компоненты. Зависимость $\alpha(\tau)$ можно разделить на две составляющие: гладко спадающую, показанную штрихами на рисунке, и осциллирующую $\delta \alpha(\tau)$. Последняя представляет разность между экспериментальной зависимостью $\alpha(\tau)$ и ее гладкой составляющей. Подразумевалось, что изменение энергий накачки W_{ex} и зондирующего импульса W_p меняет исходные параметры синхронизующихся модуляций. Обнаружилось, что сходную форму зависимость $\delta \alpha(\tau)$ приобретает только при определенных сочетаниях энергий W_{ex} и W_p. Это иллюстрируется на примере p_1 -компоненты, на рис. 19. При $W_{ex} = 2.5$ отн. ед. и $W_p = 12$ отн. ед. зависимость $\delta \alpha(\tau)$ представляла собой непрерывную череду близких по амплитуде, узких по оси au осцилляций, между которыми размещалась одна существенно более широкая осцилляция (кривая 1). Назовем такую форму

зависимости $\delta \alpha(\tau)$ *m*-формой. После увеличения W_p до 16.7 отн. ед. зависимость $\delta \alpha(\tau)$ стала походить на биения (на рис. 19 не показано). При $W_{ex} = 3.5$ отн. ед. и $W_p = 22$ отн. ед. на зависимости $\delta \alpha(\tau)$ образовалась широкая область τ , где осцилляции отсутствовали (кривая 3). Но когда, сохраняя $W_{ex} = 3.5$ отн. ед., увеличили W_p до 27 отн. ед., зависимость $\delta \alpha(\tau)$ стала опять сходной с *m*-формой (кривая 4). При одном и том же сочетании W_{ex} , W_p форма зависимости $\delta \alpha(\tau)$ для *p*₁- и *p*₂-компонент различалась, как иллюстрирует сравнение кривой 1 с кривой 2, измеренной для р₂-компоненты. Различие вызвано разной интенсивностью компонент и, возможно, чирпом зондирующего импульса [67], из-за которого реальные задержки au зондирования этими компонентами различались.

Из описанных измерений следует, что форма осцилляционной зависимости $\delta \alpha(\tau)$ меняется при изменении W_{ex} , W_p и спектральной компоненты *p*импульса вплоть до исчезновения (тушения) осцилляций на некотором интервале τ или, например, появления биений (кривая 2 на рис. 19). С другой стороны, при избранных сочетаниях W_{ex} и W_p график $\delta \alpha(\tau)$ становится подобным *m*-форме. Все это сочетается с названными выше характерными проявлениями взаимодействия связанных осцилляторов в случаях, когда условие синхронизации удовлетворяется или нет.

По измерениям в реальном времени, описанным в разд. 9, на рис. 20 представлена полученная зависимость поглощения $\alpha_{\Sigma}(\tau)$ для *p*-компоненты зондирующего импульса, где

$$\alpha_{\Sigma} = \alpha_0 - \ln(E_p^1/E_p^0)/d, \quad E_p = \int_{-8 \text{ nc}}^{8 \text{ nc}} I_p(t)dt. \quad (38)$$

 I_p — интенсивность *p*-компоненты в момент времени *t*, индексы «0» и «1» означают отсутствие и наличие накачки. Поглощение α_{Σ} осциллировало при изменении τ , как на аналогичных зависимостях, полученных корреляционным методом. Модуляция поглощения *p*-компоненты $\alpha_M(t)$ при фиксированной τ аппроксимировалась выражением (37) как участок синусоидальной зависимости. Ее период T_M осциллирует в функции τ , рис. 20. Границы изменения T_M не должны выходить за пределы $T_s < T_M < T_p$, где T_p и T_s — периоды исходных (т. е. если бы одна с другой не синхронизовались) модуляций населенности уровней E_{c-p} и E_{c-s} . Как объяснялось в разд. 9, период T_s равен периоду ос-



Рис. 20. Зависимости от задержки au коэффициента поглощения α_{Σ} , периода модуляции T_M и p-компоненты зондирующего импульса с $\hbar \omega_p = 1.44$ эВ

цилляций на зависимости $\alpha_{\Sigma}(\tau)$, который в данном случае примерно 3.3 пс.

Предположим следующее. При максимально достигавшейся степени синхронизации при каком-то значении au электроны интенсивно переходят с уровня E_{c-p} на уровень E_{c-s} , излучая LO-фононы (уровни определены в разд. 9). Из-за этого поглощение *р*-компоненты дополнительно возрастает, а T_M приближается к T_s. При минимальной степени синхронизации (или ее отсутствии) и другом значении au поток электронов с уровня E_{c-p} на уровень E_{c-s} слабее, добавка к поглощению меньше и T_M ближе к T_p . В таком представлении зависимости $\alpha_{\Sigma}(\tau)$ и $T_M(\tau)$ должны антикоррелировать, что приближенно и наблюдается, см. рис. 20. Осцилляции энергии *p*-компоненты (соответствующие осцилляциям α_{Σ}) в функции τ , как и вся картина поглощения зондирующего импульса в реальном времени (см. рис. 17, 18, 20), согласуются с представлением в разд. 9 и в начале настоящего раздела об участии *р*-компоненты в осциллирующем с τ BKP, синхронизующем модуляцию населенности.

Таким образом, при измерениях корреляционным методом и в реальном времени наблюдаемые изменения в поглощении зондирующего импульса, возникающие при варьировании его энергии и задержки, а также энергии накачки, подтверждают представление о возникновении процесса синхронизации модуляций населенностей, повышающего временное разрешение зондирования.

11. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Описанные экспериментальные исследования обнаружили цепь не предполагавшихся ранее следующих оптоэлектронных явлений, завершающихся автомодуляцией как фундаментального поглощения света, так и стимулированного излучения.

В начале мощной пикосекундной оптической накачки слоя гетероструктуры GaAs в нем возникает интенсивное пикосекундное стимулированное излучение. Каждая спектральная компонента стимулированного излучения генерируется когерентной. Стоячая волна самой интенсивной компоненты создает (выжигает) пространственную брэгговскую решетку обеднения населенности. Создаваемое решеткой отражение приводит к интерференции излучения, модулирующей его спектр.

Модуляция, аналогичная модуляции спектра излучения, возникает, повторяясь с периодом Δ_{LO} , в спектре поглощения света. Она интерпретируется как результат выжигания излучением обеднения инверсной населенности электронами энергетических уровней на дне зоны проводимости. Обеднение транслируется вверх по зоне для восстановления детального равновесия переходов электронов с излучением/поглощением *LO*-фононов. Распределение электронов в зоне проводимости становится нефермиевским.

Модуляция значительной части спектра поглощения синхронизованно осциллирует со временем. Возникают и не синхронизованные друг с другом модуляции поглощения импульсов света с разными $\hbar\omega$. Судя по модуляции различных характеристик излучения, его спектральные компоненты тоже модулированы во времени. Модуляция во времени поглощения и излучения интерпретируется как следствие межзонных осцилляций электронов, возбуждаемых полем излучения или еще и полем зондирующего света и происходящих с излучением/поглощением фотонов.

Во время осцилляций в периодическом возвращении к метастабильному распределению носителей принимало участие ВКР компонент излучения, возникавшее для устранения отклонений от метастабильного распределения носителей. Благодаря ВКР, во-первых, происходила синхронизация в противофазе модуляций соседних участков спектра поглощения, во-вторых, интерференционные максимумы на спектре излучения со временем менялись на минимумы, отчего интегральный по времени спектр был гладким.

Модуляция фундаментального поглощения и интенсивности зондирующего импульса света, подтвержденная измерениями в реальном времени, интерпретируется следующим образом. В поле импульса возбуждаются упомянутые межзонные осцилляции электронов, модулирующие огибающую импульса и населенность (*p*-) уровня, на который импульс генерирует электроны. Модуляция населенности *p*-уровня и модуляция инверсной населенности другого (s-) уровня синхронизуются (частоты модуляций становятся кратными) под влиянием процессов восстановления детального равновесия. Это происходит, если разность энергий уровней составляет $1\hbar\omega_{LO}$, $2\hbar\omega_{LO}$, $3\hbar\omega_{LO}$ и параметры обеих модуляций находятся в зонах захвата. Для переносов электронов в энергетическом пространстве, синхронизующих модуляции населенностей, возникает ВКР как зондирующего импульса, так и спектральной компоненты излучения, исходно возбуждающей модуляцию населенности *s*-уровня. В итоге огибающая зондирующего импульса модулируется с периодом синхронизованных осцилляций, а поглощение его энергии осциллирует в функции от его задержки относительно накачки. Последняя зависимость возникает, потому что задержка влияет на исходную разность фазовых постоянных, следовательно, и на синхронизацию обеих модуляций.

Учитывая «родственность» стимулированного и лазерного излучений, исследования модуляции дали новые объяснения таким формам нестабильности излучения полупроводниковых лазеров, как многомодовость, конкуренция и переключение спектральных мод, колебания интенсивности излучения.

Выявились эффекты, не имеющие на сегодня объяснения и ставящие вопросы, адресуемые нелинейной оптике полупроводников для решения в будущем. Каков механизм когерентизации спектральной компоненты собственного стимулированного излучения гетероструктуры? Каким образом электромагнитное поле собственного и зондирующего излучения так влияет на взаимодействие носителей заряда, что последнее не нивелирует обнаружившуюся модуляцию? Каков механизм синхронизации осцилляций поглощения света с разными энергиями фотонов, когда спектр фазовых постоянных осцилляций квазилинейный и когда осцилляции синфазны в части спектра? Из чего аналитически следуют частотные характеристики модуляции поглощения, установленные экспериментально? Все эти задачи требуют отдельных исследований.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Фотоника-2», регистрационный номер 122041900161-1.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. П. П. Васильев, КЭ 21, 585 (1994).
- Р. Гадонас, Р. Данелюс, А. Пискарскас, КЭ 8, 669 (1981).
- Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, Д. Н. Забегаев и др., ЖЭТФ 143, 634 (2013).
- Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, А. Н. Кривоносов и др., ФТП **39**, 681 (2005).
- Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, Д. Н. Забегаев и др., ПТЭ № 4, 108 (2011).
- H. H. Агеева, И. Л. Броневой, Д. Н. Забегаев и др. Ж. радиоэлектр. 11, 1 (2018); http://jre.cplire.ru/ jre/nov18/13/text.pdf
- И. Л. Броневой, Р. А. Гадонас, В. В. Красаускас и др., Письма в ЖЭТФ 42, 322 (1985).
- И. Л. Броневой, С. Е. Кумеков, В. И. Перель, Письма в ЖЭТФ 43, 368 (1986).
- D. Hulin, M. Joffre, A. Migus et al., J. de Phys. 48, 267 (1987).
- 10. A. M. Fox, R. J. Manning, and A. Miller, J. Appl. Phys. 65, 4287 (1989).
- Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, Е. Г. Дядюшкин и др., Письма в ЖЭТФ 48, 252 (1988).
- Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, Д. Н. Забегаев и др., ЖЭТФ 144, 227 (2013).
- I. L. Bronevoi, A. N. Krivonosov, and T. A. Nalet, Sol. St. Comm. 98, 903 (1996).
- 14. Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, А. Н. Кривоносов и др., ФТП 36, 144 (2002).
- И. Л. Броневой, А. Н. Кривоносов, ФТП 32, 537 (1998).
- Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, Д. Н. Забегаев и др., ФТП 54, 25 (2020).
- 17. L. W. Casperson, J. Appl. Phys. 48, 256 (1977).
- Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, Д. Н. Забегаев и др., ФТП 56, 394 (2022).
- Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, Д. Н. Забегаев и др., ФТП 55, 121 (2021).

- Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, Д. Н. Забегаев и др., ФТП 56, 307 (2022).
- 21. N. N. Ageeva, I. L. Bronevoi, E. G. Dyadyushkin et al., Sol. St. Comm. 72, 625 (1989).
- 22. N. N. Ageeva, I. L. Bronevoi, S. E. Kumekov et al., Proc. SPIE 1842, 70 (1992).
- 23. Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, А. Н. Кривоносов и др., Изв. РАН, серия физ. 58, 89 (1994).
- 24. I. L. Bronevoi, A. N. Krivonosov, and V. I. Perel', Sol. St. Comm. 94, 363 (1995).
- 25. Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, А. Н. Кривоносов, ФТП 35, 65 (2001).
- 26. Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, Д. Н. Забегаев и др., ФТП 53, 1471 (2019).
- 27. N. N. Ageeva, V. B. Borisov, I. L. Bronevoi et al., Sol. St. Comm. 75, 167 (1990).
- **28**. Ю. Д. Калафати, В. А. Кокин, ЖЭТФ **99**, 1793 (1991).
- **29**. С. Е. Кумеков, В. И. Перель, ЖЭТФ **94**, 346 (1988).
- 30. J. S. Blakemore, J. Appl. Phys. 53, R123 (1982).
- 31. Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, Д. Н. Забегаев и др., ФТП 55, 434 (2021).
- 32. Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, А. Н. Кривоносов, Радиотехн. и электрон. (2023), принята в печать.
- 33. Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, Д. Н. Забегаев и др., ФТП 54, 1018 (2020).
- **34**. Н. А. Семенов, *Техническая электродинамика*, Связь, Москва (1973).
- 35. В. Н. Лукьянов, А. Т. Семенов, Н. В. Шелков и др., КЭ 2, 2373 (1975).
- 36. P. P. Vasil'ev, R. V. Penty, and I. H. White, Light Sci. Appl. 5 (6), e16086 (2016).
- **37**. А. В. Андреев, УФН **160**, 1 (1990).
- 38. P. P. Vasil'ev, R. V. Penty, and I. H. White, Opt. Express 26, 26156 (2018).
- 39. C. W. Willemsen, L. A. Coldren, and H. Temkin, Vertical-Cavity Surface-Emitting Lasers: Design, Fabrication, Characterization, and Applications, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2001).
- 40. C. L. Tang, H. Statz, and G. deMars, J. Appl. Phys. 34, 2289 (1963).
- **41**. О. Звелто, *Принципы лазеров*, Лань, Санкт-Петербург (2008).

- 42. H. Statz, C. L. Tang, and J. M. Lavine, J. Appl. Phys. 35, 2581 (1964).
- **43**. Л. В. Асрян, Р. А. Сурис, ФТП **33**, 1076 (1999).
- 44. А. В. Савельев, В. В. Коренев, М. В. Максимов и др., ФТП 49, 1546 (2015).
- 45. R. H. Dicke, Phys. Rev. 93, 99 (1954).
- 46. I. L. Bronevoi, A. N. Krivonosov, and V. I. Perel', Sol. St. Comm. 94, 805 (1995).
- 47. Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, Д. Н. Забегаев и др., Радиотехн. и электрон. 63, 1130 (2018).
- 48. Ф. Платцман, П. Вольф, Волны и взаимодействия в плазме твердого тела, Мир, Москва (1975).
- 49. Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, Д. Н. Забегаев и др., ФТП 46, 944 (2012).
- 50. Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, А. Н. Кривоносов и др., ФТП 40, 806 (2006).
- 51. Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, Д. Н. Забегаев и др., ФТП 44, 1328 (2010).
- 52. Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, Д. Н. Забегаев и др., ЖЭТФ 147, 765 (2015).
- 53. Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, А. Н. Кривоносов, ФТП 42, 1426 (2008).
- 54. Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, Д. Н. Забегаев и др., ФТП 51, 594 (2017).
- **55**. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механи*ка, Физматлит, Москва (2001).

- 56. Д. Бом, Квантовая теория, Наука, Москва (1962).
- 57. Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, Д. Н. Забегаев и др., ФТП 50, 1333 (2016).
- 58. Н. Н. Агеева, И. Л. Броневой, Д. Н. Забегаев и др., Ж. радиоэлектрон. 4, 1 (2017); http://jre.cplire.ru/ jre/apr17/3/text.pdf
- **59**. Физика полупроводниковых лазеров, под ред. Х. Такумы, Мир, Москва (1989).
- 60. И. Р. Шен, Принципы нелинейной оптики, Наука, Москва (1989).
- 61. Рассеяние света в твердых телах, под ред. М. Кардоны, Мир, Москва (1979).
- 62. О. В. Мисочко, А. А. Мельников, С. В. Чекалин и др., Письма в ЖЭТФ 102, 262 (2015).
- **63**. *Нелинейная спектроскопия*, под ред. Н. Бломбергена, Мир, Москва (1979).
- 64. Ф. Крауфорд, Волны, Наука, Москва (1974).
- **65**. И. Л. Броневой, А. Н. Кривоносов, ФТП **33**, 13 (1999).
- 66. А. Пиковский, М. Розенблюм, Ю. Куртс, Синхронизация. Фундаментальное нелинейное явление, Техносфера, Москва (2003).
- 67. А. Пискарскас, А. Стабинис, А. Умбрасас и др., КЭ 12, 2335 (1985).

Вып. Стр.

EDN: LGEUVN

\mathbf{A}

12	892
10	509
12^{-10}	811
	011
19	1018
12	1010
-	107
10	127
10	541
12	878
7	108
11	718
7	34
10	522
11	615
$\overline{7}$	87
9	440
	12 10 12 12 7 10 12 7 11 7 10 12 7 11 7 9

Вып. Стр.

Арбузова Е. В., Долгов А. Д., Пана-		
сенко Л. А. О распространении гравито-		
на на фоне искривлённого пространства-		
времени	9	354
Астапенко В. А. Временная зависи-		
мость резонансных фотопроцессов, инду-		
цированных электромагнитными импуль-		
сами различной длительности	7	5
Атаева Г. Я. (см. Муртазаев А. К.)	9	398

Б

Бабаев А. Б. (см. Муртазаев А. К.)	9	398
Бакулин И. К., Орехов М. А. Фунда-		
ментальные основы зависимости энергии		
ионизации углеводородов от их размера	11	623
Балакин Д. А., Агапов Д. П., Го-		
стев П. П., Магницкий С. А., Фро-		
ловцев Д. Н., Чиркин А. С. Форми-		
рование изображений в фантомной воло-		
конной эндоскопии методом редукции из-		
мерений	12	811
Беляев Б. А., Тюрнев В. В., Ша-		
банов Д. А. Излучение материальной		
частицы, находящейся в диэлектрической		
среде под воздействием электромагнитно-		
го поля	12	830
Беляев В. С. (см. Андреев С. Н.)	7	34
Биленко И. А. (см. Дмитриев Н. Ю.)	7	14
Бондарев И. А. (см. Смоляков Д. А.) .	9	432
Бочков Е. И. Расчет параметров лави-		
ны релятивистских убегающих электро-		
нов методом групповых уравнений для мо-		
ментов функции распределения электро-		
нов	8	267
Броневой И. Л. (см. Агеева Н. Н.)	12	1018
Будкин Г. В. (см. Дурнев М. В.)	10	570
Будылин А. М., Левин С. Б. Кванто-		
вое рассеяние связанной пары на третьей		
частице в одномерном случае	11	657
Булгаков Е. Н. (см. Шадрина Г. В.)	11	646
Бурмистров И. С. (см. Андрияхи-		
на Е. С.)	10	522

Бушуев В. А., Манцызов Б. И. Асим- метричный эффект Бормана в пассивном РТ-симметричном фотонном кристалле	9	322	Горбунов А. В., Тимофеев В. Б. Маг- нитоэкситонный конденсат в холловском диэлектрике Гостев П. П. (см. Балакин Д. А.)	10 12	492 811
В			Грум-Гржимайло А. Н. (см. Попо-		
Вагин К. Ю., Мамонтова Т. В., Урю- пин С. А. Поглощение излучения с час- тотой, близкой к границе прозрачности неоднородной плазмы, образованной при многофотонной ионизации атомов инерт- ного газа	12	823	ва М. М.) Грызлова Е. В. (см. Попова М. М.) Гудим И. А. (см. Фролов К. В.) Гудков В. В. (см. Сарычев М. Н.) Гусев Н. С. (см. Уставщиков С. С.) Гусев С. А. (см. Уставщиков С. С.)	$7 \\ 7 \\ 11 \\ 10 \\ 8 \\ 8 \\ 8$	72 72 718 509 261 261
Ванюшкин Н. А., Геворгян А. А., Го-			Л		
лик С. С. Рассеяние света одномерным поглощающим слоем с непрерывным по- казателем преломления между двумя ди- электриками	8	198	Данилин А. Н. (см. Дмитриев Н. Ю.) . Деменев А. А., Кулаковский В. Д., Терешко С. Н., Гиппиус Н. А. Вли- яние угловой симметрии возбуждающе-	7	14
липпов А. В. Исследование реакции ${}^{3}\text{H}({}^{1}\text{H}, \gamma){}^{4}\text{He}$ в диалазоне энергий 12–	0	330	рорезонаторных экситонных поляритонов в туннельно-связанных потенциальных	10	471
BANKTOD P. M. (CM. MARAHOOD F. F.)	9	339 417	Лемченко Н. Н., Ивановских Р. Л. По-	10	411
Володазов Л. Ю. (см. Уставшиков С. С.)	8	261	давление вынужденного рассеяния Ман-		
BOJKOB H B (cm CMOJSKOB Π A)	9	432	дельштама-Бриллюэна в лазерной плаз-		
Волобуев И. П. (см. Есоров В O)	8	226	ме при многочастотном режиме облуче-		
Волоции А С (см. Диотриев Н Ю)	7	14	ния мишени	7	133
Волошин Г. В., Мэн Хуэй, Курап- цев А. С., Соколов И. М. Влияние качества антирелаксационного покрытия на характер эффекта электромагнитно- индуцированной прозрачности в газовых ячейках	9	313	Дмитриев Н. Ю., Волошин А. С., Кондратьев Н. М., Лобанов В. Е., Миньков К. Н., Шитиков А. Е., Да- нилин А. Н., Лоншаков Е. А., Би- ленко И. А. Определение дисперсионных характеристик интегральных оптических микрорезонаторов и генерация в них коге-	7	14
феев А. В. Исследование спектральных			Локукин С. А., Колесников С. В., Са-	'	14
свойств пространственно-неоднородной			лецкий А. М. Формирование дендритов		
системы частиц Юкавы в параболическом			$\rm Pt/Cu$ на ступенях поверхности $\rm Cu(111)$	11	686
конфайнменте	12	991	Долгов А. Д. (см. Арбузова Е. В.)	9	354
Воротилин В.П. Гидродинамика турбу-	10	0.05	Дормидонов А. Е. (см. Кузнецов А. В.)	12	835
Г	12	900	Щубникова – де Гааза в двумерных элек- тронных системах со снятым спиновым		
Галимов А.И. (см. Сорокин С.В.)	12	892	вырождением	10	598
Геворгян А. А. (см. Ванюшкин Н. А.) .	8	198	Дорохин Л. А. (см. Анциферов П. С.).	9	440
Гиппиус Н. А. (см. Деменев А. А.)	10	471	дровоссков А. Б., Креинес Н. М., Ко- валев О. А., Ситников А. В., Нико-		
Глазов М. М., Ивченко Е. Л., Несто-			лаев С. Н., Рыльков В. В. Темпера-		
клон М. О. Влияние давления на элек-			турная эволюция спектров магнитного ре-		
тронную зонную структуру и циркуляр-	10	FOA	зонанса металл-диэлектрических наногра-		
ныи фототок в теллуре	10	584 109	нулярных композитов с парамагнитными	0	100
голик С. С. (см. Ванюшкин Н. А.)	8	198	ионами в изолирующей матрице	9	426

Дудкин Г. Н. (см. Варлачёв В. А.)	9	339
Дурнев М. В., Будкин Г. В., Та-		
расенко С. А. Расщепление дираков-		
ских состояний в квантовых ямах HgTe.		
Роль кристаллографической ориентации,		
интерфейсной, объемной и структурной		
асимметрии	10	570
Дынников И. А., Мальцев А. Я., Но-		
виков С. П. Хаотические траектории на		
поверхностях Ферми и нетривиальные ре-		
жимы поведения магнитной проводимо-		
сти	8	276
Дядина П. И. Поляризация и ско-		
рость гравитационных волн в гибридной		
метрической-Палатини $f(R)$ -гравитации	9	382

\mathbf{E}

Егоров В. О., Волобуев И. П. Кванто-		
вое теоретико-полевое описание осцилля-		
ций нейтрино в магнитном поле и пробле-		
ма солнечных нейтрино	8	226
Егранов А. В. (см. Сарычев М. Н.)	10	509
Еремин М. В. (см. Нурмухаметов А. Р.)	9	390

Ж

Жаров А. А., Жарова Н. А. Светоинду-		
цированные дифракционные решетки на		
метаповерхностях на основе жидкого ме-		
таматериала	12	844
Жарова Н. А. (см. Жаров А. А.)	12	844
Жевлаков А. С. (см. Аникин И. В.)	7	87
Жевстовских И. В. (см. Сарычев М. Н.)	10	509
Жуковский К. В. (см. Федоров И. А.)	8	181
Журавлев В. М. Модели динамического		
равновесия астрофизических объектов .	12	850
Журавлев К. С. (см. Свит К. А.)	8	247

З

Завидовский И. А. (см. Стрелец-		
кий О. А.)	12	881
Загреев Б. В. (см. Андреев С. Н.)	7	34
Зайцев А. А. (см. Малахов А. И.)	8	240
Залялютдинов Т. А., Аникин А. А.,		
Соловьев Д. А. Термоиндуцированные		
штарковские сдвиги высоковозбужденных		
состояний атома водорода	11	615
Зарубанов А. А. (см. Свит К. А.)	8	247
Зенин О. И. (см. Прокопов В. А.)	12	878
Зенин О. И. (см. Прокопов В. А.)	$\overline{7}$	108

И

распространением квантовой информации

Ивановских Р. Д. (см. Демченко Н. Н.)	$\overline{7}$	133
Ивченко Е. Л. (см. Глазов М. М.)	10	584
Ильичёв Л. В. (см. Ростом А. М.)	9	307
Ильичёв Л. В. (см. Томилин В. А.)	9	331
Ионин А. А. (см. Смирнов Н. А.)	7	55
Иофа М.З. О массовой функции на		
внутреннем горизонте регулярной черной		
дыры	11	663

в спиновых системах твердых тел 11 778

\mathbf{K}

767
. 101
706
. 790
$\frac{1}{2}$ $\frac{41}{2}$
835
600
. 693
72
) 426
. 686
. 708
892
2 835
. 737
· 14
· 27
2 1004
0.006

Космачев О. А., Матюнина Я. Ю.,		
Фридман Ю. А. Динамические и стати-		
ческие свойства негейзенберговкого фер-		
римагнетика с одноионной антизотропией		
типа «легкая плоскость»	9	406
Кошелев К. Н. (см. Анциферов П. С.)	9	440
Крайнов В. П. (см. Андреев С. Н.)	7	34
Крейнес Н. М. (см. Дровосеков А. Б.) .	9	426
Кривоносов А. Н. (см. Агеева Н. Н.)	12	1018
Ксенофонтов В. (см. Фролов К. В.)	11	718
Кудряшов С. И. (см. Смирнов Н. А.)	7	55
Кузнецов А. В., Компанец В. О., Дор-		
мидонов А. Е., Чекалин С. В., Кан-		
дидов В. П. Генерация центров окрас-		
ки и лазерной плазмы в LiF при многоим-		
пульсной филаментации	12	835
Кузнецов Е. А. Неустойчивость солито-		
нов и коллапс звуковых волн в средах с		
положительной дисперсией	7	143
Кукушкин И. В. Перенормировка спек-		
тра возбуждений и эффект Мигдала		
в двумерной электронной системе с силь-		
ным взаимодействием	10	480
Кулаковский В. Д. (см. Деменев А. А.)	10	471
Курапцев А. С. (см. Волошин Г. В.)	9	313

Л

Лаптев В. Б., Макаров Г. Н., Пе- тин А. Н., Рябов Е. А. Радиационно-		
столкновительное вовлечение молекул в		
резонанс с лазерным ИК-полем в двухком-		
понентной молекулярной среде	7	60
Лебедева М. В. (см. Метелкин Е. В.)	11	743
Левин С. Б. (см. Будылин А. М.)	11	657
Левичев М. Ю. (см. Уставщиков С. С.)	8	261
Лобанов А. В. (см. Андреев С. Н.)	7	34
Лобанов А. Е., Чухнова А. В. Нару-		
шение Т-симметрии в осцилляциях ней-		
трино	9	364
Лобанов В. Е. (см. Дмитриев Н. Ю.)	7	14
Лоншаков Е. А. (см. Дмитриев Н. Ю.)	7	14
Лундин А. А. (см. Зобов В. Е.)	11	778
Любутин И. С. (см. Фролов К. В.)	11	718
Любутина М. В. (см. Фролов К. В.)	11	718

\mathbf{M}

Магадеев Е. Б., Вахитов Р. М., Кан-		
беков Р. Р. Теория вихреподобных струк-		
тур в перфорированных магнитных плен-		
ках с учетом размагничивающих полей .	9	417
Магницкий С. А. (см. Балакин Д. А.) .	12	811

Магомедов М. А. (см. Муртазаев А. К.)	9	398
Макаров В. А. (см. Рыжиков П. С.)	7	45
Макаров Г. Н. (см. Лаптев В. Б.)	7	60
Малахов А. И., Зайцев А. А. Отноше-		
ние выходов антиядер и ядер в столкнове-		
ниях релятивистских ядер в центральной		
области быстрот	8	240
Мальцев А. Я. (см. Дынников И. А.)	8	276
Мальцев А. Я. О резонансных вкладах в		
осцилляционные явления в условиях маг-		
нитного пробоя при перестройках элек-		
тронной динамики на поверхности Ферми	12	975
Мамонтова Т. В. (см. Вагин К. Ю.)	12	823
Манцызов Б. И. (см. Бушуев В. А.)	9	322
Матафонов А. П. (см. Андреев С. Н.) .	7	34
Матюнина Я. Ю. (см. Космачев О. А.)	9	406
Метелкин Е. В., Лебедева М. В.		
Пространственное распределение вакан-		
сий, образованных каскадом выбитых ато-		
мов в твердом теле	11	743
Миньков К. Н. (см. Дмитриев Н. Ю.) .	7	14
Михайлин Н. Ю. (см. Агринская Н. В.)	7	127
Муртазаев А. К. (см. Мутайламов В. А.)	12	899
Муртазаев А. К., Бабаев А. Б., Атае-		
ва Г. Я., Магомедов М. А. Фазовые пе-		
реходы и критические явления в двумер-		
ной примесной модели Поттса на квадрат-		
ной решетке	9	398
Мутайламов В. А., Муртазаев А. К.		
Фазовая диаграмма и основное состояние		
декорированной модели Изинга на тре-		
угольной решетке с ферромагнитным вза-		
имодействием первых соседей и антифер-		
ромагнитным взаимодействием вторых .	12	899
Муханов С. А. (см. Андреев С. Н.)	7	34
Мухаряпова А. В. (см. Кондратен-		
ко П. С.)	11	737
Мэн Хуэй (см. Волошин Г. В.)	9	313

Н

Надолинский А. М. (см. Хопер-		
ский А. Н.)	7	27
Нестоклон М. О. (см. Глазов М. М.)	10	584
Нечаев Б. А. (см. Варлачёв В. А.)	9	339
Николаев В. С. (см. Воронов И. В.)	12	991
Николаев С. Н. (см. Дровосеков А. Б.)	9	426
Нищак О. Ю. (см. Стрелецкий О. А.) .	12	881
Новиков С. П. (см. Дынников И. А.)	8	276
Нурмухаметов А. Р., Еремин М. В.		
К теории динамической магнитоэлектри-		
ческой связи в CuB ₂ O ₄	9	390

Ο

Овчинников С. Г. (см. Смоляков Д. А.)	9	432
Орехов М. А. (см. Бакулин И. К.)	11	623

Π

Павликов А. В. (см. Стрелецкий О. А.)	12	881
Панасенко Л. А. (см. Арбузова Е. В.) .	9	354
Пашенькин И. Ю. (см. Уставщи-		
ков С. С.)	8	261
Пеньков Ф. М. (см. Варлачёв В. А.)	9	339
Петин А. Н. (см. Лаптев В. Б.)	$\overline{7}$	60
Пономарева А. В., Смирнова Е. А. Ав		
initio-исследование влияния Al на энталь-		
пию растворения примеси углерода в па-		
рамагнитном ГЦК-сплаве Fe–Mn	12	957
Попов А. В. (см. Попов В. А.)	11	730
Попов В. А., Попов А. В. Электронная		
структура ОЦК-лития в условиях внешне-		
го воздействия	11	730
Попова М. М., Грызлова Е. В., Ки-		
селев М. Д., Грум-Гржимайло А. Н.		
Ионизация атомов бихроматическим по-		
лем кратных $\omega + 2\omega$ частот произвольной		
поляризации	7	72
Прокопов В. А., Алексеев С. О., Зе-		
нин О. И. Тени черных дыр как источ-		
ник ограничений на расширенные теории		
гравитации 2: Sgr A*	12	878
Прокопов В. А., Алексеев С. О., Зе-		
нин О. И. Тени черных дыр как источ-		
ник ограничений на расширенные теории		
гравитации	7	108
Пшеничников А. Ф. (см. Косков М. А.)	12	926

Р

Расковалов А.А. (см. Киселев В.В.)	11	693
Рауцкий М. В. (см. Смоляков Д. А.)	9	432
Рахлин М.В. (см. Сорокин С.В.)	12	892
Редчиц П. Е. (см. Казей З. А.)	11	767
Ростом А. М., Томилин В. А., Ильи-		
чёв Л. В. Геометрическая фаза как осно-		
ва квантовой гироскопии	9	307
Рыжиков П. С., Макаров В. А. Тензор		
энергии-импульса Минковского в нелиней-		
ной оптике сред с нелокальностью оптиче-		
ского отклика	7	45
Рыльков В. В. (см. Дровосеков А. Б.) .	9	426
Рябов Е. А. (см. Лаптев В. Б.)	7	60

Рябчиков А. И., Тараканов В. П., Корнева О. С., Сивин Д. О. Форми-

рование пучков ионов титана субмиллисекундной длительности с высокой импульсной плотностью мощности 12 1004

\mathbf{C}

Савченко Н. Ф. (см. Стрелецкий О. А.)	12	881
Сажин М. В., Сажина О. С., Шац- кий А. А. Геодезические в гравитацион- ном поле кротовой норы	7	96
Сажина О. С. (см. Сажин М. В.)	7	96
Салецкий А. М. (см. Докукин С. А.)	11	686
Салихов К. М. Новый взгляд на «нута- цию» спинов	11	630
Самохвалов А. В. Генерация вихрей в бислое сверхпроводник / ферромагнетик с неоднородным обменным полем	12	941
Сапронова Е. С. (см. Колесников С. В.)	11	708
Сарычев М. Н., Хоссени У. А. Л., Жевстовских И. В., Уланов В. А., Егранов А. В., Суриков В. Т., Авер- киев Н. С., Гудков В. В. Адиабатиче- ский потенциал ян-теллеровских комплек- сов Cu ²⁺ F ₈ ⁻ в кристалле флюорита	10	509
Свит К. А., Зарубанов А. А., Жу- равлев К. С. Кинетика рекомбинации экситонов и трионов в свободностоящих квантовых точках CdS, синтезированных с помощью метода Ленгмюра – Блоджетт	8	247
Седова И.В. (см. Сорокин С.В.)	12	892
Сивин Д. О. (см. Рябчиков А. И.)	12	1004
Ситников А. В. (см. Дровосеков А. Б.)	9	426
Смирнов Г. В. Ядерная резонансная ди- фракция синхротронного излучения: иг- ра сочетаний анизотропии поляризуемо- сти ядер и асимметрии дифракционной геометрии	8	165
Смирнов Н. А., Кудряшов С. И., Ионин А. А. Роль протяженного фила- ментационного фокуса при абляции по- верхности кремния в водной среде ультра- короткими дазерными импульсами	7	55
Смирнова Е. А. (см. Пономарева А. В.)	12	957
Смирнова Е. С. (см. Фролов К. В.)	11	718

Смоляков Д. А., Рауцкий М. В., Бон-		
дарев И. А., Яковлев И. А., Овчин-		
ников С. Г., Волков Н. В., Тара-		
сов А. С. Влияние сильного магнитно-		
го поля на транспортные свойства МДП-		
структуры Fe/SiO ₂ /n-Si на переменном		
токе	9	432
Снегирев В. В. (см. Казей З. А.)	11	767
Соколов И. М. (см. Волошин Г. В.)	9	313
Соколов И. М. (см. Фофанов Я. А.)	9	297
Соловьев Д. А. (см. Залялютди-		
нов Т. А.)	11	615
Сорокин С.В., Седова И.В., Авдиен-		
ко П.С., Фирсов Д.Д., Комков О.С.,		
Галимов А.И., Яговкина М.А., Рах-		
лин М.В. Молекулярно-пучковая эпи-		
таксия тонких пленок h -GaTe/ m -GaTe на		
подложках GaAs (001): структурные и фо-		
толюминесцентные свойства	12	892
Сосорев А. Ю. Комплексы с переносом		
заряда линейных и лестничных сопряжен-		
ных полимеров как перспективные орга-		
нические узкозонные полупроводники	7	118
Столяренко М. С. (см. Казей З. А.) .	11	767
Стрелецкий О. А., Завидовский И. А.,		
Нищак О. Ю., Хайдаров А. А., Са-		
вченко Н. Ф., Павликов А. В. Низ-		
копороговый автоэмиссионный катод на		
основе термически обработанного дегид-		
рофторированного поливинилиденфтори-		
да	12	881
Суриков В. Т. (см. Сарычев М. Н.)	10	509
Суровцев Е. В. Уравнения двухскорост-		
ной гидродинамики для полярной фазы		
сверхтекучего ³ Не в нематическом аэроге-		
ле	12	917
Суслов И. М. Граничные условия, рас-		
пределение фаз и скрытая симметрия в		
одномерной локализациии	11	750
7 1 1		

\mathbf{T}

Тараканов В. П. (см. Андреев С. Н.)	7	34
Тараканов В. П. (см. Рябчиков А. И.) .	12	1004
Тарасенко С. А. (см. Дурнев М. В.)	10	570
Тарасов А. С. (см. Смоляков Д. А.)	9	432
Темеров В. Л. (см. Фролов К. В.)	11	718
Терешко С. Н. (см. Деменев А. А.)	10	471
Тимофеев А. В. (см. Воронов И. В.)	12	991
Тимофеев В. Б. (см. Горбунов А. В.)	10	492
Томилин В. А. (см. Ростом А. М.)	9	307

У

 Уланов В. А. (см. Сарычев М. Н.)
 10
 509

 Урюпин С. А. (см. Вагин К. Ю.)
 12
 823

 Уставщиков С. С., Левичев М. Ю.,
 Пашенькин И. Ю., Гусев Н. С., Гусев С. А., Водолазов Д. Ю. Диодный
 эффект в сверхпроводящей гибридной полоске Cu/MoN с боковым разрезом
 8
 261

Φ

Фадеева М. А., Щур Л. Н. Моделиро-		
вание четырехкомпонентной модели Потт-		
са на гексагональной решетке методом		
Ванга–Ландау с контролируемой точно-		
стью	12	909
Федоров И. А., Жуковский К. В. О ге-		
нерации четных гармоник ондуляторного		
излучения пучками релятивистских элек-		
тронов	8	181
Филиппов А. В. (см. Варлачёв В. А.) .	9	339
Фирсов Д.Д. (см. Сорокин С.В.)	12	892
Фофанов Я. А., Соколов И. М.		
Электромагнитно-индуцированная про-		
зрачность в газовых ячейках с антире-		
лаксационным покрытием	9	297
Фридман Ю. А. (см. Космачев О. А.) .	9	406
Фролов К. В., Алексеева О. А., Любу-		
тин И. С., Ксенофонтов В., Смирно-		
ва Е. С., Темеров В. Л., Гудим И. А.,		
Любутина М. В. Структурный и маг-		
нитные фазовые переходы в мультиферро-		
ике HoFe ₃ (BO ₃) ₄ по данным мессбауэров-		
ской спектроскопии и рентгеновской ди-		
фракции	11	718
Фроловцев Д. Н. (см. Балакин Д. А.) .	12	811

Х

Хайдаров А. А. (см. Стрелецкий О. А.)	12	881
Хомкин А. Л., Шумихин А. С. Про-		
водимость неидеальной плазмы инертных		
газов и кулоновский логарифм	11	790
Хоперский А. Н., Надолинский А. М.,		
Конеев Р. В. Неупругое расщепление		
рентгеновского фотона атомным ионом .	7	27
Хоссени У. А. Л. (см. Сарычев М. Н.)	10	509

Ц

Циберкин К. Б. Моделирование энер-		
гетического спектра углеродной сферы в		
пределе сплошной среды	12	968

Ч

Чекалин С. В. (см. Кузнецов А. В.)	12	835
Чиркин А. С. (см. Балакин Д. А.)	12	811
Чухнова А. В. (см. Лобанов А. Е.)	9	364

ш

Шабанов Д. А. (см. Беляев Б. А.)	12	830
Шадрина Г. В., Булгаков Е. Н. Опти-		
ческая бистабильность и нарушение сим-		
метрии при резонансном рассеянии света		
на конечном фотонном кристалле с нели-		
нейной резонансной полостью	11	646
Шайкин Д. В. (см. Камчатнов А. М.) .	11	796
Шамшур Д. В. (см. Агринская Н. В.) .	7	127
Шацкий А. А. (см. Сажин М. В.)	$\overline{7}$	96
Шитиков А. Е. (см. Дмитриев Н. Ю.) .	$\overline{7}$	14
Шпатаковская Г. В. Аналитическая		
оценка потенциалов ионизации многоза-		
рядных ионов элементов от аргона до ксе-		
нона	8	205
Шумихин А. С. (см. Хомкин А. Л.)	11	790
Шустин М. С., Аксенов С. В. Осо-		
бенности физических наблюдаемых силь-		
но коррелированной сверхпроводящей на-		
нопроволоки со спин-орбитальным взаи-		
модействием Рашба	10	541
TTT		

Щ

Щур Л. Н.	(см.	Фадеева	М.	A.))	12	909
-----------	------	---------	----	-----	---	----	-----

Я

Яговкина М.А. (см. Сорокин С.В.)	12	892
Яковлев И. А. (см. Смоляков Д. А.)	9	432

\mathbf{A}

Ahmed F. Gravitational Field Effects Pro-	
duced by Topologically Non-trivial Geom-	
etry and Rotating Frames Subject to a	
Coulomb-Type Scalar Potential 11	673

В

Brevik I., Timoshkin A. V. Holographic		
description of the dissipative model of uni-		
verse with curvature	9	373

D

Defo J. J., Kuetche V. K. Cylindrical gravitational pulse waveguide excitations . 9 377

\mathbf{F}

Filipov V. B. (see Rader O.)	10	608
Flachbart K. (see Rader O.)	10	608

G

Gabáni S. (see Rader O.)	10	608
Gindikin Y., Sablikov V. A. Spin-		
dependent electron–electron interaction		
in Rashba materials	10	564
Golub L. E. (see Nestoklon M. O.)	10	463

Η

Hartmann R. R. (see Saroka V. A.) \ldots	10	555
Hlawenka P. (see Rader O.)	10	608

\mathbf{K}

Kravchenko S. V. (see Shashkin A. A.) .	10	466
Kuetche V. K. (see Defo J. J.)	9	377
Kumar A. (see Maslov D. L.)	10	580

\mathbf{M}

Maiti S. (see Maslov D. L.)	10	580
Maslov D. L., Kumar A., Maiti S. Col-		
lective spin modes in Fermi liquids with spin-		
orbit coupling	10	580

Ν

Nestoklon M. O., Golub L. E. Weak localization in *p*-type heterostructures in the presence of parallel magnetic field 10 463

Ρ

Portnoi M. E. (see Saroka V. A.) 10 555

\mathbf{R}

noi M. E. Momentum alignment and the optical valley Hall effect in low-dimensional

Shashkin A. A., Kravchenko S. V. Spin and valley effects on the quantum phase transition in two dimensions 10

Shitsevalova N. Y. (see Rader O.) 10

Shklovskii B. I. (see Huang Yi) 10

Dirac materials 10 555

Rader O., Hlawenka P., Siemensmeyer K.,	Skinne
Weschke E., Varykhalov A., Sánchez-	
Barriga J., Shitsevalova N. Y., Fil-	
ipov V. B., Gabáni S., Flachbart K.,	Thu N
Rienks E. D. L. The Rashba splitting in	Bose-F
SmB_6 10 608	by a pa
Rienks E. D. L. (see Rader O.) 10 608	Hartree
	Timosh
S	
Sablikov V. A. (see Gindikin Y.) 10 564	
Sánchez-Barriga J. (see Rader O.) 10 608	Varykh
Saroka V. A., Hartmann R. R., Port-	

Siemensmeyer K. (see Rader O.) 10 608 Skinner Brian (see Huang Yi) 10 455

\mathbf{T}

Thu Nguyen Van. The Casimir effect in		
Bose–Einstein condensate mixtures confined		
by a parallel plate geometry in the improved		
Hartree–Fock approximation	8	177
Timoshkin A. V. (see Brevik I.)	9	373

\mathbf{V}

Varykhalov A. (see Rader O.)	10	608
Volovik G. E. Dimensionless physics: Con-		
tinuation	11	680
Volovik G. E. Macroscopic quantum tunnel-		
ing: from quantum vortices to black holes		
and Universe	10	449

W

Weschke E.	(see Rader	0.)	10	608
------------	------------	-----	----	-----

466

608

455

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ ТОМА 162 ЗА 2022 г.

Вып. Стр.

Вып. Стр.

EDN: MPRSZJ

1. Атомы, молекулы, оптика

1.1 Общие вопросы квантовой механики

Аналитическая оценка потенциалов иони-		
зации многозарядных ионов элементов от		
аргона до ксенона. Шпатаковская Г. В.	8	205
Новый взгляд на «нутацию» спинов. Сали-		
хов К. М	11	630
Квантовое рассеяние связанной пары на		
третьей частице в одномерном случае. <i>Бу</i> -		
дылин А. М., Левин С. Б	11	657

1.2 Квантовая информация и физика квантовых компьютеров

Многоквантовая	ЯМР-спектроскопия		
и управление распр	остранением кванто-		
вой информации в	спиновых системах		
твердых тел. Зобов	В. Е., Лундин А. А.	11	778

1.3 Коллективные свойства холодных атомов и молекул (включая БЕК)

Геометрическая фаза как основа кванто-		
вой гироскопии. Ростом А. М., Томи-		
лин В. А., Ильичёв Л. В	9	307
Декогеренция конденсата в гибридном		
атомарно-оптическом квантовом гиро-		
скопе. Томилин В. А., Ильичёв Л. В	9	331

1.4 Структура и динамика атомов и молекул

Термоиндуцированные штарковские сдви-		
ги высоковозбужденных состояний ато-		
ма водорода. Залялютдинов Т. А., Ани-		
кин А. А., Соловьев Д. А	11	615
Фундаментальные основы зависимости		
энергии ионизации углеводородов от их		
размера. Бакулин И. К., Орехов М. А	11	623
Новый взгляд на «нутацию» спинов. Сали-		
хов К. М	11	630

1.5 Столкновения атомов и молекул, источники излучения

1.6 Взаимодействие фотонов, электронов, атомов и молекул с конденсированными телами и поверхностями

Численное моделирование выхода ядерных		
реакций ${}^{11}{ m B}(p,3\alpha)$ и ${}^{11}{ m B}(p,n){ m C}^{11},$ ини-		
циируемых мощным пикосекундным ла-		
зерным излучением. Андреев С. Н., Бе-		
ляев В. С., Матафонов А. П., Тарака-		
нов В. П., Загреев Б. В., Крайнов В. П.,		
Муханов С. А., Лобанов А. В	7	34
Ядерная резонансная дифракция синхро-		
тронного излучения: игра сочетаний ани-		
зотропии поляризуемости ядер и асим-		
метрии дифракционной геометрии. Смир-		
нов Г. В	8	165
The Casimir effect in Bose–Einstein conden-		
sate mixtures confined by a parallel plate		
geometry in the improved Hartree–Fock ap-		
proximation. Thu Nguyen Van	8	177
Влияние угловой симметрии возбуждаю-		
щего светового пучка на динамику мик-		
рорезонаторных экситонных полярито-		
нов в туннельно-связанных потенциаль-		
ных ловушках. Деменев А. А., Кулаков-		
ский В. Д., Терешко С. Н., Гиппиус Н. А.	10	471
Излучение материальной частицы, находя-		
щейся в диэлектрической среде под воз-		
действием электромагнитного поля. Беля-		
ев Б. А., Тюрнев В. В., Шабанов Д. А	12	830

Формирование пучков ионов титана суб- миллисекундной длительности с высокой импульсной плотностью мощности. <i>Ряб-</i> чиков А. И., Тараканов В. П., Корне- ва О. С., Сивин Д. О 12 100 1.7 Взаимодействие атомов и модекуд с	О генерации четных гармоник ондуля- торного излучения пучками релятивист- ских электронов. Федоров И. А., Жуков- ский К. В
электромагнитным полем, квантовая и	ми. Ванюшкин Н. А., Геворгян А. А., Го- лик С. С
классическая оптика, физика лазеров,	Электромагнитно-индуцированная про-
Временная зависимость резонансных фото-	зрачность в газовых ячейках с антирелак-
процессов, индуцированных электромаг-	сационным покрытием. Фофанов Я. А.,
нитными импульсами различной длитель-	Соколов И. М
ности. Астапенко В. А 7	5 вой гироскопии. Ростом А. М., Томи-
Определение дисперсионных характери-	лин В. А., Илричёв Л. В
стик интегральных оптических микро-	Влияние качества антирелаксационно-
резонаторов и генерация в них коге-	го покрытия на характер эффекта
рентных оптических частотных гребенок.	электромагнитно-индуцированной про-
Дмитриев Н. Ю., Волошин А. С., Кон-	зрачности в газовых ячейках. Воло-
дратьев Н. М., Лобанов В. Е., Минь-	щин Г. В. Мэн Хизй Курарцев А. С.
ков К. Н., Шитиков А. Е., Дани- лин А. Н., Лоншаков Е. А., Билен- ко И. А	4 Соколов И. М
Тензор энергии-импульса Минковского в	сивном F 1-симметричном фотонном кри-
нелинейной оптике сред с нелокальностью	сталле. Бушуев В. А., Манцызов Б. И 9 322
оптического отклика. <i>Рыжиков П. С.</i> ,	Декогеренция конденсата в гибридном
<i>Макаров В. А.</i>	атомарно-оптическом квантовом гиро- скопе. Томилин В. А., Ильичёв Л. В 9 331
фокуса при абляции поверхности кремния в водной среде ультракороткими лазерны- ми импульсами. Смирнов Н. А., Кудря-	Новый взгляд на «нутацию» спинов. Сали- хов К. М 11 630 Оптическая бистабильность и нарушение симметрии при резонансном рассеянии
 шов С. И., Ионин А. А	света на конечном фотонном кристалле с нелинейной резонансной полостью. Шад- рина Г. В., Булгаков Е. Н 11 646 Формирование изображений в фантомной
тин А. Н., Рябов Е. А 7 6	30 волоконной эндоскопии методом редукции
Ионизация атомов бихроматическим полем	измерений. Балакин Д. А., Агапов Д. П.,
кратных $\omega + 2\omega$ частот произвольной по-	Гостев П. П., Магницкий С. А., Фролов-
ляризации. Попова М. М., Грызлова Е. В.,	цев Д. Н., Чиркин А. С 12 811
Киселев М. Д., Грум-Гржимайло А. Н. 7 7	Поглощение излучения с частотой, близ-
Подавление вынужденного рассеяния Ман-	кой к границе прозрачности неоднород-
дельштама – Бриллюэна в лазерной плаз-	ной плазмы, образованной при многофо-
ме при многочастотном режиме облуче-	тонной ионизации атомов инертного га-
ния мишени. Демченко Н. Н., Иванов-	за. Вагин К. Ю., Мамонтова Т. В., Урю-
ских Р. Л. 7, 13	пин С. А
Ядерная резонансная дифракция синхро-	Генерация центров окраски и лазерной
тронного излучения: игра сочетаний ани-	плазмы в LiF при многоимпульсной фи-
зотропии поляризуемости ядер и асим-	ламентации. Кузнецов А. В., Компа-
метрии дифракционной геометрии. <i>Смир</i> -	нец В. О., Дормидонов А. Е., Чека-
нов Г. В	5 лин С. В., Кандидов В. П 12 835
Светоиндуцированные дифракционные ре- шетки на метаповерхностях на основе жидкого метаматериала. <i>Жаров А. А.,</i> <i>Жарова Н. А.</i>	
--	
1.8 Классическая электродинамика	
Неупругое расщепление рентгеновского фотона атомным ионом. Хоперский А. Н., Надолинский А. М., Конеев Р. В 7 27 Тензор энергии-импульса Минковского в нелинейной оптике сред с нелокальностью оптического отклика. Рыжсиков П. С.	
Макаров В. А	
2. Ядра, частицы, поля, гравитация и астрофизика	
2.1 Структура ядер, столкновения и ядерные реакции	
Численное моделирование выхода ядерных реакций ¹¹ В $(p, 3\alpha)$ и ¹¹ В (p, n) С ¹¹ , ини- циируемых мощным пикосекундным ла- зерным излучением. Андреев С. Н., Бе- ляев В. С., Матафонов А. П., Тарака- нов В. П., Загреев Б. В., Крайнов В. П., Муханов С. А., Лобанов А. В	
пазоне энергий 12–34 кэВ. Варлачёв В. А., Дудкин Г. Н., Нечаев Б. А., Пень- ков Ф. М., Филиппов А. В	
2.2 Физика адронов и КХД	
О теореме декомпозиции для глюонов. <i>Ани- кин И. В., Жеблаков А. С.</i>	
хов А. И., Зайцев А. А 8 240	
2.3 Электромагнитные и слабые взаимодействия	

полевое описание ос-		
цилляций нейтрино в магнитном поле		
и проблема солнечных нейтрино. Его-		
ров В. О., Волобуев И. П	8	226
Нарушение Т-симметрии в осцилляциях		
нейтрино. Лобанов А. Е., Чухнова А. В.	9	364

2.4 Гравитация и астрофизика

Геодезические в гравитационном поле кро- товой норы. Сажин М. В., Сажина О. С., Шацкий А. А.	7	96
Тени черных дыр как источник ограни- чений на расширенные теории гравита- ции. Прокопов В. А., Алексеев С. О., Зе- нин О. И.	7	108
О распространении гравитона на фоне ис- кривлённого пространства-времени. Арбу- зова Е. В., Долгов А. Д., Панасенко Л. А.	9	354
Holographic description of the dissipative model of universe with curvature. <i>Brevik I.,</i> <i>Timoshkin A. V.</i>	9	373
Cylindrical gravitational pulse waveguide ex- citations. Defo J. J., Kuetche V. K	9	377
Поляризация и скорость гравитационных волн в гибридной метрической-Палатини f(R)-гравитации. Дядина П. И	9	382
Macroscopic quantum tunneling: from quan- tum vortices to black holes and Universe. <i>Volovik G. E.</i>	10	449
О массовой функции на внутреннем горизонте регулярной черной дыры. Иофа М.З.	11	663
Gravitational Field Effects Produced by Topologically Non-trivial Geometry and Ro-		
tating Frames Subject to a Coulomb-Type Scalar Potential . <i>Ahmed F.</i>	11	673
Dimensionless physics: Continuation. Volovik G. E.	11	680
Модели динамического равновесия астро- физических объектов . <i>Журавлев В. М.</i>	12	850
Тени черных дыр как источник ограниче- ний на расширенные теории гравитации 2: Sgr A*. Прокопов В. А., Алексеев С. О., Зерин О. И	19	878
Эспин О. И	14	010

2.5 Квантовая теория поля, струны

Квантовое теор	етико-поле	евое описани	ie oc-		
цилляций ней	трино в	магнитном	поле		
и проблема с	олнечных	нейтрино.	Его-		
ров В. О., Вол	обуев И. П	Ι		8	226
Dimensionless	physics:	Continu	ation.		
Volovik G. E				11	680

3. Твердые тела и жидкости	Низкопороговый автоэмиссионный ка-
3.1 Рассеяние и поглощение частиц и волн, спектры возбуждения	тод на основе термически обработанно- го дегидрофторированного поливинили- денфторида. Стрелецкий О. А., Завидов-
Кинетика рекомбинации экситонов и трио- нов в свободностоящих квантовых точках	ский И. А., Нищак О. Ю., Хайдаров А. А., Савченко Н. Ф., Павликов А. В 12 881
СdS, синтезированных с помощью метода Ленгмюра – Блоджетт. <i>Свит К. А., Зару- банов А. А., Журавлев К. С.</i>	Молекулярно-пучковая эпитаксия тонких пленок h-GaTe/m-GaTe на подложках GaAs (001): структурные и фотолюми- несцентные свойства. Сорокин С.В., Се- дова И.В., Авдиенко П.С., Фирсов Д.Д., Комков О.С., Галимов А.И., Яговки- на M.A. Ратачи M.B. 12, 892
тод на основе термически обработанно- го дегидрофторированного поливинили- денфторида. Стрелецкий О. А., Завидов- ский И. А., Нищак О. Ю., Хайдаров А. А.,	na m.n., rawan m.D 12 052
Савченко Н. Ф., Павликов А. В 12 881	4. Порядок, беспорядок и фазовые переходы в конденсированных средах
3.2 Структура, механические свойства,	
дефекты, рост кристаллов	4.1 Неоднородные, неупорядоченные и
Формирование дендритов Pt/Cu на ступе- нях поверхности Cu(111). Докукин С. А., Колосичитов С. В. Сологитий А. М. 11 686	частично разупорядоченные системы Conductivity of two-dimensional small gap
Молекулярно-пучковая эпитаксия тонких пленок <i>h</i> -GaTe/ <i>m</i> -GaTe на подложках GaAs (001): структурные и фотолюми-	semiconductors and topological insulators in strong Coulomb disorder. <i>Huang Yi</i> , <i>Shklovskii B. I., Skinner Brian.</i>
несцентные свойства. Сорокин С.В., Се- дова И.В., Авдиенко П.С., Фирсов Д.Д., Комков О.С., Галимов А.И., Яговки- на М.А. Рассини М.В. 12, 892	Мультифрактиально-усиленная сверхпро- водимость в двумерных системах со спин- орбитальным взаимодействием. Андрия-
на м.А., Галлан м.D 12 692	хина Е. С., Бурмистров И. С 10 522
3.4 Квантовые жидкости и кристаллы	Электронная структура ОЦК-лития в усло- виях внешнего воздействия. Попов В. А., Попов А. В
Уравнения двухскоростной гидродинамики для полярной фазы сверхтекучего ³ Не в нематическом аэрогеле. <i>Суровцев Е. В.</i> 12 917	Асимптотическая теория классического переноса примеси в неоднородных средах. Принцип Ферма. Кондратенко П. С., Му-
3.5 Низкоразмерные системы	харяпова А. В 11 737
Кинетика рекомбинации экситонов и трио- нов в свободностоящих квантовых точках CdS, синтезированных с помощью метода	Пространственное распределение вакан- сий, образованных каскадом выбитых ато- мов в твердом теле. Метелкин Е. В., Ле- бедева М. В 11 743
банов А. А., Журавлев К. С	Граничные условия, распределение фаз и скрытая симметрия в одномерной локали- зациии . <i>Суслов И. М.</i> 11 750
<i>феев В. Б.</i> 10 492 Формирование дендритов Pt/Cu на ступе- нях поверхности Cu(111). <i>Докукин С. А.</i> ,	Излучение материальной частицы, находя- щейся в диэлектрической среде под воз- действием электромагнитного поля. Беля-

Колесников С. В., Салецкий А. М. 11 686 ев Б. А., Тюрнев В. В., Шабанов Д. А. . 12 830

Фазовая диаграмма и основное состояние декорированной модели Изинга на тре- угольной решетке с ферромагнитным вза- имодействием первых соседей и антифер- ромагнитным взаимодействием вторых. <i>Мутайламов В. А., Муртазаев А. К</i> 12 899 Исследование спектральных свойств пространственно-неоднородной системы частиц Юкавы в параболическом конфай- нменте. <i>Воронов И. В., Николаев В. С.</i> ,	Структурные переходы в фрустрирован- ных кобальтитах YBaCo _{4-y} Zn _y O _{7+x} при разбавлении Со-подсистемы. <i>Казей З. А.</i> , <i>Снегирев В. В., Столяренко М. С., Ред-</i> <i>чиц П. Е</i> 11 767 Фазовая диаграмма и основное состояние декорированной модели Изинга на тре- угольной решетке с ферромагнитным вза- имодействием первых соседей и антифер- ромагнитным взаимодействием вторых.
Тимофеев А. В 12 991	Мутайламов В. А., Муртазаев А. К 12 899 Термомагнитная конвекция феррожидко- сти в вертикальном гипролинамическом
4.2 Магнетизм, пьезо- и сегнетоэлектричество	контуре: интенсификация теплообмена в
К теории динамической магнитоэлектри- ческой связи в CuB ₂ O ₄ . <i>Нурмухаме-</i> <i>тов А. Р., Еремин М. В.</i>	магнитном поле. Косков М. А., Пшенич- ников А. Ф 12 926
Фазовые переходы и критические явления в двумерной примесной модели Поттса	4.3 Сверхпроводимость и сверхтекучесть
на квадратной решетке. Муртазаев А. К., Бабаев А. Б., Атаева Г. Я., Магоме- дов М. А	The Casimir effect in Bose–Einstein conden- sate mixtures confined by a parallel plate geometry in the improved Hartree–Fock ap-
Динамические и статические свойства негейзенберговкого ферримагнетика с од- ноионной антизотропией типа «легкая плоскость». Космачев О. А., Матюни-	ргохітаtion. <i>Thu Nguyen Van.</i>
теория вихреподобных структур в перфорированных магнитных пленках с учетом размагничивающих полей. <i>Магадеев Е. Б.</i> ,	Глашенъкан И. Ю., Тусев П. С., Ту- сев С. А., Водолазов Д. Ю 8 261 Мультифрактиально-усиленная сверхпро- водимость в двумерных системах со спин-
Вахитов Р. М., Канбеков Р. Р 9 417 Температурная эволюция спектров магнит- ного резонанса металл-диэлектрических наногранулярных композитов с парамаг-	орбитальным взаимодействием. Андрия- хина Е. С., Бурмистров И. С 10 522 Особенности физических наблюдаемых сильно коррелированной сверхпроводя-
нитными ионами в изолирующей матрице. Дровосеков А. Б., Крейнес Н. М., Ко- валев О. А., Ситников А. В., Никола-	щей нанопроволоки со спин-орбитальным взаимодействием Рашба. Шустин М. С., Аксенов С. В 10 541
ев С. Н., Рыльков В. В	Уравнения двухскоростной гидродинамики для полярной фазы сверхтекучего ³ Не в нематическом аэрогеле. <i>Суровцев Е. В.</i> . 12 917
Расковалов А.А 11 095 Влияние диполь-дипольного взаимодей- ствия на время перемагничивания атом-	4.4 Общие вопросы физики фазовых переходов
ных цепочек конечной длины. Колесни- ков С. В., Сапронова Е. С 11 708	Фазовые переходы и критические явления в двумерной примесной модели Поттса
Структурный и магнитные фазовые пере- ходы в мультиферроике HoFe ₃ (BO ₃) ₄ по данным мессбауэровской спектроскопии и рентгеновской дифракции. Фролов К. В., Алексеева О. А., Любутин И. С., Ксе-	на квадратной решетке. Муртазаев А. К., Бабаев А. Б., Атаева Г. Я., Магоме- дов М. А
нофонтов В., Смирнова Е. С., Теме- ров В. Л., Гудим И. А., Любутина М. В. 11 718	методом Ванга–Ландау с контролируемой точностью. Фадеева М. А., Щур Л. Н 12 909

5. Электронные свойства твердых тел

5.1 Электронные свойства металлов и лиэлектриков

диэлектриков	Barriga J., Shitsevalova N. Y., Fil- ipov V. B., Gabáni S., Flachbart K.,
Комплексы с переносом заряда линейных и лестничных сопряженных полимеров как перспективные органические узкозонные полупроволщики. Сосоред А. Ю. 7, 118	<i>Rienks E. D. L.</i> 10 608 Электронная структура ОЦК-лития в условиях внешнего воздействия. Попов В. А., 11 720
Аномальный эффект Холла в кванто- вых ямах GaAs–AlGaAs, легированных немагнитными примесями, вблизи пере- хода металл–изолятор. <i>Агринская Н. В.</i> ,	Попов А. В 11 730 Граничные условия, распределение фаз и скрытая симметрия в одномерной локали- зациии. Суслов И. М 11 750 О резонансных вкладах в оспиллящионные
Михайлин Н. Ю., Шамшур Д. В 7 127 Хаотические траектории на поверхностях Ферми и нетривиальные режимы пове- дения магнитной проводимости. Дынни- ков И. А., Мальцев А. Я., Новиков С. П. 8 276	явления в условиях магнитного пробоя при перестройках электронной динамики на поверхности Ферми. <i>Мальцев А. Я.</i> . 12 975
Влияние сильного магнитного по- ля на транспортные свойства МДП- структуры Fe/SiO ₂ /n-Si на переменном	5.2 Сильно коррелированные электронные системы
токе. Смоляков Д. А., Рауцкий М. В., Бондарев И. А., Яковлев И. А., Овчинни- ков С. Г., Волков Н. В., Тарасов А. С 9 432 Weak localization in p-type heterostructures in the presence of parallel magnetic field. Nestoklon M. O., Golub L. E 10 463	Аномальный эффект Холла в кванто- вых ямах GaAs-AlGaAs, легированных немагнитными примесями, вблизи пере- хода металл-изолятор. Агринская Н. В., Михайлин Н. Ю., Шамшур Д. В 7 127 Влияние сильного магнитного по-
Перенормировка спектра возбуждений и эффект Мигдала в двумерной электрон- ной системе с сильным взаимодействием. <i>Кукушкин И. В.</i>	ля на транспортные свойства МДП- структуры Fe/SiO ₂ /n-Si на переменном токе. Смоляков Д. А., Рауцкий М. В., Бондарев И. А., Яковлев И. А., Овчинни-
Адиабатический потенциал ян-теллеровских комплексов Cu ²⁺ F ₈ ⁻ в кристалле флюо- рита. Сарычев М. Н., Хоссени У. А. Л., Жевстовских И. В., Уланов В. А., Егра- нов А. В., Суриков В. Т., Аверкиев Н. С., Гидков В. В. 10, 509	ков С. Г., Волков Н. В., Тарасов А. С 9 432 Spin and valley effects on the quan- tum phase transition in two dimensions. Shashkin A. A., Kravchenko S. V 10 466 Особенности физических наблюдаемых сильно, корредированной скерушоваля.
Momentum alignment and the optical valley Hall effect in low-dimensional Dirac mate- rials. Saroka V. A., Hartmann R. R., Port- noi M. E. 10, 555	цей нанопроволоки со спин-орбитальным взаимодействием Рашба. Шустин М. С., Аксенов С. В
Расщепление дираковских состояний в квантовых ямах HgTe. Роль кристал- лографической ориентации, интерфейс- ной, объемной и структурной асимметрии. Дирнев М. В., Бидкин Г. В., Тарасен-	/ ферромагнетик с неоднородным обмен- ным полем. <i>Самохвалов А. В.</i> 12 941 <i>Ab initio</i> -исследование влияния Al на эн- тальпию растворения примеси углерода в парамагнитном ГШК-сплаве Fe-Mn. <i>Поно</i> -
$\kappa o \ C. \ A. \dots 10 570$ Collective spin modes in Fermi liquids with	марева А. В., Смирнова Е. А 12 957 Моделирование энергетического спектра
spin-orbit coupling. Maslov D. L., Ku- mar A., Maiti S 10 580	углеродной сферы в пределе сплошной среды. Циберкин К. Б 12 968

K.,

The Rashba splitting in SmB_6 . Rader O., P., Siemensmeyer

Weschke E., Varykhalov A., Sánchez-

H lawenka

Комплексы с переносом заряда линейных и

лестничных сопряженных полимеров как перспективные органические узкозонные полупроводники. *Сосорев А. Ю.*

5.3 Физика полупроводников	Weak localization in <i>p</i> -type heterostructures in the presence of parallel magnetic field.
Комплексы с переносом заряда линейных и лестничных сопряженных полимеров как перспективные органические узкозонные полупроводники. <i>Сосорев А. Ю.</i>	Nestoklon M. O., Golub L. E
Weak localization in <i>p</i> -type heterostructures in the presence of parallel magnetic field. <i>Nestoklon M. O., Golub L. E.</i> 10 463	Перенормировка спектра возбуждений и эффект Мигдала в двумерной электрон- ной системе с сильным взаимодействием.
Влияние угловой симметрии возбуждаю- щего светового пучка на динамику мик- рорезонаторных экситонных полярито- нов в туннельно-связанных потенциаль- ных ловушках. Деменев А. А., Кулаков- ский В. Д., Терешко С. Н., Гиппиус Н. А. 10 471	Кукушкин И. В 10 Особенности физических наблюдаемых сильно коррелированной сверхпроводя- щей нанопроволоки со спин-орбитальным взаимодействием Рашба. Шустин М. С., Аксенов С. В 10
Перенормировка спектра возбуждений и эффект Мигдала в двумерной электрон- ной системе с сильным взаимодействием. <i>Кукушкин И. В.</i>	Momentum alignment and the optical valley Hall effect in low-dimensional Dirac mate- rials. Saroka V. A., Hartmann R. R., Port- noi M. E.
Расщепление дираковских состояний в квантовых ямах HgTe. Роль кристал- лографической ориентации, интерфейс- ной объемной и структурной асимметрии	Spin-dependent electron-electron interaction in Rashba materials. <i>Gindikin Y., Sab-</i> <i>likov V. A.</i>
Дурнев М. В., Будкин Г. В., Тарасен- ко С. А 10 570 Влияние давления на электронную зон-	Collective spin modes in Fermi liquids with spin-orbit coupling. Maslov D. L., Ku- mar A., Maiti S 10 Биения, осцинияций, Шубникова – не Гаа-
ную структуру и циркулярный фототок в теллуре. Глазов М. М., Ивченко Е. Л., Нестоклон М. О 10 584	за в двумерных электронных системах со снятым спиновым вырождением. До- рожскин С. И 10
ного поглощения света — отображение ос- цилляций и обеднения населенности элек- тронов в поле собственного интенсивно- го стимулированного излучения в гетеро- структуре Al _x Ga _{1-x} As-GaAs-Al _x Ga _{1-x} As	6. Статистическая и нелинейная физика, физика «мягкой» материи
(Экспериментальное исследование). Аге- ева Н. Н., Броневой И. Л., Кривоно-	6.1 Статистическая физика
сов А. Н 12 1018	Многоквантовая ЯМР-спектроскопия и управление распространением кванто- вой информации в спиновых системах
5.4 Низкоразмерные системы (электронные свойства)	твердых тел. Зобов В. Е., Лундин А. А. 11

6.2 Полимеры, жидкие кристаллы

	Низкопороговый автоэмиссионный ка-	
118	тод на основе термически обработанно-	
	го дегидрофторированного поливинили-	
	денфторида. Стрелецкий О. А., Завидов-	
	ский И. А., Нищак О. Ю., Хайдаров А. А.,	
455	Савченко Н. Ф., Павликов А. В 12	381

6.5 Динамика жидкостей	Формирование пучков ионов титана суб-
Динамика взаимодействия двух облаков со- литонных газов. Камчатнов А. М., Шай- кин Д. В 11 796 Термомагнитная конвекция феррожидко-	миллисекундной длительности с высокой импульсной плотностью мощности. Ряб- чиков А. И., Тараканов В. П., Корне- ва О. С., Сивин Д. О 12 1004
сти в вертикальном гидродинамическом контуре: интенсификация теплообмена в магнитном поле. Косков М. А., Пшенич- ников А. Ф 12 926 Гидродинамика турбулентного слоя смеше- ния. Воротилин В.П 12 985	6.8 Общие вопросы физики нелинейных систем Неустойчивость солитонов и коллапс зву- ковых волн в средах с положительной дис- персией. <i>Кузнецов Е. А.</i>
6.6 Физика плазмы, термоядерный синтез	Динамика взаимодействия двух облаков со-
Подавление вынужденного рассеяния Ман- дельштама – Бриллюэна в лазерной плаз- ме при многочастотном режиме облуче- ния мишени. Демченко Н. Н., Иванов-	литонных газов. Камчатнов А. М., Шай- кин Д. В 11 796
<i>ских Р. Д.</i> 7 133 Расчет параметров лавины релятивистских убегающих электронов методом группо-	Обзоры
распределения электронов. Бочков Е. И. 8 267 Инверсная заселенность уровней Ar VIII в плазме быстрого конического разряда. Анциферов П. С., Дорохин Л. А., Коше-	Хаотические траектории на поверхностях Ферми и нетривиальные режимы пове- дения магнитной проводимости. Дынни- ков И. А., Мальцев А. Я., Новиков С. П. 8 276
<i>лев К. Н.</i> 9 440 Проводимость неидеальной плазмы инерт-	Пикосекундная модуляция фундаменталь- ного поглощения света — отображение ос-
ных газов и кулоновский логарифм. <u>Хомкин А. Л.</u> , Шумихин А. С 11 790 Исследование спектральных свойств пространственно-неоднородной системы частиц Юкавы в параболическом конфай- нменте. Воронов И. В., Николаев В. С., Тулиябана А. В.	цилляций и обеднения населенности элек- тронов в поле собственного интенсивно- го стимулированного излучения в гетеро- структуре Al _x Ga _{1-x} As-GaAs-Al _x Ga _{1-x} As (Экспериментальное исследование). Аге- ева Н. Н., Броневой И. Л., Кривоно-
<i>1имофеев А. В.</i> 12 991	сов А. н 12 1018

к сведению авторов

В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

Редакция ЖЭТФ принимает статьи как на русском, так и на английском языках. С 1 сентября 2016 г. по требованию МАИК статьи, поступившие в редакцию на английском языке, будут переводиться на русский язык для русскоязычной версии журнала.

Редакция рекомендует направлять статьи в электронном виде по электронной почте или загружать их в режиме «on-line» через сайт журнала http://jetp.ac.ru/

Издательство требует от авторов при публикации статьи заключения договора о передаче авторских прав. Заполненные и подписанные договоры (форма договоров отправляется авторам ВМЕСТЕ С КОРРЕКТУРОЙ) могут быть представлены лично или по электронной почте в отсканированном виде (PDF файлы).

По всем вопросам можно обращаться в редакцию.

Адрес: 117334, Москва, ул. Косыгина, д. 2, Редакция ЖЭТФ

E-mail: jetp@kapitza.ras.ru Телефон: +7 (499) 137 56 22

Главный редактор А. И. СМИРНОВ

Редколлегия:

канд. физ.-мат. наук Ю. С. БАРАШ, д-р физ.-мат. наук И. Г. ЗУБАРЕВ, д-р физ.-мат. наук Е. И. КАЦ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции), д-р физ.-мат. наук В. П. КРАЙНОВ, акад. М. В. САДОВСКИЙ, канд. физ.-мат. наук С. С. СОСИН, член-корр. РАН С. В. ТРОИЦКИЙ (зам. гл. редактора), д-р физ.-мат. наук А. В. ФИЛИППОВ, член-корр. РАН И. А. ФОМИН (зам. гл. редактора), д-р физ.-мат. наук Д. Е. ХМЕЛЬНИЦКИЙ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ в Великобритании), д-р физ.-мат. наук А. А. ЦЕЙТЛИН, акад. А. М. ЧЕРЕПАЩУК

Редакционный совет:

акад. А. Ф. АНДРЕЕВ (председатель), член-корр. РАН В. В. ЛЕБЕДЕВ, д-р физ.-мат. наук В. С. ПОПОВ

Зав. редакцией Н. Г. Церевитинова Редакторы: Л. Б. Кульчицкая, Т. Г. Орехова, Т. Н. Смирнова