

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

П И С Ь М А
В
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

том 116

Выпуск 9

10 ноября 2022

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

Заместители главного редактора
Г. Е. Воловик, В. П. Пастухов

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

Web-страница <http://www.jetpletters.ac.ru>

Интернет-версия английского издания
<http://www.springerlink.com/content/1090-6487>

© Российская академия наук, 2022

© Редколлегия журнала “Письма в ЖЭТФ” (составитель), 2022

Particle creation: Schwinger + Unruh + Hawking

G. E. Volovik¹⁾

Low Temperature Laboratory, Aalto University, P.O. Box 15100, FI-00076 Aalto, Finland

Landau Institute for Theoretical Physics, 142432 Chernogolovka, Russia

Submitted 13 August 2022

Resubmitted 15 September 2022

Accepted 20 September 2022

DOI: 10.31857/S1234567822210017, EDN: lggbpn

In this paper we discuss the connection of Schwinger particle creation in the constant electric field [1, 2] with the particle production in the Unruh [3] and Hawking [4] effects. For that we consider the combined effects, which involve simultaneously the Schwinger particle production and the other effects. These combined effects demonstrate that the entropy and temperature can be associated not only with the event horizons, as it was suggested by Gary Gibbons and Stephen Hawking [5], but also can be extended to the Schwinger effect.

The rate of the Schwinger pair creation is:

$$\Gamma^{\text{Schw}}(M) = \frac{dW^{\text{Schw}}}{dt} = \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{(2\pi)^3} \exp\left(-\frac{\pi M^2}{q\mathcal{E}}\right). \quad (1)$$

The comparison of Eq. (1) with the Unruh radiation in the accelerated frame reveals the factor of 2 problem. The Unruh temperature is $T_U = a/2\pi$, where a is acceleration. In the Schwinger case the acceleration in the electric field is $a = q\mathcal{E}/M$, and $\Gamma^{\text{Schw}}(M) = \exp(-M/2T_U)$. The factor of 2 problem arises also in the consideration of the Hawking radiation in the de Sitter expansion, see [6] and references therein. Subtleties in the tunneling approach to Hawking and Unruh radiation see in [7–12]. Different scenarios of resolving the above discrepancy between the Schwinger and Unruh mechanisms see in [13–15] and references therein. We consider the scenario somewhat similar to that in [14].

From Equation (1) it follows that the probability of creation of particle with mass $M+m$ and charge q in the limit $m \ll M$ can be expressed in terms of the probability of creation of particle with mass M and the extra term:

$$\Gamma^{\text{Schw}}(M+m) = \Gamma^{\text{Schw}}(M) \exp\left(-\frac{2\pi Mm}{q\mathcal{E}}\right). \quad (2)$$

The extra term can be described in terms of the Unruh radiation in the accelerated frame:

$$\Gamma^{\text{Schw}}(M+m) = \Gamma^{\text{Schw}}(M) \Gamma^{\text{Unruh}}(m), \quad (3)$$

$$\Gamma^{\text{Unruh}}(m) = \exp\left(-\frac{2\pi Mm}{q\mathcal{E}}\right) = \exp\left(-\frac{m}{T_U}\right). \quad (4)$$

This is the coherent combined process in which the charged particle with mass M is created by Schwinger process. It moves with acceleration $a = q\mathcal{E}/M$ and plays the role of the detector, which experiences the emission of a neutral particles – the Unruh radiation.

The coherent combination of the several processes is similar to the phenomenon of cotunneling in the electronic systems, where electron experiences the coherent sequence of tunneling events: from an initial to the virtual intermediate state and then to the final state [16]. In our case the virtual state is the state of the created charged particle. Its motion with acceleration triggers the creation of the neutral particle.

The combination of two processes in Eq. (3) – the Schwinger creation of mass M and the Unruh creation of mass $m \ll M$ – is similar to the combination of two processes in the creation of pairs of Reissner–Nordström (RN) monopole black holes in magnetic field [17]:

$$\Gamma^{\text{BH, Monopole}} = \Gamma^{\text{Monopole}} \Gamma^{\text{BH}}, \quad \Gamma^{\text{BH}} = \exp(S_{\text{BH}}). \quad (5)$$

According to [17], the instanton amplitude contains an explicit factor corresponding to the black hole entropy, $S_{\text{BH}} = A/4$ in Eq. (5), where A is the horizon area. The monopole pair creation is modified by the black hole entropy and thus by the Hawking temperature.

The Hawking temperature can be derived by comparing the tunneling rate with the Boltzmann factor [18–20]. The black hole entropy can be found [21, 22] by comparing the tunneling rate with the thermodynamic fluctuations [23]. The tunneling process is considered as fluctuation, with the probability of fluctuation being determined by the entropy difference between the initial and final states, $w \propto \exp(S_{\text{final}} - S_{\text{initial}})$. In the Schwinger process, the initial state is the vacuum with zero entropy is zero. Thus the Schwinger entropy is negative, $S_{\text{final}} \equiv S_{\text{Schw}}(M) = -\frac{\pi M^2}{q\mathcal{E}} < 0$. The negative entropy comes from the quantum entanglement between the radiated particles [24, 25] and also between particles and quantum fields in the vacuum. Then the corre-

¹⁾e-mail: grigori.volovik@aalto.fi

sponding Schwinger temperature is also negative and is opposite to the Unruh temperature:

$$T_{\text{Schw}}^{-1} = \frac{dS_{\text{Schw}}}{dM} = -\frac{2\pi M}{q\mathcal{E}} = -\frac{2\pi}{a} = -T_{\text{U}}^{-1}. \quad (6)$$

The negative temperature is a well defined quantity, especially in condensed matter systems [26].

The description of the quantum tunneling in terms of the thermodynamic fluctuation can be also applied to the creation of two charged RN black holes discussed in [17]. This is the triple cotunneling – the coherent sequence of three tunneling events. Adding the entropy of two created black holes one obtains for the full entropy, which determines the probability of creation:

$$S_{\text{Schw}}(M, q) + S_{\text{RN BH}}(M, q) + S_{\text{RN BH}}(M, q) = \quad (7)$$

$$= -\frac{\pi M^2}{q\mathcal{E}} + 4\pi GM^2 + 4\pi GM^2. \quad (8)$$

Here it is assumed that $q\mathcal{E} \ll G^{-1} \sim E_{\text{Planck}}^2$. As a result, the total contribution to Eq. (8) is negative. We also take into account that the entropy of the RN black hole does not depend on charge q , which is due to the correlations between the inner and outer horizons [22]. As in [17] (see also [27] and references in [28]), due to the positive entropy terms in Eq. (8) the creation of pairs of RN black holes is enhanced compared to pair production of particles or magnetic monopoles with the same masses and charges.

The sum rule for entropy in Eqs. (7) is also valid for the inverse temperatures. The corresponding temperature $1/T = dS_{\text{final}}/dM$ describing the above three processes of creation is:

$$\frac{1}{T} = \frac{1}{T_{\text{Schw}}} + \frac{1}{T_{\text{BH}}} + \frac{1}{T_{\text{BH}}}, \quad T_{\text{BH}} = \frac{1}{8\pi GM}. \quad (9)$$

The summation law for inverse temperature is similar to that for the black hole with several horizons [22], where the temperature is expressed in terms of the Hawking temperatures on different horizons.

In conclusion, it appears that the Schwinger pair creation obeys the same thermodynamic laws as in the black hole thermodynamics. The thermodynamics naturally connects the Schwinger pair creation in electric field with the Hawking radiation and with the particle creation in the Unruh effect.

I thank D. Kharzeev and K. Tuchin for correspondence.

This work has been supported by the European Research Council (ERC) under the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme (Grant Agreement # 694248).

This is an excerpt of the article “Particle creation: Schwinger + Unruh + Hawking”. Full text

of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022601968

1. J. Schwinger, Phys. Rev. **82**, 664 (1951).
2. J. Schwinger, Phys. Rev. **93**, 616 (1953).
3. W. G. Unruh, Phys. Rev. D **14**, 870 (1976).
4. S. W. Hawking, Nature **248**, 30 (1974).
5. G. W. Gibbons and S. W. Hawking, Phys. Rev. D **15**, 2738 (1977).
6. G. E. Volovik, arXiv:2205.06585 [gr-qc].
7. E. T. Akhmedov, V. Akhmedova, and D. Singleton, Phys. Lett. B **642**, 124 (2006).
8. E. T. Akhmedov, V. Akhmedova, T. Pilling, and D. Singleton, Int. J. Mod. Phys. A **22**, 1705 (2007).
9. E. T. Akhmedov, T. Pilling, and D. Singleton, Int. J. Mod. Phys. D **17**, 2453 (2008).
10. V. Akhmedova, T. Pilling, A. de Gill, and D. Singleton, Phys. Lett. B **666**, 269 (2008).
11. V. Akhmedova, T. Pilling, A. de Gill, and D. Singleton, Phys. Lett. B **673**, 227 (2009).
12. A. de Gill, Am. J. Phys. **78**, 685 (2010).
13. R. Parentani and S. Massar, Phys. Rev. D **55**, 3603 (1997).
14. D. Kharzeev and K. Tuchin, Nucl. Phys. A **753**, 316 (2005).
15. M. Teslyk, O. Teslyk, L. Zadorozhna, L. Bravina, and E. Zabrodin, Particles **5**, 157 (2022).
16. M. V. Feigel'man and A. S. Ioselevich, JETP Lett. **81**, 277 (2005).
17. D. Garfinkle, S. B. Giddings, and A. Strominger, Phys. Rev. **49**, 958 (1994).
18. G. E. Volovik, JETP Lett. **69**, 705 (1999).
19. K. Srinivasan and T. Padmanabhan, Phys. Rev. D **60**, 024007 (1999).
20. M. K. Parikh and F. Wilczek, Phys. Rev. Lett. **85**, 5042 (2000).
21. M. K. Parikh, *Energy Conservation and Hawking Radiation*, in: *The Tenth Marcel Grossmann Meeting, Proceedings of the MG10 Meeting held at Brazilian Center for Research in Physics (CBPF)*, ed. by M. Novello, S. P. Bergliffa, and R. Runi, Rio de Janeiro (2006), p. 1585; hep-th/0402166.
22. G. E. Volovik, ZhETF **162**, 449 (2022).
23. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics, Volume 5, Statistical Physics*, Pergamon Press, Oxford (1993).
24. B. Zhang, Q.-y. Cai, L. You, and M.-sh. Zhan, Phys. Lett. B **675**, 98 (2009).
25. A. Florio and D. E. Kharzeev, Phys. Rev. D **104**, 056021 (2021).
26. M. Baldovin, S. Iubini, R. Livi, and A. Vulpiani, Phys. Reports **923**, 1 (2021).
27. S. W. Hawking, G. T. Horowitz, and S. F. Ross, Phys. Rev. D **51**, 4302 (1995).
28. M. Astorino, Phys. Rev. D **89**, 044022 (2014).

Пятиточечные корреляционные числа в минимальной Лиувиллевской гравитации

А. А. Артемьев^{+*1)}, А. А. Белавин^{+×1)}

⁺Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 142432 Черногловка, Россия

*Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Россия

[×]Институт проблем передачи информации им. А. А. Харкевича, 127994 Москва, Россия

Поступила в редакцию 22 сентября 2022 г.

После переработки 23 сентября 2022 г.

Принята к публикации 27 сентября 2022 г.

Исследуются N -точечные корреляционные числа в минимальной Лиувиллевской гравитации. Мы демонстрируем, как использовать высшие уравнения движения Ал. Замолодчикова в теории Лиувилля для явного их вычисления и находим ответ при $N = 5$.

DOI: 10.31857/S1234567822210029, EDN: lgkgup

1. Введение. Существует несколько подходов к двумерной квантовой гравитации [1]. В одном из них, “непрерывном” подходе, изучается функциональный интеграл по всем римановым метрикам в двух измерениях, а также полям материи. В случае, когда теория поля материи конформная, после фиксации калибровки мы приходим к так называемой теории Лиувиллевской гравитации [2]; если сектор материи описывается минимальными моделями конформной теории поля [3], то говорят о минимальной Лиувиллевской гравитации (МЛГ) [4–6]. В другом “дискретном” подходе рассматриваются определенного вида интегралы по $L \times L$ матрицам в пределе $L \rightarrow \infty$; это так называемый подход матричных моделей (ММ) (обзор этого подхода дан, к примеру, в [7, 8]).

Из общих соображений ожидается, что эти подходы должны давать эквивалентные результаты; вычисления гравитационных размерностей и корреляционных чисел, подтверждающие эту гипотезу, были проведены в [4, 9–11]. В силу сложности явного вычисления со стороны МЛГ такие проверки были проведены только вплоть до 4-точечных корреляционных чисел (со стороны МЛГ четырехточечный коррелятор был вычислен в [12, 13]), хотя со стороны ММ в одноматричном случае выражения для любого N -точечного коррелятора могут быть получены весьма просто [11]. В этой работе мы попытаемся продвинуться в прямом вычислении высших корреляционных чисел в МЛГ (мы ограничимся случаем корреляторов на сфере).

Корреляционные числа в МЛГ определяются как вакуумные средние от произведения физических (BRST-замкнутых) операторов. Такие операторы являются либо локальными полями размерности 0, либо интегралами от локальных плотностей (полей размерности $(1, 1)$) по мировой поверхности. Мы будем изучать корреляторы локальных операторов с духовым числом 1 $W_{m,n}$ и интегралов от соответствующих им локальных плотностей духового числа 0 $U_{m,n}(x)$ (определения и свойства всех этих полей описаны в следующем разделе). Из-за аномалии духового числа для незануления такого коррелятора на сфере в нем должно присутствовать 3 оператора типа W .

Отсюда следует, что трехточечная функция не содержит интегралов по мировой поверхности вовсе и для ее нахождения достаточно знать структурные константы в минимальных моделях [3] и теории поля Лиувилля [14–16]. Четырехточечный коррелятор содержит один интеграл по положению поля $U_{m,n}(x)$. В работе [13] был предложен способ вычисления такого коррелятора с использованием так называемых “высших уравнений движения” (ВУД) [17] в теории поля Лиувилля, которые позволяют свести интеграл $\int d^2x$ к вычислимым граничным вкладкам от окрестностей точек $x_i, i = 1, 2, 3$ вставки операторов W и точки $x = \infty$.

Важным фактом, использованным в этом вычислении, является BRST-инвариантность всех остальных полей под знаком коррелятора и, следовательно, возможность отбросить BRST-точные члены в ВУД. Это уже не так для корреляторов с более чем од-

¹⁾e-mail: artemev.aa@phystech.edu; belavin@itp.ac.ru

ним интегралом от плотности $\int d^2 y_i U_{m,n}(y_i)$ – такие интегралы BRST-инвариантны только с точностью до граничных членов, которые нельзя отбросить. В этой статье мы продемонстрируем, однако, что учет \mathcal{Q} -точных членов в ВУД, примененных к одной из интегрируемых плотностей $\int d^2 y_1 U_{m,n}(y_1)$, сводит интеграл по y_1 к граничным вкладам, имеющим вид четырехточечного коррелятора; причем вклад от окрестности точки вставки второй плотности y_2 имеет вид, аналогичный вкладам от окрестностей точек x_i .

Эта статья имеет следующую структуру: в разделе 2 мы кратко суммируем необходимые для дальнейших вычислений факты о МЛГ. В разделе 3 мы описываем предлагаемый способ вычисления пятиточечного коррелятора и приводим полученный ответ.

2. Пререквизиты. Минимальная Лиувиллевская гравитация – конформная теория поля с полным центральным зарядом 0, состоящая из теории поля Лиувилля, описывающей гравитацию, минимальной модели СФТ в качестве сектора материи и B, C -системы репараметризационных BRST-духов с центральным зарядом -26 .

$$A_{MLG} = A_L + A_{\mathcal{M}_{q,q'}} + \underbrace{\frac{1}{\pi} \int d^2 x (C\bar{\partial}B + \bar{C}\partial\bar{B})}_{A_{ghost}}. \quad (1)$$

Центральный заряд теории Лиувилля определяется условием $c_L + c_M + c_{gh} = 0$ и, соответственно, характеристиками минимальной модели – числами (q', q) .

Сектор материи $\mathcal{M}_{q,q'}$. Минимальная модель СФТ определяется парой взаимнопростых чисел q, q' ; ее пространство состояний состоит из конечного набора неприводимых представлений алгебры Вирасоро с вырожденным старшим весом, т.е. вырожденных полей $\Phi_{m,n}$ с $1 \leq m < q$ и $1 \leq n < q'$ и их потомков. Обозначим за $q/q' = b^2$, тогда центральный заряд $\mathcal{M}_{q',q}$

$$c = 1 - 6(b^{-1} - b)^2, \quad (2)$$

а размерности вырожденных полей $\Phi_{m,n}$

$$\begin{aligned} \Delta_{m,n}^M &= -(b^{-1} - b)^2/4 + \lambda_{m,-n}^2, \\ \lambda_{m,n} &= (mb^{-1} + nb)/2. \end{aligned} \quad (3)$$

Мы также будем обозначать эти примарные поля Φ_α , где параметр α связан с размерностью согласно $\Delta_\alpha^{(M)} = \alpha(\alpha - b^{-1} + b)$. Дополнительно к описанному выше в минимальной модели:

1. Все вырожденные поля $\Phi_{m,n}$ составляют спектр теории.

2. В каждом модуле Вирасоро, порожденном $\Phi_{m,n}$, проведена факторизация по подмодулю,

порожденному сингулярным потомком на уровне mn

$$D_{m,n}^{(M)} \Phi_{m,n} = \bar{D}_{m,n}^{(M)} \Phi_{m,n} = 0, \quad (4)$$

где $D_{m,n}^{(M)}$ ($\bar{D}_{m,n}^{(M)}$) – определенные операторы уровня mn из голоморфных (антиголоморфных) мод Вирасоро в минимальной модели L_n^M (\bar{L}_n^M).

3. Предполагается отождествление полей $\Phi_{q-m, q'-n} = \Phi_{m,n}$.

Эти требования задают теорию единственным образом и позволяют, в частности, однозначно определить структурные константы в минимальной модели.

Теория поля Лиувилля. Гравитационный сектор описывается квантовой версией классической теории поля, основанной на действии Лиувилля. Это конформная теория поля с центральным зарядом, параметризуемым переменной b или $Q = b^{-1} + b$ как

$$c_L = 1 + 6Q^2. \quad (5)$$

В МЛГ из требования зануления полного центрального заряда следует, что параметр b в теории Лиувилля должен совпадать с $\sqrt{q/q'}$, как он был определен в предыдущем разделе. Он входит в лагранжиан теории следующим образом:

$$\mathcal{L}_L = \frac{1}{4\pi} (\partial_a \phi)^2 + \mu e^{2b\phi}. \quad (6)$$

Здесь μ – дополнительный параметр теории, называемый космологической постоянной, а ϕ – динамическая степень свободы, оставшаяся после фиксации калибровки в интеграле по метрикам.

Примарные поля в теории – экспоненциальные операторы $V_a \equiv \exp(2a\phi)$, параметризованные непрерывным (комплексным) параметром a ; соответствующая конформная размерность

$$\Delta_a^{(L)} = a(Q - a). \quad (7)$$

Два вида Лиувиллевских операторов будут важны нам для построения физических полей в МЛГ. Первый – это вырожденные поля $V_{m,n} \equiv V_{a_{m,n}}$ с

$$a_{m,n} = -b^{-1} \frac{(m-1)}{2} - b \frac{(n-1)}{2}. \quad (8)$$

Вырожденные поля подчиняются уравнениям $D_{m,n}^{(L)} V_{m,n} = \bar{D}_{m,n}^{(L)} V_{m,n} = 0$, аналогичным минимальным моделям. Второй вид – это поля $V_{m,-n}$, используемые для построения исследуемых классов когомологий в МЛГ (см. ниже).

Трехточечная функция в теории Лиувилля [16] $C_L(a_1, a_2, a_3) = \langle V_{a_1}(0) V_{a_2}(1) V_{a_3}(\infty) \rangle_L$ известна явно:

$$\begin{aligned} C_L(a_1, a_2, a_3) &= \\ &= \left(\pi \mu \gamma (b^2) b^{2-2b^2} \right)^{(Q-a)/b} \frac{\Upsilon_b(b)}{\Upsilon_b(a-Q)} \prod_{i=1}^3 \frac{\Upsilon_b(2a_i)}{\Upsilon_b(a-a_i)}, \end{aligned} \quad (9)$$

где $a = a_1 + a_2 + a_3$ и $\Upsilon_b(x)$ – некоторая специальная функция [16]. Операторное разложение (ОРЕ) в теории Лиувилля дается следующей формулой:

$$V_{a_1}(x)V_{a_2}(0) = \int' \frac{dP}{4\pi} C_{a_1, a_2}^{(L)Q/2+iP}(x\bar{x})^{\Delta_{Q/2+iP}^{(L)} - \Delta_{a_1}^{(L)} - \Delta_{a_2}^{(L)}} [V_{Q/2+iP}(0)] \quad (10)$$

где структурная константа связана с (9) как $C_{a_1, a_2}^{(L)p} = C_L(g, a, Q - p)$. Интегрирование здесь идет по мнимой оси, если a_1 и a_2 лежат в области

$$|Q/2 - \text{Re } a_1| + |Q/2 - \text{Re } a_2| < Q/2. \quad (11)$$

Мы требуем аналитичности в других областях параметров, т.е. к интегралу нужно добавить отдельно вычеты в полюсах, пересекающих контур при аналитическом продолжении из области (11). Эти добавочные вклады (“дискретные члены”) особенно важны, чтобы формула (10) воспроизводила операторное разложение с вырожденными полями $V_{m,n}$.

Духи и BRST-инвариантность. Духовый сектор – фермионная (B, C) -система с размерностями полей $(2, -1)$

$$A_{\text{gh}} = \frac{1}{\pi} \int (C\bar{\partial}B + \bar{C}\partial\bar{B})d^2x \quad (12)$$

и центральным зарядом -26 , которая появляется в результате фиксации калибровки методом Фаддеева–Попова. В МЛГ появляется нечетная BRST-симметрия, генерируемая (голоморфным) зарядом

$$\mathcal{Q} = \oint (CT + C\partial CB) \frac{dz}{2\pi i}, \quad (13)$$

где T – тензор энергии импульса материи и теории Лиувилля. По определению физические состояния в МЛГ – классы BRST-когомологий \mathcal{Q} и антиголоморфного заряда $\bar{\mathcal{Q}}$.

Физические поля и их корреляторы. Простейшие представители когомологий с духовым числом ноль могут быть получены “одеванием” примарных полей $\Phi_{m,n}$ Лиувиллевскими операторами $V_{m,-n}$; суммарная размерность $U_{m,n} \equiv V_{m,-n}\Phi_{m,n}$ равна $(1, 1)$. BRST-вариация $U_{m,n}$ дается

$$\mathcal{Q}U_{m,n} = \partial(CU_{m,n}), \quad (14)$$

поэтому интегралы от $U_{m,n}$ по сфере BRST-инвариантны (с точностью до возможных граничных членов в зависимости от других вставок).

Чтобы получить локальные физические поля с духовым числом 1, вместо интегрирования можно рассмотреть $(0, 0)$ -форму $W_{m,n} \equiv C\bar{C}U_{m,n}$; она

BRST-замкнута: $\mathcal{Q}W_{m,n} = \bar{\mathcal{Q}}W_{m,n} = 0$. Мы также будем параметризовать такие поля числом a : $W_a = V_a\Phi_{a-b}$.

В минимальной гравитации существует дополнительный набор BRST-замкнутых полей духового числа ноль, образующих так называемое “кольцо дискретных состояний” [18]. Они построены из потомков вырожденных полей в обоих секторах и имеют общий вид

$$O_{m,n}(x) = H_{m,n}\bar{H}_{m,n}\Theta_{m,n}, \quad \Theta_{m,n} \equiv V_{m,n}\Phi_{m,n}, \quad (15)$$

где $H_{m,n}$ – полином степени $mn - 1$ из мод Вирасоро L_k^M, L_k , а также духов B и C . Общий вид $H_{m,n}$ неизвестен, но можно найти его в каждом отдельном случае, потребовав \mathcal{Q} -замкнутости $O_{m,n}$. Эти операторы играют важную роль в выводе “высших уравнений движения”.

Свойства операторов из кольца дискретных состояний включают:

1. Независимость корреляторов от их положения в том смысле, что

$$\partial O_{m,n} = \text{BRST-точное}. \quad (16)$$

2. Простые правила слияния в когомологиях друг с другом

$$\begin{aligned} O_{m,n}(x)O_{m',n'}(0) &= \\ &= \sum_{r=|m-m'|+1:2}^{m+m'+1} \sum_{s=|n-n'|+1:2}^{n+n'+1} G_{r,s}^{(m,n)|(m',n')} O_{r,s}(0) + \\ &\quad + \text{BRST-точное}. \end{aligned} \quad (17)$$

3. А также с операторами W_a духового числа 1

$$\begin{aligned} O_{m,n}W_a &= \sum_{r=-m+1:2}^{m-1} \sum_{s=-n+1:2}^{n-1} A_{r,s}^{(m,n)}(a)W_{a+\frac{rb-1+sb}{2}} + \\ &\quad + \text{BRST-точное}. \end{aligned} \quad (18)$$

Перенормировкой операторов $O_{m,n}$ и $W_{m,n}$ коэффициенты $G_{r,s}^{(m,n)|(m',n')}$ и $A_{r,s}^{(m,n)}(a)$ могут быть сделаны единичными; более явно, верны следующие формулы

$$G_{r,s}^{(m,n)|(m',n')} = \frac{\Lambda_{m,n}\Lambda_{m',n'}}{\Lambda_{r,s}}; \quad \Lambda_{m,n} = \frac{B_{m,n}}{\pi}\mathcal{N}(a_{m,-n}), \quad (19)$$

$$A_{r,s}^{(m,n)}(a) = \frac{B_{m,n}}{\pi} \frac{\mathcal{N}(a)\mathcal{N}(a_{m,-n})}{\mathcal{N}(a + \lambda_{r,s})}, \quad (20)$$

$$\mathcal{N}(a) = \frac{\pi}{(\pi\mu)^{a/b}} \left[\frac{\gamma(2ab - b^2)\gamma(2ab^{-1} - b^{-2})}{\gamma^{2a/b-1}(b^2)\gamma(2 - b^{-2})} \right]^{1/2}, \quad (21)$$

где $B_{m,n}$ определена ниже (23). Таким образом, необходимая перенормировка $\mathcal{O}_{m,n} = \Lambda_{m,n}^{-1} O_{m,n}$ и $\mathcal{W}_a = \mathcal{N}(a)^{-1} W_a$.

Высшие уравнения движения и МЛГ. ВУД в теории Лиувилля говорят о так называемых логарифмических операторах V'_a ; по определению

$$V'_a(x) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial a} V_a(x). \tag{22}$$

Мы будем обозначать за $V'_{m,n}$ такие производные по параметру, вычисленные в точке $a = a_{m,n}$.

Согласно ВУД, потомки логарифмических операторов можно отождествить (с точностью до константы) с примарными полями $V_{m,-n}$ [17]; именно,

$$\begin{aligned} D_{m,n}^{(L)} \bar{D}_{m,n}^{(L)} V'_{m,n} &= \tag{23} \\ &= B_{m,n} V_{m,-n}, \quad B_{m,n} = (\pi\mu\gamma(b^2)b^{2-2b^2})^n \frac{\Upsilon'_b(2\alpha_{m,n})}{\Upsilon_b(2\alpha_{m,-n})}. \end{aligned}$$

Из этих формул можно получить ключевое для наших целей соотношение в МЛГ: определив $O'_{m,n} := H_{m,n} \bar{H}_{m,n} \Theta'_{m,n}$, где $\Theta'_{m,n} := \Phi_{m,n} V'_{m,n}$, имеем следующую связь (см. [13, 19])

$$U_{m,n} = B_{m,n}^{-1} (\bar{\partial} - \bar{Q} \bar{B}_{-1}) (\partial - Q B_{-1}) O'_{m,n}. \tag{24}$$

Здесь B_{-1} – мода духового поля B .

Четырехточечный коррелятор. Продемонстрируем применение (24) на примере четырехточечного коррелятора, следуя [12]. Выделив отдельно нормировочные факторы $\prod_{i=1}^3 \mathcal{N}(a_i) \times \mathcal{N}(a_{m,-n})$, с учетом определений перенормированных операторов выше мы рассматриваем

$$\begin{aligned} C_4(a_1, a_2, a_3 | m, n) &\equiv \tag{25} \\ &\equiv \frac{1}{Z_L} \left\langle \int d^2x \frac{U_{m,n}(x)}{\mathcal{N}(a_{m,-n})} \mathcal{W}_{a_1}(x_1) \mathcal{W}_{a_2}(x_2) \mathcal{W}_{a_3}(x_3) \right\rangle. \end{aligned}$$

Перепишем $U_{m,n}$ согласно (24). Поскольку W -операторы Q -замкнуты, мы игнорируем BRST-точные члены; получим

$$\begin{aligned} Z_L C_4(a_1, a_2, a_3 | m, n) &= \\ &= \left\langle \int d^2x \partial \bar{\partial} \frac{O'_{m,n}}{B_{m,n} \mathcal{N}(a_{m,-n})} \mathcal{W}_{a_1} \mathcal{W}_{a_2} \mathcal{W}_{a_3} \right\rangle = \\ &= \frac{1}{\pi} \left\langle \int d^2x \partial \bar{\partial} O'_{m,n} \mathcal{W}_{a_1} \mathcal{W}_{a_2} \mathcal{W}_{a_3} \right\rangle. \tag{26} \end{aligned}$$

Теперь мы можем использовать формулу Стокса для взятия интеграла по x , т.к. имеем там полную производную. Граничные вклады от окрестностей $x = x_i$ и $x = \infty$ $O'_{m,n}$ ненулевые из-за того, что при слиянии

O' с W будут логарифмические члены, которые дают дельта-функцию после дифференцирования. Эти логарифмические члены мы и должны вычислить.

Вклад от бесконечности берется из того, что $V'_{m,n}$ при $x \rightarrow \infty$ ведет себя как (см. [13])

$$\begin{aligned} V'_{1,2}(x) &\sim -\Delta'_{m,n} \log(x\bar{x}) V_{1,2}(0), \\ \Delta'_{m,n} &\equiv 2\lambda_{m,n} = mb^{-1} + nb. \tag{27} \end{aligned}$$

Аналогично ведет себя и $O'_{m,n}$; на бесконечности мы можем заменить его на $O_{m,n}$ с тем же коэффициентом и логарифмом. Соответствующий граничный вклад дается

$$-2\lambda_{m,n} \langle \mathcal{O}_{m,n}(0) \mathcal{W}_{a_1}(x_1) \mathcal{W}_{a_2}(x_2) \mathcal{W}_{a_3}(x_3) \rangle. \tag{28}$$

Этот коррелятор не зависит от положения $O_{m,n}$ (следует из описанных ранее свойств), поэтому мы можем сдвинуть его к любому из полей W и провести операторное разложение, получив, например,

$$\begin{aligned} &-2\lambda_{m,n} \sum_{r=-m+1:2}^{m-1} \times \\ &\times \sum_{s=-n+1:2}^{n-1} \langle \mathcal{W}_{a_1+\lambda_{r,s}}(x_1) \mathcal{W}_{a_2}(x_2) \mathcal{W}_{a_3}(x_3) \rangle. \tag{29} \end{aligned}$$

Логарифмические факторы в ОРЕ O' с W могут возникнуть только от дифференцирования по a степенных факторов $(x\bar{x})$ в дискретных членах в Лиувиллевской части. Например, для случая ОРЕ $V'_{1,2} V_a$ мы получим

$$\begin{aligned} &\log(x\bar{x}) \left(q_{0,1}^{(1,2)}(a) (x\bar{x})^{ab} C_L^+(a) [V_{a-b/2}(0)] + \right. \\ &\left. + q_{0,-1}^{(1,2)}(a) (x\bar{x})^{1-ab+b^2} C_L^-(a) [V_{a+b/2}(0)] \right), \tag{30} \end{aligned}$$

$$q_{r,s}^{(m,n)} \equiv |a - \lambda_{r,s} - \frac{Q}{2}| - \lambda_{m,n}. \tag{31}$$

Другими словами, результат напоминает ОРЕ с обычным примарным полем $V_{1,2}$, помимо дополнительных факторов $q_{r,s}^{(1,2)}$. Это же справедливо для общего случая $V'_{m,n}$. Перемножая ОРЕ в Лиувилле и минимальных моделях и действуя $H_{m,n} \bar{H}_{m,n}$, мы получим выражение, аналогичное (18) вида

$$\begin{aligned} \mathcal{O}'_{m,n}(x) \mathcal{W}_a(0) &= \tag{32} \\ &= \log(x\bar{x}) \sum_{r=-m+1:2}^{m-1} \sum_{s=-n+1:2}^{n-1} q_{r,s}^{(m,n)}(a) \mathcal{W}_{a-\lambda_{r,s}} + \dots \end{aligned}$$

Соответствующие вклады в четырехточечный коррелятор (с дополнительным знаком “–” из-за противоположной ориентации граничных контуров для окрестностей x_i и ∞)

$$-\sum_{i=1}^3 \sum_{r=-m+1:2}^{m-1} \sum_{s=-n+1:2}^{n-1} q_{r,s}^{(m,n)}(a_i) \langle \mathcal{W}_{a_i-\lambda_{r,s}} \dots \rangle \tag{33}$$

Теперь, используя, что нормированные на $\mathcal{N}(a)$ трехточечные корреляторы не зависят от параметров a_i и равны $-b^{-2}(b^{-4} - 1)$ [13, 20], мы приходим к итоговому ответу

$$C_4(a_1, a_2, a_3 | m, n) = -(b^{-6} - b^{-2}) \times \quad (34)$$

$$\times \left[-2mn\lambda_{mn} - \sum_{i=1}^3 \sum_{r=-m+1:2}^{m-1} \sum_{s=-n+1:2}^{n-1} q_{r,s}^{(m,n)}(a_i) \right].$$

3. Пятиточечный коррелятор. В этом разделе мы попытаемся модифицировать рассмотренный ранее метод на случай пятиточечного (и высших) корреляторов. Для простоты мы ограничимся $(2, 2p+1)$ МЛГ; нормированный коррелятор имеет вид

$$C_5(a_1, a_2, a_3 | k_1, k_2) = Z_L^{-1} \times \quad (35)$$

$$\times \left\langle \int d^2x \frac{U_{1,k_1+1}(x)}{\mathcal{N}(a_{1,-1-k_1})} \times \int d^2y \frac{U_{1,k_2+1}(y)}{\mathcal{N}(a_{1,-1-k_2})} \mathcal{W}_{a_1}(x_1) \mathcal{W}_{a_2}(x_2) \mathcal{W}_{a_3}(x_3) \right\rangle.$$

Будем считать без ограничения общности, что $k_1 \leq k_2$. Начнем вычисление с применения ВУД для поля U_{k_1} ; член со второй производной $\partial\bar{\partial}O'_{m,n}$ может быть сведен к граничным вкладам в окрестностях x_i , y и ∞ .

Вклады при $x \sim x_i$. Здесь мы проводим ОРЕ O' с $\mathcal{W}_a(x_i)$. Как и раньше, только логарифмические члены важны для этой цели; в сумме полученные вклады дадут

$$- \sum_{i=1}^3 \sum_{s=-k_1:2}^{k_1} q_{0,s}^{(1,k_1+1)}(a_i) \times \quad (36)$$

$$\times \left\langle \int d^2y \frac{U_{1,k_2+1}(y)}{\mathcal{N}(a_{1,-1-k_2})} \mathcal{W}_{a_i-\lambda_{0,s}}(x_i) \dots \right\rangle,$$

т.е. выражаются в терминах ранее вычисленного 4-точечного коррелятора.

Вклад при $x \rightarrow \infty$. Используя асимптотическое поведение $O'(x)$ при $x \rightarrow \infty$, соответствующий граничный вклад дается

$$-2\lambda_{1,k_1+1} \int d^2y \left\langle \mathcal{O}_{1,k_1+1}(0) \frac{U_{1,k_2+1}(y)}{\mathcal{N}(a_{1,-1-k_2})} \prod_{i=1}^3 \mathcal{W}_{a_i} \right\rangle. \quad (37)$$

Для его вычисления применим ВУД теперь для $U_{1,k_2+1}(y)$. \mathcal{Q} -точные члены теперь не важны, так как все остальные операторы \mathcal{Q} -замкнуты; мы получим

$$-\frac{2\lambda_{1,k_1+1}}{\pi} \times \int d^2y \partial\bar{\partial} \left\langle (\mathcal{O}'_{1,1+k_2}(y)) \mathcal{O}_{1,k_1+1}(0) \prod_{i=1}^3 \mathcal{W}_{a_i} \right\rangle. \quad (38)$$

Теперь к граничным членам в окрестностях $x_i, 0, \infty$ сводится интеграл по y . Новый элемент, появляющийся здесь – логарифмический вклад в ОРЕ $O'_{1,1+k_2}(y) \mathcal{O}_{1,k_1+1}(0)$. Поскольку в логарифмических членах ОРЕ $V'_{1,k}$ и V_a такое же, как ОРЕ с обычным примарным полем $V_{1,k}$ (помимо факторов $q_{r,s}^{(m,n)}$), достаточно добавить такие же факторы в правую часть (17):

$$\mathcal{O}'_{1,k_2+1}(y) \mathcal{O}_{1,k_1+1}(x) = \log |y-x|^2 \times \quad (39)$$

$$\times \sum_{s=k_2-k_1}^{k_2+k_1} q_{0,s-k_1}^{(1,k_2+1)}(a_{1,k_1+1}) \mathcal{O}_{1,1+s} + \dots$$

Четырехточечный коррелятор $\langle OWWW \rangle$ теперь может быть вычислен, как раньше.

Вклад при $x \sim y$. Эти вклады наиболее проблематичны для вычисления из-за двух проблем. Во-первых, такие граничные члены возникают не только от $\partial\bar{\partial}O'_{1,1+k_1}$, но и от \mathcal{Q} -точных членов в ВУД. Во-вторых, из-за отсутствия дополнительных духов \mathcal{C} логарифмические члены в ОРЕ $O'_{1,1+k_1}(x)$ с $U_{1,1+k_2}$ не так просты, как (32). Однако мы утверждаем, что эти две проблемы компенсируют друг друга; конкретизируем это утверждение. Перепишем произведение операторов $U_{1,1+k_1}(x)U_{1,1+k_2}(y)$ с использованием (24) как

$$B_{1,1+k_1} U_{1,1+k_1}(x) U_{1,1+k_2}(y) = \quad (40)$$

$$= (\bar{\partial}\partial - \bar{\mathcal{Q}}\bar{B}_{-1}\partial - \bar{\partial}\mathcal{Q}B_{-1} + \bar{\mathcal{Q}}\bar{B}_{-1}\mathcal{Q}B_{-1}) \times$$

$$\times O'_{m,n}(x) U_{1,1+k_2}(y).$$

Перебросив действие \mathcal{Q} и $\bar{\mathcal{Q}}$ с $O'_{m,n}(x)$ на $U_{1,1+k_2}(y)$, получим в правой части (40)

$$(\bar{\partial}\partial O'_{m,n}) U_{1,1+k_2} - \bar{\partial} B_{-1} O'_{m,n} \mathcal{Q} U_{1,1+k_2} - \quad (41)$$

$$- \partial \bar{B}_{-1} O'_{m,n} \bar{\mathcal{Q}} U_{1,1+k_2} + \bar{B}_{-1} B_{-1} O'_{m,n} \bar{\mathcal{Q}} \mathcal{Q} U_{1,1+k_2}.$$

Наконец, используя $\mathcal{Q}U_{1,1+k_2} = \partial_y(CU_{1,1+k_2})$, пятиточечный коррелятор переписывается как

$$\int d^2y \int d^2x \partial_x \bar{\partial}_x (H_{1,1+k_1} \bar{H}_{1,1+k_1} \Theta'_{1,1+k_1}) \times \quad (42)$$

$$\times U_{1,1+k_2}(y) \mathcal{W}_{a_1}(x_1) \mathcal{W}_{a_2}(x_2) \mathcal{W}_{a_3}(x_3) -$$

$$- \int d^2y \int d^2x \bar{\partial}_x (R_{1,1+k_1} \bar{H}_{1,1+k_1} \Theta'_{1,1+k_1}) \times \quad (43)$$

$$\times \partial_y(CU_{1,1+k_2}(y)) \mathcal{W}_{a_1}(x_1) \mathcal{W}_{a_2}(x_2) \mathcal{W}_{a_3}(x_3) -$$

$$- \int d^2y \int d^2x \partial_x (\bar{R}_{1,1+k_1} H_{1,1+k_1} \Theta'_{1,1+k_1}) \times \quad (44)$$

$$\times \bar{\partial}_y(\bar{C}U_{1,1+k_2}(y)) \mathcal{W}_{a_1}(x_1) \mathcal{W}_{a_2}(x_2) \mathcal{W}_{a_3}(x_3) +$$

$$+ \int d^2y \int d^2x R_{1,1+k_1} \bar{R}_{1,1+k_1} \Theta'_{1,1+k_1} \partial_y \bar{\partial}_y \times \quad (45)$$

$$\times (C\bar{C}U_{1,1+k_2}(y)) \mathcal{W}_{a_1}(x_1) \mathcal{W}_{a_2}(x_2) \mathcal{W}_{a_3}(x_3),$$

где $R_{1,1+k} := B_{-1}H_{1,1+k}$. Для (42) мы применили теорему Стокса в интеграле по x и вычислили все граничные вклады, кроме $x \sim y$; в (43), (44), (45) же, если свести к интегралу по границе $\int d^2y$, поскольку у $CU/\bar{C}U$ и W нет достаточно сингулярных вкладов в ОРЕ и на бесконечности $CU/\bar{C}U$ затухает быстрее, чем \bar{z}^{-1}/z^{-1} соответственно, ненулевые

вклады будут только при $x \rightarrow y$. Нам снова нужны логарифмические члены в ОРЕ типа $R\bar{H}\Theta'(x)CU(y)$ или $R\bar{R}\Theta'(x)C\bar{C}U(y)$, чтобы вычислить эти вклады; мы рассмотрели несколько первых примеров и убедились, что в сумме с граничными членами от окрестности $x \sim y$ из (42) мы получаем вклад, выглядящий так же, как (36):

$$- \sum_{s=-k_1:2}^{k_1} \frac{q_{0,s}^{(1,k_1+1)}(a_{1,-k_2-1})}{\mathcal{N}(a_{1,-1-(k_2-s)})} \left\langle \int d^2y U_{1,(k_2-s)+1}(y) \mathcal{W}_{a_i}(x_i) \dots \right\rangle. \tag{46}$$

Проиллюстрируем это на примере $k_1 = 1$. Нам понадобится явный вид

$$H_{1,2} = L_{-1}^M - L_{-1} + b^2CB, \quad R_{1,2} = b^2B, \tag{47}$$

а также ОРЕ

$$V'_{1,2}(x)V_a(y) = \log(|x-y|^2) \left[\overbrace{|x-y|^{2ab} \tilde{C}_L^+(a)[V_{a-b/2}(y)]}^{(1)} + \overbrace{|x-y|^{2(1-ab+b^2)} \tilde{C}_L^-(a)[V_{a+b/2}(y)]}^{(2)} \right], \tag{48}$$

$$\Phi_{1,2}(x)\Phi_{a-b}(y) = \underbrace{|x-y|^{2(ab-b^2)} C_M^+(a-b)[\Phi_{a-b/2}(y)]}_{(3)} + \underbrace{|x-y|^{2(1-ab)} C_M^-(a-b)[\Phi_{a-3b/2}(y)]}_{(4)}. \tag{49}$$

Здесь $a = b + \alpha_{1,k_2+1}$, а \tilde{C}_L – структурные константы теории Лиувилля, помноженные на q -факторы, как в (30). Перемножая равенства выше и действуя $H_{1,2}\bar{H}_{1,2}$, мы получаем ОРЕ $O'_{1,1+k_1}$ и $U_{1,1+k_2}$; оставляя только логарифмические вклады, на уровне примарных полей имеем

$$\begin{aligned} \log|x-y|^2 \times & \left[\tilde{C}_L^+ C_M^+ \left(-\frac{b^2}{x-y} + b^2CB \right) \left(-\frac{b^2}{x-y} + b^2\bar{C}\bar{B} \right) \times |x-y|^{2(2ab-b^2)} V_{a-b/2} \Phi_{a-b/2}(y) + \right. \\ & + \tilde{C}_L^+ C_M^- \left(\frac{1-2ab}{x-y} + b^2CB \right) \left(\frac{1-2ab}{x-y} + b^2\bar{C}\bar{B} \right) \times |x-y|^2 U_{a-b/2}(y) + \\ & + \tilde{C}_L^- C_M^+ \left(\frac{2ab-2b^2-1}{x-y} + b^2CB \right) \left(\frac{2ab-2b^2-1}{x-y} + b^2\bar{C}\bar{B} \right) \times |x-y|^2 U_{a+b/2}(y) + \\ & \left. + \tilde{C}_L^- C_M^- \left(-\frac{b^2}{x-y} + b^2CB \right) \left(-\frac{b^2}{x-y} + b^2\bar{C}\bar{B} \right) \times |x-y|^{2(2-2ab+b^2)} V_{a+b/2} \Phi_{a-3b/2}(y) \right]. \tag{50} \end{aligned}$$

Вторая производная $\partial_x \bar{\partial}_x$ от этого дает вклад от $x \sim y$ в (42). Из-за отсутствия духов C члены, не имеющие вид $U_{\#} = V_{\#} \Phi_{\#-b}$, не сокращаются, а в “правильных” членах появляются духи. Однако содержащие духи множители выглядят как ОРЕ

$$R_{1,2}(x)C(y) = \frac{b^2}{x-y} + b^2BC + \dots \tag{51}$$

Ровно так выглядят граничные вклады от строчек (43), (44), (45). Например, для строчки (44) мы имеем

$$\begin{aligned} -\partial_x \bar{\partial}_y \log|x-y|^2 \times & \left[\tilde{C}_L^+ C_M^+ \left(\frac{b^2}{x-y} - b^2CB \right) \left(-\frac{b^2}{x-y} + b^2\bar{C}\bar{B} \right) \times |x-y|^{2(2ab-b^2)} V_{a-b/2} \Phi_{a-b/2}(y) + \right. \\ & + \tilde{C}_L^+ C_M^- \left(\frac{b^2}{x-y} - b^2CB \right) \left(\frac{1-2ab}{x-y} + b^2\bar{C}\bar{B} \right) \times |x-y|^2 U_{a-b/2}(y) + \\ & + \tilde{C}_L^- C_M^+ \left(\frac{b^2}{x-y} - b^2CB \right) \left(\frac{2ab-2b^2-1}{x-y} + b^2\bar{C}\bar{B} \right) \times |x-y|^2 U_{a+b/2}(y) + \\ & \left. + \tilde{C}_L^- C_M^- \left(\frac{b^2}{x-y} - b^2CB \right) \left(-\frac{b^2}{x-y} + b^2\bar{C}\bar{B} \right) \times |x-y|^{2(2-2ab+b^2)} V_{a+b/2} \Phi_{a-3b/2}(y) \right]. \end{aligned}$$

На уровне примарных полей, т.е. дифференцируя только коэффициенты, зависящие от $x - y$, мы можем заменить $\bar{\partial}_y$ на $-\bar{\partial}_x$, после чего вклады от строчек (42) и (44), пропорциональные $V_{a-b/2}\Phi_{a-b/2}$ и $V_{a+b/2}\Phi_{a-\frac{3b}{2}}$ сокращаются под производной. Такое же сокращение происходит и для подобных вкладов из строчек (43) и (45). С другой стороны, суммируя вклады типа $U_{a-b/2}$ от всех четырех строчек, мы получаем

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1-2ab}{x-y} + b^2CB\right) \left(\frac{1-2ab}{x-y} + b^2\overline{CB}\right) + \left(\frac{1-2ab}{x-y} + b^2CB\right) \left(\frac{b^2}{x-y} - b^2\overline{CB}\right) + \\ & + \left(\frac{b^2}{x-y} - b^2CB\right) \left(\frac{1-2ab}{x-y} + b^2\overline{CB}\right) + \left(\frac{b^2}{x-y} - b^2CB\right) \left(\frac{b^2}{x-y} - b^2\overline{CB}\right) = \\ & = \left(\frac{1-2ab}{x-y} + b^2CB + \frac{b^2}{x-y} - b^2CB\right) \times \left(\frac{1-2ab}{x-y} + b^2\overline{CB} + \frac{b^2}{x-y} - b^2\overline{CB}\right) = \\ & = \frac{1}{|x-y|^2} (1-2ab+b^2)^2. \end{aligned} \tag{52}$$

Видим, что духов не осталось и мы получили такой же фактор, как для ОРЕ O' с W (см. (20)).

Все вместе. Собирая (36), (38) и (46), мы получили следующее выражение для пятиточечного коррелятора

$$C_5(a_1, a_2, a_3|k_1, k_2) = (b^{-6} - b^{-2}) [\Sigma_1 + \Sigma_2 + \Sigma_3]; \tag{53}$$

$$\Sigma_1 = \sum_{s=-k_1:2}^{k_1} q_{0,s}^{(1,k_1+1)}(a_{1,-k_2-1}) \times \left[2(1+k_2-s)\lambda_{1,1+k_2-s} + \sum_{i=1}^3 \sum_{l=-k_2+s:2}^{k_2-s} q_{0,l}^{(1,1+k_2-s)}(a_i) \right], \tag{54}$$

$$\Sigma_2 = \sum_{i=1}^3 \sum_{s=-k_1:2}^{k_1} q_{0,s}^{(1,k_1+1)}(a_i) \left[2(1+k_2)\lambda_{1,1+k_2} + \sum_{l=-k_2:2}^{k_2} \left(q_{0,l}^{(1,k_2+1)}(a_i - \lambda_{0,s}) + \sum_{j \neq i} q_{0,l}^{(1,k_2+1)}(a_j) \right) \right], \tag{55}$$

$$\Sigma_3 = 2\lambda_{1,1+k_1} \left[\sum_{s=-k_1:2}^{k_1} \sum_{l=-k_2:2}^{k_2} \left(\sum_{i=1}^3 q_{0,l}^{(1,1+k_2)}(a_i) + 2\lambda_{1,k_2+1} \right) + \sum_{s=k_2-k_1}^{k_2+k_1} q_{0,s-k_1}^{(1,k_2+1)}(a_{1,k_1+1})(1+s) \right]. \tag{56}$$

Работа была проведена в Институте теоретической физики им. Ландау в рамках государственного задания # 0029-2019-0004.

1. A. Belavin, M. Bershtein, and G. Tarnopolsky, Письма в ЖЭТФ **93**(2), 51 (2011) [JETP Lett. **93**(2), 471 (2011)].
2. A. Polyakov, Phys. Lett. B **103**, 207 (1981).
3. A. Belavin, A. Polyakov, and A. Zamolodchikov, Nucl. Phys. B **241**, 333 (1984).
4. V. G. Knizhnik, A. M. Polyakov, and A. B. Zamolodchikov, Mod. Phys. Lett. A **3**, 819 (1988).
5. F. David, Mod. Phys. Lett. A **3**, 1651 (1988).
6. J. Distler and H. Kawai, Nucl. Phys. B **321**, 509 (1989).
7. P. H. Ginsparg and G. W. Moore, arXiv:hep-th/9304011.
8. P. Di Francesco, P. H. Ginsparg, and J. Zinn-Justin, Phys. Rep. **254**, 1 (1995); hep-th/9306153.
9. M. Goulian and M. Li, Phys. Rev. Lett. **66**, 2051 (1991).
10. G. W. Moore, N. Seiberg, and M. Staudacher, Nucl. Phys. B **362**, 665 (1991).

11. A. Belavin and A. Zamolodchikov, Jour. Phys. A **42**, 304004 (2009); arXiv:0811.0450 [hep-th].
12. A. Belavin and Al. Zamolodchikov, Theor. Math. Phys. **147**, 729 (2006); hep-th/0510214.
13. A. Belavin and Al. Zamolodchikov, JETP Lett. **82**, 8 (2005).
14. H. Dorn and H.-J. Otto, Phys. Lett. B **291**, 39 (1992); hep-th/9206053.
15. H. Dorn and H.-J. Otto, Nucl. Phys. B **429**, 375 (1994); hep-th/9403141.
16. A. Zamolodchikov and Al. Zamolodchikov, Nucl. Phys. B **477**, 577 (1996).
17. Al. Zamolodchikov, Int. J. Mod. Phys. A **19S2**, 510 (2004); hep-th/0312279.
18. E. Witten, Nucl. Phys. B **373**, 187 (1992); hep-th/9108004.
19. A. Belavin and V. Belavin, J. Phys. A **42**, 304003 (2009); arxiv: hep-th/08101023.
20. Al. Zamolodchikov, Theor. Math. Phys. **142**, 183 (2005).

Измерение T -нечетной корреляции в радиационном распаде $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu_e \gamma$ с помощью установки ОКА

А. Ю. Поляруш^{a,1)}, С. А. Акименко^b, А. В. Артамонов^b, В. Н. Бычков^c, А. М. Горин^b, Е. Н. Гуцин^a, С. В. Донсков^b, В. А. Дук^{a,d}, Б. Ж. Залиханов^c, А. В. Инякин^b, Г. Д. Кекелидзе^c, В. Н. Колосов^b, В. И. Кравцов^a, Ю. Г. Куденко^{a,e,f}, А. В. Кулик^a, В. Ф. Куршецов^b, В. А. Лишин^b, В. М. Лысан^c, М. В. Медынский^b, В. Ф. Образцов^b, А. В. Охотников^b, В. А. Поляков^b, В. И. Романовский^b, В. И. Рыкалин^b, А. С. Садовский^b, В. Д. Самойленко^b, И. С. Тюрин^b, В. А. Уваров^b, А. П. Филин^b, С. Н. Филиппов^a, Г. В. Хаустов^b, С. А. Холоденко^b, А. А. Худяков^a, О. Г. Чикилев^b, О. П. Ющенко^b

^aИнститут ядерных исследований РАН, 117312 Москва, Россия

^bИнститут физики высоких энергий им. А. А. Логонова, Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 142280 Протвино, Россия

^cОбъединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

^dIstituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN), Sezione di Perugia, Via A. Pascoli, 06123 Perugia, Italy

^eМосковский физико-технический институт (МФТИ), 117303 Москва, Россия

^fНациональный исследовательский ядерный университет “МИФИ” (НИЯУ МИФИ), 115409 Москва, Россия

Поступила в редакцию 14 сентября 2022 г.

После переработки 26 сентября 2022 г.

Принята к публикации 26 сентября 2022 г.

В работе представлено измерение T -нечетной корреляции в радиационном распаде $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu_e \gamma$, выполненное на установке ОКА. Было выделено 101200 событий-кандидатов исследуемого распада. Измеряемая корреляция $\xi_{\pi e \gamma}$ – это смешанное произведение импульсов e^+ , π^0 , и γ в системе покоя каона, нормированное на M_K^3 . Для оценки асимметрии распределения по $\xi_{\pi e \gamma}$ используется величина $A_\xi = \frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-}$, где $N_{+(-)}$ – число событий с ξ больше (меньше) нуля. Для асимметрии A_ξ получено значение $A_\xi = (+0.1 \pm 3.9 \text{ (стат.)} \pm 1.7 \text{ (сист.)}) \times 10^{-3}$ или $|A_\xi| < 5.4 \times 10^{-3}$ (90% CL).

DOI: 10.31857/S1234567822210030, EDN: lgpwxw

В данной статье мы продолжаем начатое в работе [1] экспериментальное изучение распада $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu_e \gamma$ ($K_{e3\gamma}$) на утроенной статистике. Этот распад представляет большой интерес, так как он позволяет осуществить поиск T -нечетных тройных корреляций. Обнаружение T -нечетных корреляций по CP -теореме эквивалентно нарушению CP -инвариантности, что в физике каонов до настоящего времени наблюдалось только в распадах нейтральных каонов. Поэтому радиационные распады заряженных K -мезонов представляют большой интерес и для теоретиков и для экспериментаторов, как возможный альтернативный источник информации о нарушениях CP -инвариантности.

Существующие к настоящему времени экспериментальные данные по нарушению CP -инвариантности объясняются комплексной фазой

матрицы смешивания кварков Кабиббо–Кобаяши–Маскава [2–4]. Однако доказано, что этот механизм не достаточен для объяснения наблюдаемой барионной асимметрии Вселенной [5–7]. Это заставляет искать новые источники нарушения CP -инвариантности. В целом поиск новых процессов с нарушением CP -инвариантности дает возможность исследовать новую физику вне Стандартной Модели (СМ).

Хотя в СМ CP -нарушение крайне мало в лептонных и полулептонных распадах каонов, в различных моделях вне СМ предсказываются относительно большие CP -нарушающие эффекты. Так, в распаде $K^+ \rightarrow \mu^+ \nu_e \gamma$ различные модели [8–13] предсказывают T -нечетную поперечную поляризацию мюона на уровне от 5×10^{-3} [11, 12] до 5×10^{-2} [13], а в распаде $K^+ \rightarrow \mu^+ \nu_e \pi^0$ от 5×10^{-5} [14] до 5×10^{-3} [15]. Экспериментальные ограничения (90% CL) : $P_T < 3.1 \times 10^{-2}$ и $P_T < 5.0 \times 10^{-3}$ [16, 17]. Эти экспери-

¹⁾e-mail: polyarush@inr.ru

менты дают лучшие возможности для обнаружения скалярного (псевдоскалярного) варианта Новой физики (НФ), для векторного (аксиального) варианта НФ.

Как было отмечено в работах [18, 19], распад $K_{e3\gamma}$ позволяет провести поиск векторного (аксиального) варианта НФ, для которого матричный элемент распада $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu \gamma$ имеет вид

$$T = \frac{G_F}{\sqrt{2}} e V_{us} \varepsilon^\mu(q) \left\{ (V_{\mu\nu} - A_{\mu\nu}) \bar{u}(p_\nu) \gamma^\nu (1 - \gamma_5) v(p_l) + \frac{F_\nu}{2p_l q} \bar{u}(p_\nu) \gamma^\nu (1 - \gamma_5) (m_l - \hat{p}_l - \hat{q}) \gamma_\mu v(p_l) \right\}, \quad (1)$$

где адронные тензоры $V_{\mu\nu}^{\text{had}}$ и $A_{\mu\nu}^{\text{had}}$ определены как $I_{\mu\nu} = i \int d^4 e^{iqx} \langle \pi^0(p') | T V_{\mu\nu}^{em}(x) I_\nu^{\text{had}}(0) | K^+(p) \rangle$, $I = V, A$, $c V_\nu^{\text{had}} = (1 + g_V) \bar{s} \gamma_\nu u$, $A_\nu^{\text{had}} = (1 - g_A) \bar{s} \gamma_\nu \gamma_5 u$, $V_\mu^{em} = (2\bar{u} \gamma_\mu u - \bar{d} \gamma_\mu d - \bar{s} \gamma_\mu s)/3$ и F_ν – это K_{e3}^+ матричный элемент $F_\nu = (1 + g_V) \langle \pi^0(p') | V_\nu^{\text{had}}(0) | K^+(p) \rangle$, здесь g_V, g_A – векторная и псевдовекторная константы, которые могут быть комплексными. Первый член уравнения (1) описывает внутреннее тормозное излучение и структурное излучение, диаграмма (рис. 1а). Лептонное тормозное излучение представлено второй частью уравнения (1) и диаграммой (рис. 1б).

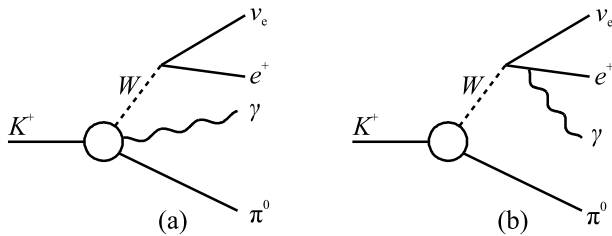


Рис. 1. Диаграммы распада $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu \gamma$

Для изучения тройных T -нечетных корреляций используется переменная

$$\xi_{\pi e \gamma} = \frac{1}{M_K^3} \mathbf{p}_\gamma \cdot [\mathbf{p}_\pi \times \mathbf{p}_l]. \quad (2)$$

Впервые искать тройные T -нечетные корреляции в радиационных распадах K -мезонов было предложено в работе [20].

Для оценки асимметрии распределения по переменной ξ мы используем величину

$$A_\xi = \frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-}, \quad (3)$$

где $N_{+(-)}$ – число событий с ξ больше (меньше) нуля. В работах [18, 19] для векторного и аксиального варианта Новой физики в рамках модели, основанной

на калибровочной группе $SU(2)_L \times SU(2)_R \times U(1)$, было получено следующее теоретическое ограничение:

$$|A_\xi(K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu_e \gamma)| < 0.8 \cdot 10^{-4}. \quad (4)$$

В СМ в древесном приближении асимметрия равна нулю, сравнимое значение A_ξ появляется в результате электромагнитного взаимодействия в конечном состоянии. Этот эффект в однопетлевом приближении вычислялся в работах [19, 21, 22], были получены значения: в первой работе $A_\xi = -0.59 \cdot 10^{-4}$, во второй – $A_\xi = -0.93 \cdot 10^{-4}$.

1. Эксперимент. Эксперимент выполнен на ускорителе ИФВЭ У-70 на сепарированном пучке K -мезонов с энергией 17.7 ГэВ, обогащенном K -мезонами до 20%. Эксперимент проводился на установке ОКА, она подробно описана в наших недавних публикациях [1, 23, 24]. Схема установки ОКА представлена на рис. 2. Установка состоит из пучкового спектрометра, распадного объема с вето системой, спектрометра заряженных частиц, электромагнитного калориметра, адронного калориметра и мюонного детектора. Используемый для набора данных триггер описан в [1]. Монте-Карло (МК) расчеты для фоновых и сигнальных процессов проводились с помощью пакета GEANT3 [25]. События взвешивались в соответствии с теоретическими матричными элементами. В сигнальном МК использовалось приближение $O(p^4)$ Киральной пертурбативной модели [19, 21].

2. Отбор событий. В качестве кандидатов на распад $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu_e \gamma$ мы отбирали события с одним положительно заряженным треком, зарегистрированным трековой системой детектора и четырьмя ливнями в электромагнитном калориметре. Один из ливней должен ассоциироваться с заряженным треком. Идентификация позитрона осуществлялась по отношению энергии этого ливня и импульса позитрона, измеренного трековой системой. Кроме того, для идентификации позитрона использовалось ограничение на расстояние от экстраполированной точки попадания трека в электромагнитный калориметр и центром ассоциированного ливня – оно не должно быть более 3 см.

Для реконструкции π^0 использовалась пара из трех оставшихся неассоциированных с треком ливней (фотонов) с инвариантной массой, ближайшей к табличному значению массы π^0 (рис. 3). Для подавления фона использовался отбор $|m_{\gamma\gamma} - m_{\pi^0}| < 30$ МэВ. Энергия фотонов от распада π^0 должна быть больше 0.5 ГэВ. Энергия оставшегося фотона должна превышать 0.7 ГэВ.

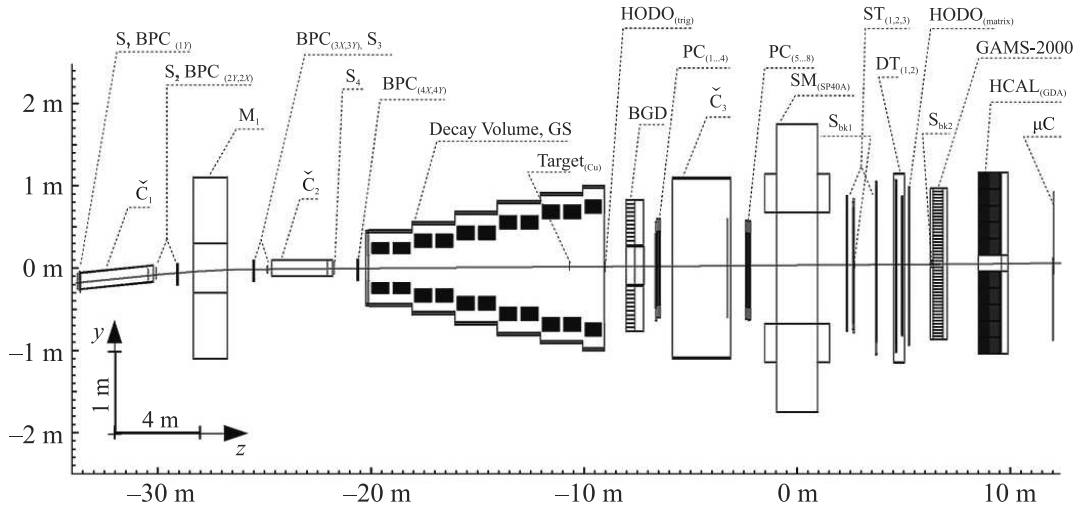
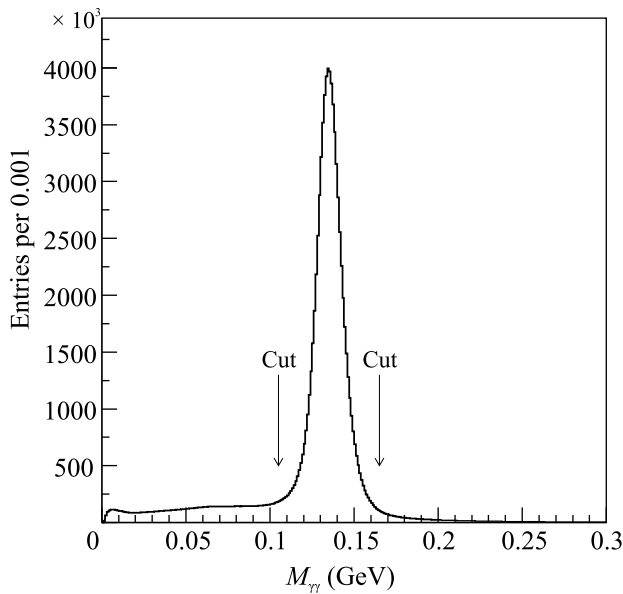


Рис. 2. (Цветной онлайн) Схема экспериментальной установки ОКА

Рис. 3. Инвариантная масса $\gamma\gamma$ -пары, имеющая значение, ближайшее к табличному значению массы π^0

3. Подавление фонов. Основными фонами к исследуемому распаду являются:

- 1) $K^+ \rightarrow \pi^+\pi^0\pi^0$ с 1 потерянным γ -квантом и π^+ , ложно идентифицированным как позитрон.
- 2) $K^+ \rightarrow \pi^+\pi^0$ со случайным дополнительным γ -квантом и π^+ , ложно идентифицированным как позитрон.
- 3) $K^+ \rightarrow \pi^0e^+\nu_e$ с дополнительным γ -квантом из-за взаимодействия e^+ с веществом установки.
- 4) $K^+ \rightarrow \pi^+\pi^0\gamma$ с π^+ , ложно идентифицированным как позитрон.

5) $K^+ \rightarrow \pi^0\pi^0e^+\nu_e$ с 1 потерянным γ -квантом. Все эти фоновые процессы включены в Монте-Карло расчеты.

Для подавления фонов 1)–5) мы применяли отборы:

1. $E_{\text{miss}} = E_{\text{beam}} - E_{\text{detected}} > 0.5$ ГэВ.

Требование на недостающую энергию, подавляющее фон 4).

2. $\Delta y = |y_\gamma - y_{e^+}| > 3$ см, где y – вертикальная координата точки попадания позитрона и фотона в электромагнитный калориметр. Магнитное поле поворачивает трек заряженной частицы в xz -плоскости. Этот отбор подавляет прежде всего фон 3) от распада $K^+ \rightarrow \pi^0e^+\nu_e$.

3. $|x_\nu, y_\nu| < 100$ см. Прямая вдоль направления недостающего импульса должна пересекать апертуру электромагнитного калориметра. Этот отбор подавляет фон 4), где нет нейтрино.

4. $0.004 < \Theta_{e\gamma} < 0.080$ рад. Левая часть этого отбора введена именно для подавления фона 3). Правая часть отбора 4 применяется против фона 2) от K_{π^2} распадов.

5. $M_{K \rightarrow \pi^0e^+\nu_e\gamma} > 0.45$ ГэВ. $M_{K \rightarrow \pi^0e^+\nu_e\gamma}$ – реконструированная масса системы ($\pi^0e^+\nu_e\gamma$) – в предположении, что масса незарегистрированной частицы равна нулю, $m_\nu = 0$. Распределение по M_K на данном этапе отборов представлено на рис. 4.

6. $-0.006 < M_\nu^2 < 0.006$ ГэВ². Для усиления отбора 5 мы используем требование к недостающей массе в квадрате $M_\nu^2 = (P_K - P_{\pi^0} - P_e - P_\gamma)^2$. Здесь $P_K, P_{\pi^0}, P_e, P_\gamma$ – 4-импульсы соответствующих частиц. Для сигнальных событий эта переменная соответствует квадрату массы нейтрино и должна быть равна нулю в пределах точности измерения,

а для большинства фоновых событий распределение по данной переменной значительно шире.

Доминирующим фоном для исследуемого распада $K_{e3\gamma}$ является фон от K_{e3} распада с дополнительным фотоном – фон 3). Этот фон подавляется отбором 2, а также ограничением на угол между позитроном и радиационным фотоном в лабораторной системе $\Theta_{e\gamma}$. Распределение по $\Theta_{e\gamma}$ для событий K_{e3} -фона имеет очень узкий пик под нулевым углом. Этот пик значительно уже, чем в сигнальных событиях. Это происходит потому, что излучение фотонов позитроном в фоновом процессе происходит в результате взаимодействий в материале детектора после вершины распада, а угол в программе реконструкции вычисляется так, как если бы излучение исходило из первичной вершины.

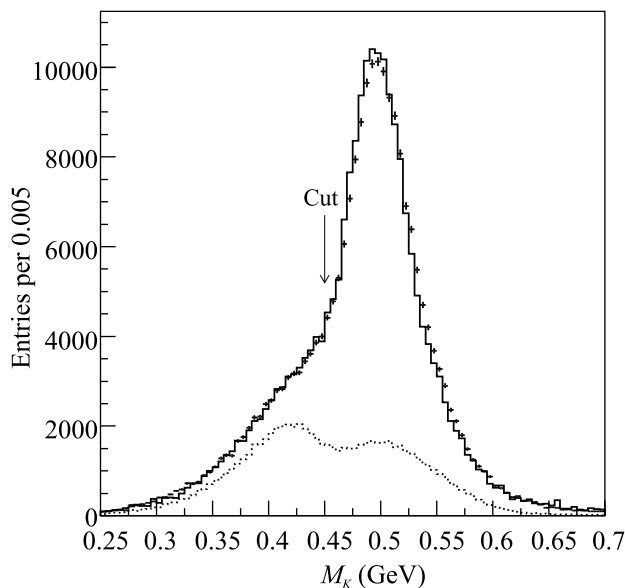


Рис. 4. Распределение по реконструированной массе каона. Пунктирная кривая – суммарный фон. Сплошная гистограмма – сумма МК фона и сигнала

Фоновый распад 4) имеет относительную вероятность распада на уровне исследуемого и подавляется правильной идентификацией позитрона, а также отбором по недостающей энергии 1.

Фоновый канал 5) подавляется отбором 6 по недостающей массе.

В результате после всех отборов осталось 101200 событий-кандидатов распада $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu_e \gamma$. Суммарный фон при этом составил 17700 событий. Нормировка фонов проводилась путем сравнения количества зарегистрированных $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu_e$ распадов в данных и МК.

4. Результаты. Было построено распределение по переменной ξ (формула (2)). Асимметрия в распределении по переменной ξ будет однозначно указывать на нарушение T -инвариантности. Распределение по переменной ξ представлено на рис. 5.

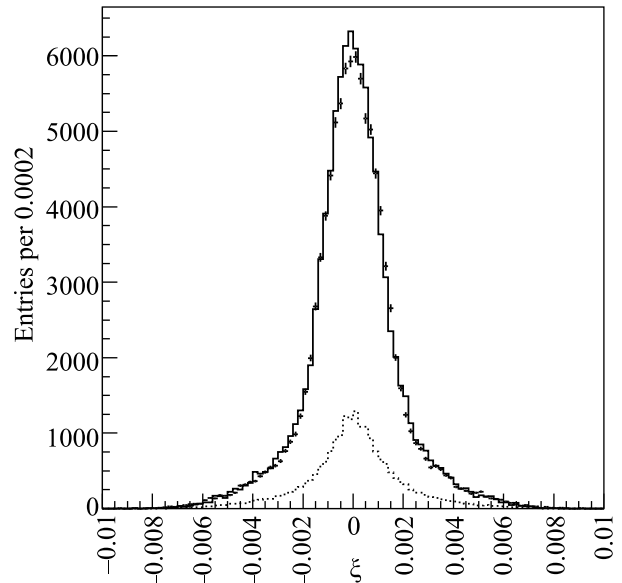


Рис. 5. Распределение по переменной ξ . Пунктирная кривая – суммарный фон. Сплошная гистограмма – сумма МК фона и сигнала

Измеренная величина A_ξ (формула (3)), характеризующая асимметрию, для $E_\gamma^* > 10$ МэВ и $\Theta_{e\gamma}^* > 10^\circ$ равна:

$$A_\xi = (+0.1 \pm 3.9 (\text{стат.}) \pm 1.7 (\text{сист.})) \times 10^{-3}.$$

Статистическая ошибка вычислялась с учетом фона. Соответствующее ограничение $|A_\xi| < 5.44 \times 10^{-3}$ (90% CL).

Сравнение с результатом предыдущего эксперимента приводится в табл. 1 для ограничений $E_\gamma^* > 10$ МэВ, $0.6 < \cos \Theta_{e\gamma}^* < 0.9$, которые применялись в работе [26].

Таблица 1. Сравнение экспериментальных результатов

A_ξ	N_{ev}	Эксперимент
$-0.007 \pm 0.008 \pm 0.002$	19295	Настоящий эксперимент
-0.015 ± 0.021	1456	ISTRA+ [26]

Для ограничений $E_\gamma^* > 30$ МэВ и $\Theta_{e\gamma}^* > 20^\circ$, использовавшихся в теоретических работах [18, 22], получен следующий результат:

$$A_\xi = (+4.4 \pm 7.9 (\text{стат.}) \pm 1.9 (\text{сист.})) \times 10^{-3}.$$

Рассмотрим подробнее оценку систематики для случая $E_\gamma^* > 10$ МэВ и $\Theta_{e\gamma}^* > 10^\circ$. Вклад в систематическую ошибку из-за отборов определялся варьированием каждого из них и приведен в табл. 2. Дополнительная систематика получается из неопределенности 0- шкалы из-за ошибок измерения $\xi_{\pi e\gamma}$. Оценка этого вклада дает ± 0.00065 .

Таблица 2. Вклад варьирования каждого из катов в систематическую ошибку для $E_\gamma^* > 10$ МэВ и $\Theta_{e\gamma}^* > 10^\circ$

N_{cut}	1	2	3	4	5	6
$\Delta \cdot 10^3$	0.03	0.04	0.04	0.03	0.96	0.70

Оценка ложной асимметрии в распределении по $\xi_{\pi e\gamma}$ из-за акцептанса установки, эффективностей реконструкции и отборов проводилась с помощью сигнального МС, в котором нет нарушения CP . Измеренная разница между исходным и реконструированным значением A_ξ оказалась равной: $\Delta_A = 0.0012 \pm 0.0011$, т.е. не наблюдается значимого эффекта. Ошибка в оценке смещения была добавлена в систематику.

Исследовалась также систематика, связанная с моделями, используемыми в Монте-Карло. В сигнальном Монте-Карло приближение $O(p^4)$ Киральной модели заменялось на $O(p^2)$. Это дало пренебрежимо малый эффект.

5. Заключение. В работе продолжено изучение распада $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu_e \gamma$ на статистике 10^5 событий, втрое превышающей использованную в [1]. Произведен поиск $T(CP)$ -нечетных эффектов в этом распаде, которые могли проявляться в ненулевом значении асимметрии A_ξ (3) по $T(CP)$ -нечетной переменной ξ (2). В результате получены значения A_ξ для трех областей по энергии и углу вылета фотона в системе покоя каона:

$$A_\xi = (+0.1 \pm 3.9 \text{ (стат.)} \pm 1.7 \text{ (сист.)}) \times 10^{-3},$$

$$|A_\xi| < 5.44 \times 10^{-3} (90\% \text{ CL})$$

для $E_\gamma^* > 10$ МэВ и $\Theta_{e\gamma}^* > 10^\circ$.

$$A_\xi = (-7.0 \pm 8.1 \text{ (стат.)} \pm 1.5 \text{ (сист.)}) \times 10^{-3},$$

$$|A_\xi| < 1.05 \times 10^{-2} (90\% \text{ CL})$$

для $E_\gamma^* > 10$ МэВ, $0.6 < \cos \Theta_{e\gamma}^* < 0.9$.

$$A_\xi = (+4.4 \pm 7.9 \text{ (стат.)} \pm 1.9 \text{ (сист.)}) \times 10^{-3},$$

$$|A_\xi| < 1.04 \times 10^{-2} (90\% \text{ CL})$$

для $E_\gamma^* > 30$ МэВ и $\Theta_{e\gamma}^* > 20^\circ$.

В рамках расширений СМ асимметрию можно улучшить из векторных и аксиально-векторных теорий,

которые в самом общем виде можно описать матричным элементом (1), в котором константы g_A и g_V – комплексны. В работах [18, 19] из (1) в рамках ChPT в порядке $O(p^4)$ получено: $A_\xi = \text{Im}(g_A + g_V) \times 3 \cdot 10^{-3}$ для $E_\gamma^* > 30$ МэВ и $\Theta_{e\gamma}^* > 20^\circ$. Отсюда и из нашего результата получаем ограничение $\text{Im}(g_A + g_V) < 3.5$ (90% CL). Этот результат можно попытаться улучшить, подобрав оптимальные ограничения по $(E_\gamma^*, \Theta_{e\gamma}^*)$. Для более конкретных расширений СМ, например, рассмотренных в [27], в [18, 19] получена оценка $|A_\xi| < 0.8 \times 10^{-4}$.

Работа выполнена с поддержкой гранта Российского научного фонда # 22-12-0051.

1. A. Yu. Polyarush, S. A. Akimenko, A. V. Artamonov et al. (OKA), Eur. Phys. J. C **81**(2), 161 (2021).
2. N. Cabibbo Phys. Rev. Lett **10**, 531 (1963).
3. M. Kobayashi and T. Maskawa, Prog. Theor. Phys. **49**, 652 (1973).
4. C. Jarlskog, Z. Phys. C **29**, 491 (1985).
5. G. F. Farrar and M. E. Shaposhnikov, Phys. Rev. Lett. **70**, 2833 (1993); Erratum ibid: Phys. Rev. Lett. **71**, 210 (1993); hep-ph/9305274.
6. P. Het and E. Sather, Phys. Rev. D **51**, 379 (1995); hep-ph/9404302.
7. M. Carena, M. Quiros, and C. E. Wagner, Phys. Lett. B **380**, 81 (1996); hep-ph/9303420.
8. J. F. Donoghue and B. Holstein, Phys. Lett. B **113**, 382 (1982).
9. L. Wolfenstein, Phys. Rev. D **29**, 2130 (1984).
10. G. Barenboim, J. Bernabeu, J. Prades, and M. Raidal, Phys. Rev. D **55**, 4213 (1997).
11. M. Kobayashi, T. T. Lin, and Y. Okada, Prog. Theor. Phys. **95**, 361 (1996).
12. R. Garisto and G. Kane Phys. Rev. D **44**, 2038 (1991).
13. G. Belanger and C. Q. Geng, Phys. Rev. D **44**, 2789 (1991).
14. Y. Grossman and Y. Nir, Phys. Lett. B **313**, 126 (1993).
15. G. H. Wu and J. N. Ng, Phys. Lett. B **392**, 93 (1997).
16. M. Abe, M. Aliev, V. Anisimovsky et al. (KEK-E246 Collaboration), Phys. Rev. D **73**, 072005 (2006).
17. V. V. Anisimovsky, A. N. Khotjantsev, and A. P. Ivashkin, Phys. Lett. B **562**, 166 (2003).
18. V. V. Braguta, A. A. Likhoded, and A. E. Chalov, Phys. Rev. D **68**, 094008 (2003).
19. В. В. Брагута, А. А. Лиходел, А. Е. Чалов, ЯФ **67**, 1025 (2004) [V. V. Braguta, A. A. Likhoded, and A. E. Chalov, Phys. Atom. Nucl. **67**, 1003 (2004)].
20. J. Gevas, J. Pliopolus, and J. Kaplan, Phys. Lett. **20**, 432 (1966).
21. V. V. Braguta, A. A. Likhoded, and A. E. Chalov, Phys. Rev. D **65**, 054038 (2002).

22. I. B. Khriplovich and A. S. Rudenko, *Phys. Atom. Nucl.* **74**, 1214 (2011).
23. V. S. Burtovoy, S. A. Akimenko, A. V. Artamonov et al. (ОКА), *ЖЭТФ* **131**(6), 928 (2020).
24. V. I. Kravtsov, S. A. Akimenko, A. V. Artamonov et al. (ОКА), *Eur. Phys. J. C* **79**(7), 635 (2019).
25. R. Brun, F. Bruyant, M. Maire et al. (Collaboration), CERN-DD/EE/84-1, CERN, Geneva (1987).
26. S. A. Akimenko, V. N. Bolotov, G. I. Britvich et al. (ISTRA+), *ЯФ* **70**, 1 (2007) [*Phys. Atom. Nucl.* **70**, 29 (2007)].
27. J. C. Pati and A. Salam, *Phys. Rev. D* **10**, 275 (1975).

Цилиндрические микрорезонаторы с квантовыми точками InAs/GaAs – моделирование и анализ оптических характеристик

М. А. Бобров^{+*1)}, С. А. Блохин⁺, Н. А. Малеев⁺, А. Г. Кузьменков⁺, А. А. Блохин⁺, А. П. Васильев[×],
Ю. А. Гусева⁺, М. В. Рахлин⁺, А. И. Галимов⁺, Ю. М. Серов⁺, С. И. Трошков⁺, В. М. Устинов^{*},
А. А. Торопов⁺

⁺ Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

^{*} С.-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 195251 С.-Петербург, Россия

[×] Научно-технологический центр микроэлектроники и субмикронных гетероструктур РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 26 сентября 2022 г.

После переработки 26 сентября 2022 г.

Принята к публикации 26 сентября 2022 г.

Представлены результаты исследований оптических характеристик структур цилиндрических вертикальных микрорезонаторов с AlGaAs распределенными брэгговскими отражателями и InAs/GaAs квантовыми точками, предназначенных для изготовления источников одиночных фотонов. Методом конечных разностей во временной области выполнено численное моделирование эффектов влияния на величину фактора Парселла и эффективности вывода излучения таких параметров, как наклон боковых стенок, частичное окисление AlGaAs слоев и отклонение расположения квантовых точек от центральной оси микрорезонатора, а также определены допустимые диапазоны реализации этих параметров, для цилиндрических вертикальных микрорезонаторов спектрального диапазона 920 нм. Сравнение результатов расчетов, выполненных с использованием уточненных значений показателей преломления используемых материалов при криогенных температурах, и измеренных характеристик изготовленных микрорезонаторных структур подтвердило адекватность используемых моделей.

DOI: 10.31857/S1234567822210042, EDN: lgvsmi

Цилиндрические вертикальные микрорезонаторы (ЦВМ, англ. *cylindrical micropillars*) с полупроводниковыми квантовыми точками (КТ, англ. *quantum dot*, QD) являются одним из наиболее перспективных вариантов реализации источников одиночных фотонов (ИОФ, англ. *single-photon source*) для перспективных систем квантовой криптографии [1] и квантовых вычислений [2]. Базовая конструкция ЦВМ представляет собой микроцилиндр с характерным диаметром 1–4 мкм, изготовленный из эпитаксиальной гетероструктуры с двумя распределенными брэгговскими отражателями (РБО, англ. *distributed Bragg reflector*, DBR), между которыми располагается полость микрорезонатора (GaAs), включающая слой InAs/GaAs КТ с низкой поверхностной плотностью [3]. РБО состоят из чередующихся четвертьволновых слоев AlGaAs с высоким и низким содержанием Al, а для формирования КТ используют эффекты самоорганизации в гетероструктурах InGaAs/GaAs [4]. Оптимальная структура ЦВМ имеет строго цилиндрическую форму и гладкие вертикальные стенки [5]. При

этом предполагается, что излучающий элемент (КТ) располагается в геометрическом центре оптического микрорезонатора, а длина волны излучения КТ точно совпадает с резонансной длиной волны. При использовании современного эпитаксиального оборудования и тщательных калибровках ростовых параметров соответствие проектным значениям толщины и состава эпитаксиальных слоев, а также точность позиционирования плоскости с КТ уверенно обеспечиваются на уровне $\sim 1\%$ и лучше [6]. В то же время при практической реализации структур ЦВМ с КТ следует принимать во внимание возможный наклон боковых стенок микроцилиндра, шероховатость его поверхности, частичное локальное окисление слоев AlGaAs с высоким содержанием Al и отклонение положения излучающей КТ от вертикальной оси микрорезонатора [7]. Исследование степени влияния перечисленных факторов на оптические характеристики ЦВМ с КТ и потенциальные характеристики ИОФ на их основе представляет актуальную задачу.

В настоящей работе выполнено численное моделирование эффектов влияния наклона боковых стенок, частичного окисления AlGaAs слоев и точно-

¹⁾ e-mail: bobrov.mikh@gmail.com

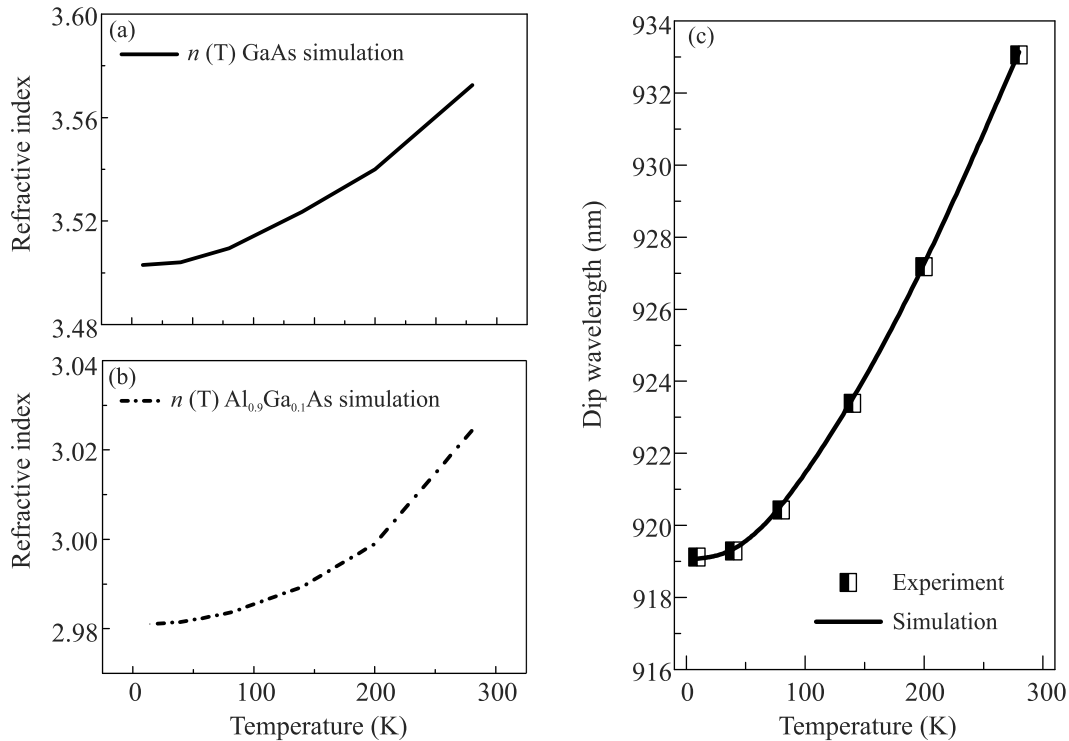


Рис. 1. Уточненные температурные зависимости показателей преломления GaAs (a) и Al_{0.9}Ga_{0.1}As (b). На рисунке (c) приведена расчетная зависимость спектрального положения основной моды планарной гетероструктуры вертикального микрорезонатора от температуры с нанесенными экспериментальными данными (черные полуквадраты)

сти расположения КТ относительно центральной оси микрорезонатора на основные оптические характеристики ЦВМ, функционирующих в качестве ИОФ на длине волны около 920 нм. Проведен сравнительный анализ результатов экспериментальных исследований оптических характеристик изготовленных ЦВМ и выполненных расчетов с использованием уточненных значений показателей преломления используемых материалов при криогенных температурах.

В качестве модельного объекта, выбранного для проведения сравнительных исследований, были использованы структуры ЦВМ, ранее изготовленные с помощью фотолитографии и плазмохимического травления на основе гетероструктур, выращенных методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ, англ. *Molecular-beam epitaxy*, МВЕ) на подложках GaAs [8]. Гетероструктуры включали два РБО, состоящие из набора пар слоев Al_{0.9}Ga_{0.1}As/GaAs, каждый – толщиной $\lambda/4n$, где n – показатель преломления соответствующего материала, а λ – резонансная длина волны. Между РБО располагался GaAs резонаторный слой с толщиной λ/n , в центре которого находился слой InAs КТ с низкой поверхностной плотностью ($\sim 1-2 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$). В исследуемых струк-

турах верхний РБО содержал 15 пар четвертьволновых слоев, а нижний РБО – 28 пар. Параметры РБО были выбраны таким образом, чтобы обеспечить значительное увеличение скорости спонтанного излучения в КТ за счет эффекта Парселла, сохранив при этом достаточно высокую эффективность вывода излучения [9, 10]. Данная конструкция использовалась во всех модельных расчетах.

Для сравнения результатов расчетов с экспериментальными данными были измерены как спектры оптического отражения исходных планарных гетероструктур, так и спектры микроотражения от отдельных структур ЦВМ с различным наклоном стенок цилиндра и диаметром у вершины, который в разных структурах варьировался от 1.8 до 4.6 мкм. Измерения спектров микроотражения проводились в микроскопной системе, собранной на базе проточного гелиевого микрокристата с низкотемпературными трехкоординатными пьезо-подвижками, обеспечивающими точность юстировки порядка 20 нм [8].

Эффективная однофотонная генерация предполагает охлаждение излучающего ЦВМ до криогенных температур $\sim 20 \text{ К}$ и ниже. Поэтому при моделировании параметров структуры ЦВМ критически важно правильно выбрать значения показателя пре-

ломления слоев $\text{Al}_{0.9}\text{Ga}_{0.1}\text{As}$ и GaAs в интересующей нас спектральной области при рабочих (криогенных) температурах. Уточненные температурные зависимости показателей преломления были получены в результате сопоставления результатов расчетов и измеренной зависимости от температуры резонансной длины волны в исходной планарной микрорезонаторной гетероструктуре, из которой впоследствии изготавливались массивы структур ЦВМ. Положение резонанса определялось в результате моделирования спектров отражения от планарной гетероструктуры методом матриц переноса ТММ (англ. *transfer matrix method*, ТММ). Предложенная ранее модель температурной зависимости показателей преломления [11], основанная на линейной экстраполяции экспериментальных данных, полученных при температурах вблизи комнатной, не позволила адекватно описать измеренные зависимости. В результате для подгонки экспериментальных данных нами предложены уточненные полиномиальные зависимости показателей преломления слоев GaAs и $\text{Al}_{0.9}\text{Ga}_{0.1}\text{As}$ от температуры, графики которых представлены на рис. 1а, б.

Для моделирования оптических характеристик ЦВМ с КТ использовался метод численного решения уравнений Максвелла в конечных разностях во временной области (англ. *Finite-difference time-domain method*, FDTD) [12]. При практической реализации разностного метода существует проблема неточного отображения границ раздела двух сред на вычислительную сетку. Геометрически несогласованная с вычислительной сеткой криволинейная поверхность границ раздела материалов искажается эффектом лестничного приближения (англ. *Staircase effect*), что в результате снижает точность расчетов методом FDTD. Для решения данной проблемы без существенного увеличения затрат вычислительных ресурсов использовался метод, основанный на введении эффективной диэлектрической проницаемости вблизи границ раздела двух материалов [13]. При этом одиночная InAs КТ (источник излучения) аппроксимировалась диполем, расположенным в центральной плоскости GaAs активной области ЦВМ между двумя РБО $\text{Al}_{0.9}\text{Ga}_{0.1}\text{As}/\text{GaAs}$. Для расчетов спектров отражения и пропускания вокруг структуры ЦВМ формировался детектирующий прямоугольный параллелепипед, отдельные грани которого использовались для определения доли излучения источником в различных направлениях: вверх, вниз и в боковых направлениях. Полученные значения электрических и магнитных полей на детектирующих поверхностях переводились в частотное пред-

ставление с помощью дискретного преобразования Фурье. Далее, используя рассчитанные значения вектора Пойнтинга во времени, определялся средний поток электромагнитной энергии через каждую детектирующую поверхность. Нормируя полученный поток на мощность импульса возбуждения диполя, были рассчитаны интересующие спектры поглощения и отражения. При расчетах использовались предложенные уточненные зависимости показателей преломления слоев GaAs и $\text{Al}_{0.9}\text{Ga}_{0.1}\text{As}$ от температуры.

Экспериментально были измерены спектры отражения группы ЦВМ при температуре 9 К; при этом точные геометрические размеры и наклон стенок определялись с помощью измерений на сканирующем электронном микроскопе. По измеренным спектрам отражения были определены положения резонансных пиков, отвечающие двум первым модам микрорезонатора (LP01 и LP02), и построены зависимости их спектрального положения от диаметра ЦВМ, измеренного на его вершине. На рисунке 2 представлены зависимости положения резонансных пиков двух первых мод ЦВМ, рассчитанные для двух вариантов конструкций: без наклона боковых стенок (штрихпунктирные кривые) и с наклоном боковых стенок в 3.5° (штриховые кривые); точками показаны экспериментальные данные для ЦВМ с наклоном стенок в 3.5° . Сравнение экспериментальных данных с результатами расчетов показывает хорошее совпадение (ошибка менее 3 %) при учете наклона боковых стенок микрорезонатора, что подтверждает адекватность разработанной модели.

С точки зрения использования структуры ЦВМ в качестве ИОФ важнейшими оптическими характеристиками являются доля излучения диполя, выходящего вверх (англ. *Photon extraction efficiency*, ПЕЕ), фактор Парселла (F_p) и добротность микрорезонатора. При расчетах методом FDTD величина ПЕЕ оценивалась как отношение потока электромагнитной энергии через верхнюю детектирующую плоскость к общему потоку, испускаемому диполем. Фактор Парселла определялся как отношение добротности микрорезонатора к объему его оптической моды V_m с дополнительным коэффициентом согласно работе [14]. Добротность микрорезонатора определялась как отношение длины волны резонанса фундаментальной моды к ширине резонансного пика на его полувысоте.

Влияние различных факторов подробно анализировалось для ЦВМ с диаметром 2.5 мкм, поскольку такой размер микрорезонатора близок к оптимальному с точки зрения максимума значения произведения параметра ПЕЕ на фактор Парселла, что подтверждается опубликованными результатами [15].

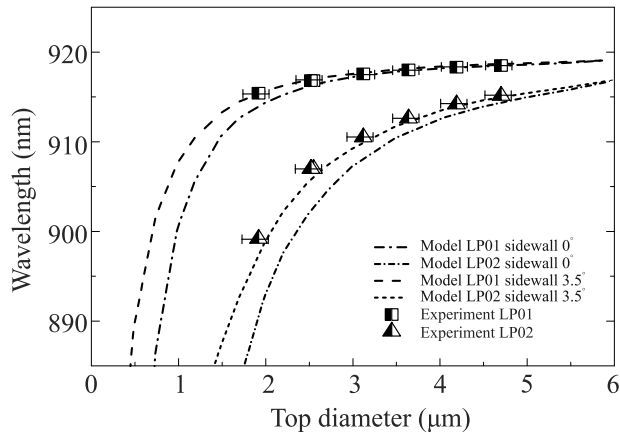


Рис. 2. Зависимости положения резонансных пиков для первых двух мод (LP01 и LP02) ЦВМ от диаметра на вершине микрорезонатора. Символами (квадраты и треугольники) представлены экспериментальные данные, полученные из измеренных спектров отражения; штрихпунктирные кривые – моделирование ЦВМ с вертикальными стенками; штриховые кривые – моделирование ЦВМ с углом наклона боковых стенок 3.5° ; длинные штриховые и штрихпунктирные кривые соответствуют моде LP01, короткие штриховые и штрихпунктирные – моде LP02

Все расчеты проводились для рабочей температуры 9 К.

Для определения влияния наклона боковых стенок ЦВМ на ввод излучения ИОФ в оптическое волокно был проведен анализ эффективности сбора фотонов в заданном апертурном угле (англ. *Photon collection efficiency*, PCE). Величина PCE рассчитывалась как отношение мощности излучения диполя в дальнем поле в заданном угле к общей мощности излучения, испускаемого в верхнюю полусферу. На рисунке 3а представлены расчетные зависимости PCE от числовой апертуры для ЦВМ с диаметром на вершине 2.5 мкм. Сплошная кривая соответствует ЦВМ с вертикальными стенками, а штриховая линия – ЦВМ с наклоном боковых стенок 3.5° . Согласно результатам соответствующих измерений, эффективность сбора однофотонного излучения не меняется при использовании объективов с числовыми апертурами $NA = 0.7$ и $NA = 0.45$. Данный факт находится в хорошем соответствии с результатами расчетов, согласно которым для ЦВМ с наклоном боковых стенок 3.5° значения параметра PCE для числовых апертур $NA = 0.7$ и $NA = 0.45$ отличаются не более, чем на 2 %.

Для оценки степени влияния латерального отклонения положения КТ от вертикальной оси ЦВМ были выполнены расчеты фактора Парселла и пара-

метра РЕЕ для двух вариантов ЦВМ с диаметром 2.5 мкм на вершине (с вертикальными и наклонными боковыми стенками) и различным расположением источника излучения (см. рис. 3б). Видно, что эффективность вывода излучения падает на 20 % при отклонении положения диполя относительно вертикальной оси ЦВМ на 830 мкм для ЦВМ с вертикальными стенками и 910 нм для ЦВМ с наклоном боковых стенок 3.5° . Однако требование сохранения величины F_p не менее 80 % от максимального значения приводит к более жесткому ограничению на максимально допустимое отклонение излучающего диполя от центрального положения. Для ЦВМ с вертикальными стенками отклонение от центра не должно превышать 350 нм, а для ЦВМ с наклоном стенок 3.5° – 400 нм. Такое различие обусловлено тем, что с ростом угла наклона боковых стенок ЦВМ увеличивается и эффективный объем моды (V_m) микрорезонатора, что приводит к расширению допустимой области расположения диполя вокруг вертикальной оси, в пределах которой значения фактора F_p и параметра РЕЕ сохраняются на уровне не ниже 80 % от своих максимальных значений. Таким образом, значения фактора Парселла и эффективности излучения в верхнюю полусферу на уровне не менее 80 % от своих максимальных значений для ЦВМ с наклонными стенками и диаметром 2.5 мкм на вершине могут быть обеспечены при попадании КТ в окружность с центром на вертикальной оси микрорезонатора и радиусом 0.4 мкм.

Другим возможным эффектом при изготовлении ЦВМ для ИОФ является частичное латеральное окисление слоев $Al_{0.9}Ga_{0.1}As$ микрорезонатора, характерное для слоев с высоким содержанием алюминия при отсутствии защиты поверхности. В процессе такого неконтролируемого и сравнительно медленного окисления образуется оксидный слой с показателем преломления, близким к 1.6, что приводит к формированию у поверхности боковых стенок локальных областей с большим скачком показателя преломления, которые могут приводить к дополнительным оптическим потерям из-за рассеяния излучения. Для выяснения степени влияния данного эффекта на оптические свойства исследуемых ЦВМ было выполнено моделирование структуры ЦВМ с окисленными на 200 нм в латеральном направлении от поверхности стенки микроцилиндра слоями $Al_{0.9}Ga_{0.1}As$. Для сравнения был промоделирован вариант с защитным покрытием боковой поверхности слоем полиамида для предотвращения процессов окисления и обеспечения стабильных во времени характеристик ИОФ.

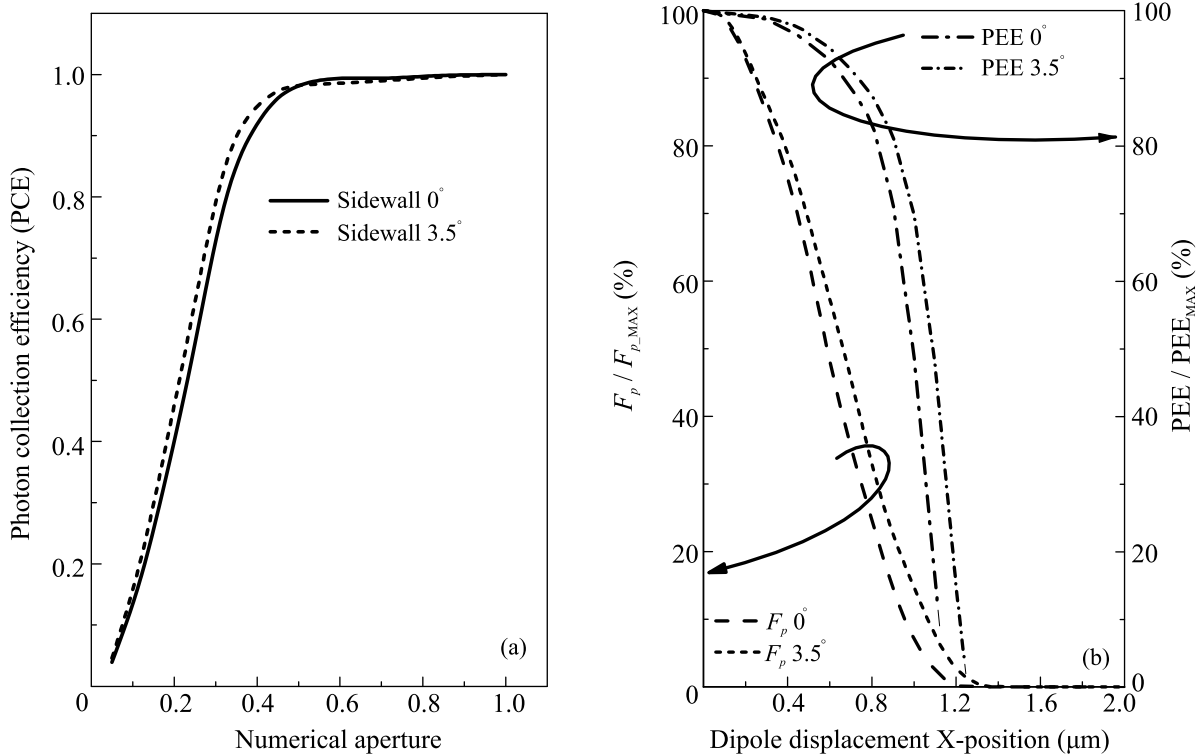


Рис. 3. Результаты расчетов оптических характеристик структур ЦВМ с диаметром на вершине 2.5 мкм. (а) – Зависимости эффективности сбора фотонов от апертурного угла, сплошная кривая соответствует микрорезонатору с вертикальными стенками, штриховая – микрорезонатору с наклоном боковых стенок 3.5°. (б) – Зависимости фактора Парселла и параметра PEE от сдвига положения излучающего диполя относительно вертикальной оси ЦВМ в латеральном направлении, нормированные на максимальные значения соответствующих параметров при точном расположении диполя на центральной оси микрорезонатора

Таблица 1. Результаты расчета влияния наклона стенок, бокового окисления AlGaAs слоев и защитного покрытия ЦВМ на его оптические характеристики; данные приведены для фундаментальной моды LP01 микрорезонатора с диаметром 2.5 мкм на вершине

λ (нм)	Q	F_p	DCE NA = 1 (%)	DCE NA = 0.42 (%)	Комментарии
913.8	5645	11.2	80.6	74.1	Идеально вертикальные стенки
912.9	5109	13.6	79.6	66.8	Идеально вертикальные стенки + окисленные на 200 нм AlGaAs слой
914.4	4620	8.9	64	61.3	Наклон стенок 3.5°
912.9	4965	12	78.2	63.9	Идеально вертикальные стенки + окисленные на 200 нм AlGaAs слой + защитный полиамид
913.8	5633	10.6	84	78.2	Идеально вертикальные стенки + полиамид сбоку
914.4	4572	8.6	67	63.2	Наклон стенок 3.5° + защитный полиамид

Результаты расчетов для рассмотренных вариантов структур ЦВМ приведены в табл.1. Микроцилиндр с идеально вертикальными гладки-

ми стенками рассматривался в качестве идеальной структуры ЦВМ, оптические характеристики которой сравнивались с другими вариантами. Для

структуры микрорезонатора с вертикальными боковыми стенками и латеральным окислением слоев $\text{Al}_{0.9}\text{Ga}_{0.1}\text{As}$ на глубину 200 нм наблюдается падение фактора эффективности сбора излучения диполя (англ. *Dipole collection efficiency*, DCE) в апертурном угле $\text{NA} = 0.42$ с 74 до 67%. Одновременно фактор F_p возрастает с 11.2 до 13.6, а длина волны излучения сдвигается на 1 нм в коротковолновую область, что обусловлено уменьшением V_m микрорезонатора. Расчеты, выполненные для структуры с наклоном боковых стенок 3.5° , показывают дальнейшее снижение параметра DCE в апертурном угле $\text{NA} = 0.42$ до уровня 61%, одновременное снижение F_p до величины 8.9 и сдвиг длины волны излучения на 1 нм в длинноволновую область, что обусловлено увеличением V_m резонатора. При использовании в качестве защитного покрытия оптически прозрачного полиамида с показателем преломления 1.5 для рассмотренных вариантов ЦВМ не происходит существенной деградации основных оптических характеристик. В случае вертикальных стенок и расположения защитного слоя полиамида только со стороны боковых поверхностей микроцилиндра, оптические характеристики ЦВМ оказываются близки к идеальному случаю; при этом можно ожидать их долговременную стабильность из-за отсутствия окисления.

В заключение, в представленной работе выполнены экспериментальные исследования и численное моделирование оптических характеристик структур ЦВМ с AlGaAs РБО и InAs/GaAs КТ. На основе выполненных измерений спектров оптического отражения от планарных микрорезонаторных гетероструктур уточнены температурные зависимости показателей преломления используемых материалов, обеспечивающие необходимую точность моделирования при криогенных температурах. Количественно проанализированы эффекты влияния наклона боковых стенок, частичного окисления AlGaAs слоев и точности расположения КТ относительно центральной оси микрорезонатора на основные оптические характеристики ЦВМ, излучающего на длине волны 920 нм при криогенных температурах. Показано, что для структур ЦВМ с наклоном боковых стенок от 0 (идеально вертикальные стенки) до 3.5° при попадании излучающей КТ в пределы окружности с центром на вертикальной оси микрорезонатора и радиусом ~ 0.4 мкм обеспечивается сохранение значений фактора Парселла и доли излучения диполя, выходящего вверх, на уровне не менее 80% от их максимальных значений. Также показано, что для создания ИОФ на основе ЦВМ со стабильными характери-

стиками можно использовать оптически прозрачный полиамид в качестве защитного покрытия боковых стенок без существенного ухудшения основных оптических характеристик.

Экспериментальные исследования Н. А. Малеева, А. Г. Кузьменкова, А. А. Блохина, А. П. Васильева, Ю. А. Гусевой, М. В. Рахлина, А. И. Галимова, Ю. М. Серова, С. И. Трошкова и А. А. Торопова по созданию структур цилиндрических вертикальных микрорезонаторов для источников одиночных фотонов поддержаны госкорпорацией "Росатом" в рамках Дорожной Карты Квантовые Вычисления (контракт # 868-1.3-15/15-2021 от 5.10.2021 и контракт # R2152 от 19.11.2021).

М. А. Бобров и В. М. Устинов выражают благодарность Министерству науки и высшего образования РФ за финансовую поддержку исследований по численному моделированию оптических характеристик цилиндрических вертикальных микрорезонаторов в рамках Программы стратегического академического лидерства "Приоритет-2030" (соглашение 075-15-2021-1333 от 30 сентября 2021 г.).

М. В. Рахлин благодарит Совет по грантам Президента Российской Федерации за поддержку экспериментальных исследований характеристик цилиндрических вертикальных микрорезонаторов.

С. А. Блохин благодарит Российский фонд фундаментальных исследований (РФФИ) совместно с Немецким научно-исследовательским сообществом (ННИО) за финансовую поддержку работ по анализу оптических характеристик цилиндрических микрорезонаторов с квантовыми точками InAs/GaAs в рамках научного проекта РФФИ # 20-52-12006.

1. N. Gisin, G. Ribordy, W. Tittel, and H. Zbinden, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 145 (2002); DOI:10.1103/RevModPhys.74.145.
2. E. Knill, R. Laflamme, and G. J. Milburn, *Nature* **409**, 46 (2001); DOI:10.1038/35051009.
3. A. K. Verma, F. Bopp, J. J. Finley, B. Jonasa, A. Zrenner, and D. Reuter, *Journal of Crystal Growth* **15**, 126715 (2022); DOI:10.1016/j.jcrysgro.2022.126715
4. Y. Marzin, J.-M. Gérard, A. Izraël, D. Barrier, and G. Bastard, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 716 (1994); DOI:10.1103/PhysRevLett.73.716.
5. Y.-L. D. Ho, T. Cao, P. S. Ivanov, M. J. Cryan, I. J. Craddock, C. J. Railton, and J. G. Rarity, *IEEE J. Quantum Electron.* **43**(6), 1558 (2007); DOI:10.1109/JQE.2007.897905.
6. Y. Horikoshi, *General Description of MBE*, Waseda University, Tokyo (2019); DOI:10.1002/9781119354987.CH2.

7. L. Sapienza, M. Davanc, A. Badolato, and K. Srinivasan, *Nat. Commun.* **6**, 7833 (2015); DOI:10.48550/arXiv.1503.07141.
8. А. И. Галимов, М. В. Рахлин, Г. В. Клишко, Ю. М. Задиранов, Ю. А. Гусева, С. И. Трошков, Т. В. Шубина, А. А. Торопов, *Письма в ЖЭТФ* **113**(4), 248 (2021); DOI:10.31857/S1234567821040054.
9. S. Li, Y. Chen, X. Shang, Y. Yu, J. Yang, J. Huang, X. Su, J. Shen, B. Sun, H. Ni, X. Su, K. Wang, and Z. Niu, *Nanoscale Res. Lett.* **15**, 145 (2020); DOI:10.1186/s11671-020-03358-1.
10. X. Ding, Y. He, Z. C. Duan, N. Gregersen, M. C. Chen, S. Unsleber, S. Maier, C. Schneider, M. Kamp, S. Höfling, C.-Y. Lu, and J.-W. Pan, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 020401 (2016); DOI:10.1103/PhysRevLett.116.020401.
11. J. Talghader and J. S. Smith, *Appl. Phys. Lett.* **66**(3), 335 (1995); DOI:10.1063/1.114204.
12. A. Taflove and S. H. Hagness, *Computational Electrodynamics: The Finite Difference Time-Domain Method*, Artech House, Boston (2005).
13. W. Yu and R. Mittra, *IEEE Microw. Wirel. Compon. Lett.* **11**, 25 (2011); DOI:10.1109/7260.905957.
14. E. M. Purcell, *Phys. Rev.* **69**, 681 (1946); DOI:10.1103/PhysRev.69.674.2.
15. O. Gazzano, S. Michaelis de Vasconcellos, C. Arnold, A. Nowak, E. Galopin, I. Sagnes, L. Lanco, A. Lemaître, and P. Senellart, *Nat. Commun.* **4**, 1425 (2012); DOI:10.1038/ncomms2434.

Вынужденное рассеяние лазерного излучения в водной суспензии стеклянных микросфер

А. Ф. Бункин, М. А. Давыдов¹⁾, А. Н. Федоров, О. В. Уваров

Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 19 сентября 2022 г.

После переработки 27 сентября 2022 г.

Принята к публикации 27 сентября 2022 г.

В водной суспензии полых стеклянных микросфер зафиксировано возбуждение сигнала вынужденного рассеяния лазерного излучения на нескольких эквидистантных частотах. Также обнаружена частотная асимметрия рассеяния и отсутствие вынужденного рассеяния Мандельштама–Бриллюэна, сопровождающего нелинейные процессы в конденсированных средах при возбуждении узкополосным лазерным импульсом длительностью порядка десятков наносекунд. Наблюдавшиеся особенности обусловлены, на наш взгляд, вынужденным рассеянием лазерного излучения на модах шепчущей галереи стеклянных микросфер.

DOI: 10.31857/S1234567822210054, EDN: lgwzbi

Введение. Природные жидкости, содержащие смесь наноразмерных частиц, представляют собой актуальный объект исследования методами нелинейной оптики и когерентной спектроскопии. Примером таких сред являются практически все жидкости, содержащиеся в биологических объектах, причем нано- и микроразмерные частицы в этом случае могут представлять собой полые объекты сферической или квазисферической формы. Есть основания полагать, что в этом случае взаимодействие лазерного излучения с такими объектами, содержащимися в жидкости в виде взвеси, будет приводить к рассеянию на модах шепчущей галереи (МШГ) [1] дисперсных частиц и сопровождаться известными явлениями [2–5], наблюдаемыми при взаимодействии лазерного излучения с микрорезонаторами. Модельной средой для изучения подобных явлений может служить жидкость, содержащая полые сферы размерами от единиц до нескольких десятков микрон. Целью данной работы являлось изучение особенностей вынужденного рассеяния лазерного излучения в подобной модельной среде.

Эксперимент. В качестве объекта исследования была использована водная суспензия микросфер, изготовленных из боросиликатного стекла. Образцы, полученные нами в московском Институте стекла, представляли собой порошок, состоящий из полых стеклянных сфер наружным диаметром ~ 15 – 160 мкм, плотностью ~ 0.24 – 0.40 г/см³ [6] (рис. 1²⁾).

¹⁾e-mail: sbs_michail@mail.ru

²⁾Фотография микросфер получена с использованием оптического микроскопа Karl Zeiss в центре коллективного пользования ИОФ РАН.

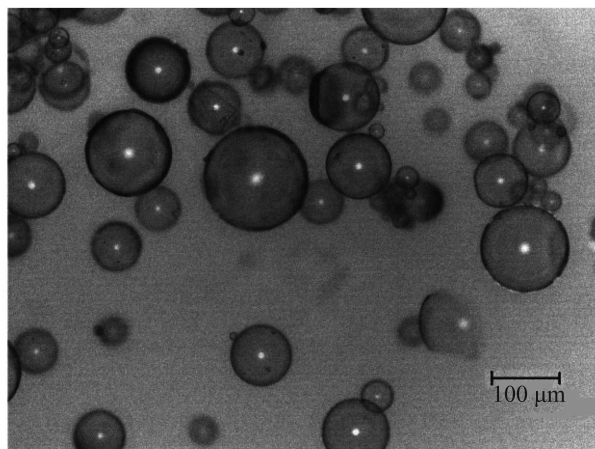


Рис. 1. Микрофотография образца полых стеклянных микросфер, полученная с помощью микроскопа Karl Zeiss (яркая точка в центрах сфер – точка контакта поверхности сферы с предметным стеклом)

Внутри микросфер находился остаточный угарный газ. Данные образцы были залиты бидистиллированной водой и тщательно перемешаны с помощью ультразвуковой мешалки ВАКУ мощностью 50 Вт. Полученная суспензия была залита в кварцевую кювету рабочей длиной ~ 20 мм. Кювета помещена на установку, описанную ранее [7], состоящую из YAG:Nd³⁺ лазера (параметры излучения: длина волны излучения $\lambda = 532$ нм, ТЕМ₀₀, ширина линии излучения $\delta\nu \sim 0.005$ см⁻¹, длительность импульса излучения $t_p \sim 10$ нс, энергия в импульсе E_p до 30 мДж, нестабильность по энергии импульса ~ 5 – 7 %) и системы регистрации спектров. Интерферометры (область дисперсии 2.5 см⁻¹ = 75 ГГц) системы ре-

гистрации были расположены на расстоянии более 100 см от кюветы с суспензией, перед интерферометрами были установлены диафрагмы диаметром ~ 1 см. Суспензия в кювете была подвергнута воздействию сфокусированного импульсного лазерного излучения, при этом энергию излучения последовательно увеличивали от ~ 1 до ~ 30 мДж. Лазерное излучение поступало в кювету на двух разных уровнях (рис. 2). Геометрия установки была одинакова для всего цикла измерений. Все измерения проводили при комнатной температуре.

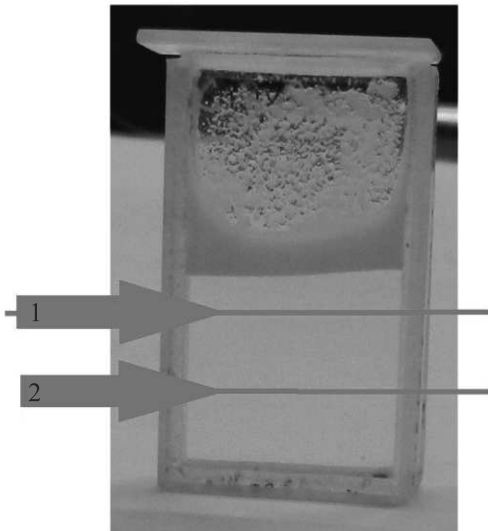


Рис. 2. (Цветной онлайн) Кварцевая кювета, заполненная суспензией микросфер в бидистиллированной воде (фотография сделана по окончании проведения измерений – микросферы полностью всплыли вверх и находятся выше условной стрелки “1”). Стрелками указаны направления и уровни, по которым в кювету поступало возбуждающее лазерное излучение

Результаты и обсуждение. Выявлены следующие особенности сигнала рассеяния:

1. Спектр состоит из линий, сравнимых по ширине и направленности с линией лазера.
2. Отсутствует сигнал вынужденного рассеяния Манделъштама–Бриллюэна (ВРМБ) воды.
3. Сигнал рассеяния имеет выраженную направленность и частотную асимметрию.
4. Вблизи лазерной линии присутствует линия с антистоксовым сдвигом частоты. Между парными линиями рассеяния имеет место такой же по величине сдвиг частоты, что у антистоксова сигнала вблизи лазерной линии (рис. 3с).

5. Различия в спектрах, полученные с уровней 1 и 2 (обусловлены, по-видимому, различием концентраций микросфер на этих уровнях в суспензии).

Результаты измерений сведены в табл. 1. Наи-

больший интерес представляют спектры, полученные при возбуждении рассеяния на уровне “1” в кювете. Соответствующие образцы интерферограмм приведены на рис. 3а–d.

Спектры наблюдались при энергиях в импульсе от 15 мДж и выше. Регистрируемое рассеянное излучение имело малую расходимость и интенсивность, сравнимую с интенсивностью падающей лазерной волны (рис. 3). Поляризацию рассеянного излучения в настоящей работе не изучали. Отсутствие сигнала ВРМБ связано, по-видимому, со значительной концентрацией полых микросфер (рис. 1) в области лазерного пучка, что не позволяло развиваться данному виду рассеяния. Наблюдавшийся многокомпонентный спектр (рис. 3) обусловлен, на наш взгляд, накачкой стеклянных сфер (микрорезонаторов) внешним лазерным излучением – так называемым рассеянием на модах шепчущей галереи [1, 8]. Оценим добротность этих микрорезонаторов. В тонкостенных стеклянных сферах диаметром порядка десятков – сотен микрометров, могут возникать акустические моды шепчущей галереи (далее МШГ), которые для гиперзвуковых частот лежат в диапазоне нескольких гигагерц. Используем для расчетов собственных частот МШГ ν_k оценочную формулу [8]:

$$\nu_k \cong k \frac{c}{2\pi r},$$

где k – азимутальное квантовое число, c – скорость звука в материале оболочки сферы, в стекле, r – радиус сферы. Вообще говоря, пространственное распределение МШГ связано, помимо азимутального квантового числа, еще с двумя квантовыми числами m , n , но они никоим образом на значение частоты не влияют, так как мода является вырожденной по m , n [8].

Как известно, добротность Q колебательной моды зависит от ее времени жизни. В приближении эйконала, можно предположить, что время жизни будет порядка времени τ распространения волны на длине замкнутого контура $l = 2\pi r$. Тогда для добротности можно записать:

$$Q = \pi N \cong \pi \frac{\tau}{T} = \pi \frac{2\pi r}{\lambda} \cong \pi k,$$

где N – число колебаний за время релаксации, T – период колебаний. Откуда видно, что добротность Q будет расти с увеличением отношения радиуса сферы r к длине волны λ , т.е. пропорционально азимутальному числу k . Может показаться, что при увеличении радиуса сферы добротность будет безгранично возрастать. На самом деле это не так. В реальных

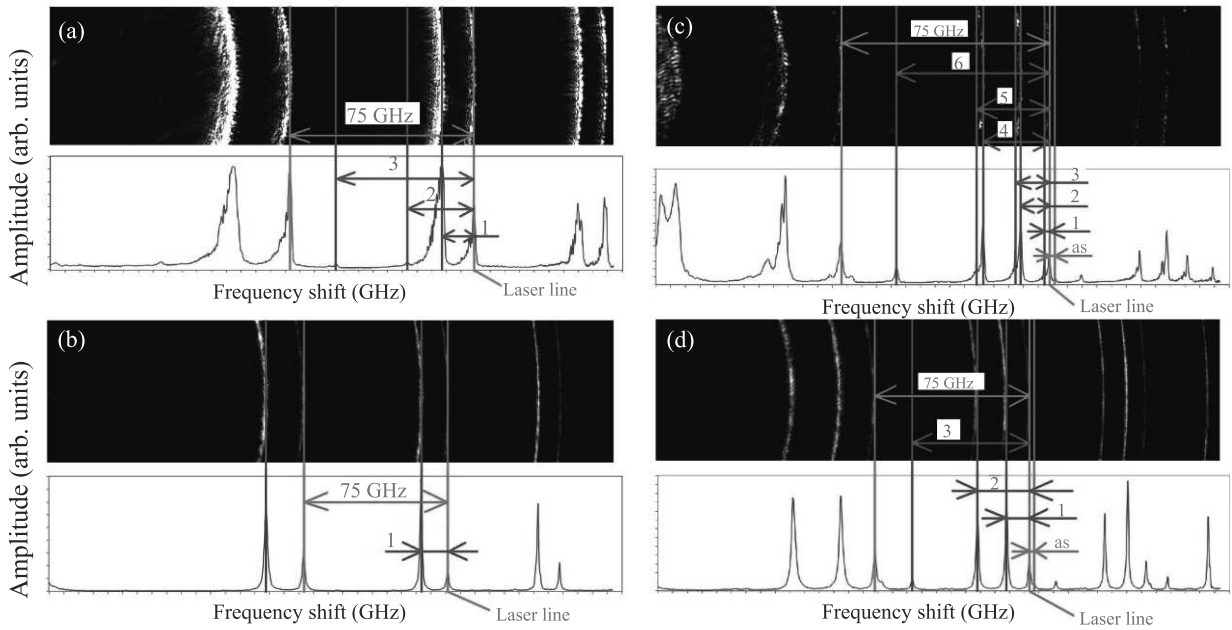


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Интерферограмма сигнала рассеяния “вперед”. 1 – линия со стоксовым сдвигом $\sim 0.53 \text{ см}^{-1}$; 2 – линия со стоксовым сдвигом $\sim 1.034 \text{ см}^{-1}$; 3 – линия со стоксовым сдвигом $\sim 1.97 \text{ см}^{-1}$ (или с антистоксовым $\sim 0.53 \text{ см}^{-1}$). Здесь и далее: Laser line – линия излучения лазера, $75 \text{ ГГц} = 2.5 \text{ см}^{-1}$ – область дисперсии интерферометра. (б) – Интерферограмма сигнала рассеяния “назад”. 1 – линия со стоксовым сдвигом $\sim 0.52 \text{ см}^{-1}$. (с) – Интерферограмма сигнала рассеяния “вперед”. as – линия с антистоксовым сдвигом $\sim 0.08\text{--}0.09 \text{ см}^{-1}$; 1 – линия со стоксовым сдвигом $\sim 0.08\text{--}0.09 \text{ см}^{-1}$; 2 – линия со стоксовым сдвигом $\sim 0.44 \text{ см}^{-1}$; 3 – линия со стоксовым сдвигом $\sim 0.52 \text{ см}^{-1}$; 4 – линия со стоксовым сдвигом $\sim 0.98 \text{ см}^{-1}$; 5 – линия со стоксовым сдвигом $\sim 1.06 \text{ см}^{-1}$; 6 – линия со стоксовым сдвигом $\sim 1.97 \text{ см}^{-1}$ (или с антистоксовым $\sim 0.53 \text{ см}^{-1}$). (д) – Интерферограмма сигнала рассеяния “назад”. as – линия с антистоксовым сдвигом $\sim 0.08\text{--}0.09 \text{ см}^{-1}$; 1 – линия со стоксовым сдвигом $\sim 0.44 \text{ см}^{-1}$; 2 – линия со стоксовым сдвигом $\sim 0.977 \text{ см}^{-1}$; 3 – линия со стоксовым сдвигом $\sim 1.97 \text{ см}^{-1}$ (или с антистоксовым $\sim 0.53 \text{ см}^{-1}$)

Таблица 1. Результаты измерений спектров вынужденного рассеяния

Уровень в кювете (в соответствии с рис. 2)	Энергия лазерного импульса на входе в кювету, мДж	Сдвиги частоты “вперед”, см^{-1} (ГГц)	Сдвиги частоты “назад”, см^{-1} (ГГц)	Примечание
Уровень 1	15	s-0.53 (15.9) 1.034 (31.02) 1.97 (59.1)	s-0.52 (15.6)	рис. 3а
Уровень 1	25	as-0.08–0.09 (2.4–2.7) s-0.44 (13.2) 0.52 (15.6) 0.98 (29.4) 1.06 (31.8) 1.97 (59.1)	as-0.08–0.09 (2.4–2.7) s-0.44 (13.2) 0.977 (29.4) 1.97 (59.1)	рис. 3б
Уровень 2	15	s-0.08 (2.4)	–	“назад” – только линия лазера
Уровень 2	25	s-0.44 (13.2)	s-0.43 (12.9)	–

as – антистоксова линия; s – стоксова линия.

системах рост добротности будет ограничен шероховатостью поверхности сферы, а также дефектами и неоднородностями среды, в которой распространяется акустическая волна. Типичное значение доброт-

ности МШГ, наблюдаемое в экспериментах [1, 8], порядка $Q \cong 1 \cdot 10^3$. В наблюдаемых спектрах наиболее вероятно появление мод с высоким значением добротности Q , т.е. из области существования МШГ, а

следовательно, и с большим азимутальным числом k . По экспериментальным данным можно определить значения азимутального квантового числа для каждой зарегистрированной частоты. Оценим для одной из зарегистрированных мод – 2.4 ГГц. Положим, что ей соответствует минимальный радиус исследуемых сфер – 15 мкм. Тогда:

$$k = \frac{2\pi r}{c} \nu \approx 90.$$

Откуда добротность данной колебательной моды:

$$Q \cong \pi k \approx 300,$$

что по порядку величины соответствует значению добротности микрорезонаторов [2–5].

Таким образом, впервые получены спектры вынужденного рассеяния в жидкой микродисперсной среде, моделирующей реальный биологический объект. Обнаружено, что вид спектра вынужденного рассеяния существенно зависит от концентрации полых микросфер, при этом добротность наблюдаемых акустических мод достигает величины $Q \sim 300$. Решение обратной спектральной задачи, т.е. определение механических параметров микродисперсных сфер из наблюдаемых спектров, что представляется актуальным для практических приложений, пока осуществить не удалось. Это является предметом дальнейших исследований.

Авторы считают своим долгом поблагодарить А. М. Юркина, директора ООО “Кристаллы Сибири”, за помощь в создании экспериментальной установки.

Работа была поддержана грантом Российского научного фонда # 22-22-00153.

1. М. Л. Городецкий, *Оптические микрорезонаторы с гигантской добротностью*, Физматлит, М. (2011), 416 с.
2. Y. Zhang, L. Wang, Zh. Cheng, and H.K. Tsang, *Appl. Phys. Lett.* **111**, 041104 (2017); doi.org/10.1063/1.4996367.
3. J. Shi, H. Wu, J. Liu, Sh. Li, and X. He, www.nature.com/scientific-reports; published: 15 July 2015, DOI: 10.1038/srep11964.
4. М. В. Архипенко, А. Ф. Бункин, М. А. Давыдов, О. А. Карпова, В. Б. Ошурко, С. М. Першин, А. Н. Федоров, *Краткие сообщения по физике* **11**, 8 (2018); DOI:10.3103/S1068335618110027.
5. N.V. Tcherniega, S.M. Pershin, A.F. Bunkin, E.K. Donchenko, O.V. Karpova, A.D. Kudryavtseva, V.N. Lednev, T.V. Mironova, M.A. Shevchenko, M.A. Stokov, and K.I. Zemskov, *Laser Phys. Lett.* **15**, 095603 (2018); doi.org/10.1088/1612-202X/aad28d.
6. А. Н. Трофимов, Л. В. Плешков, А. В. Байков, И. В. Стогова, *Пластические массы* **11–12**, 15 (2020); DOI: 10.35164/0554-2901-2020-11-12-15-19.
7. А. Ф. Бункин, М. А. Давыдов, В. Н. Леднев, С. М. Першин, Е. А. Трифонова, А. Н. Федоров, *Краткие сообщения по физике* **6**, 37 (2018); DOI:10.3103/S1068335618060052.
8. G. Bahl, X. Fan, and T. Carmon, *New J. Phys.* **14**, 115026 (2012); doi:10.1088/1367-2630/14/11/115026.

Сверхпроводимость в разбавленной системе узлов с сильным межэлектронным притяжением

А. Ю. Зюзин¹⁾

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, 117940 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 1 сентября 2022 г.

После переработки 20 сентября 2022 г.

Принята к публикации 21 сентября 2022 г.

Рассматривается сверхпроводимость в проводнике с разбавленной системой отрицательных U центров с сильным электрон-электронным притяжением. Показано, что когда притяжение превышает определенное пороговое значение, на центрах возникают куперовские пары. При низких температурах благодаря андреевскому рассеянию между центрами возникает глобальное когерентное сверхпроводящее состояние. Вычислены зависимости температуры сверхпроводящего перехода и второго критического магнитного поля от величины притяжения.

DOI: 10.31857/S1234567822210066, EDN: lhaplх

Полупроводники $A^IV B^VI$ при малой концентрации носителей могут иметь относительно большие значения температуры сверхпроводящего перехода [1]. Оригинальной особенностью таких систем являются резонансные центры, возникающие в основной электронной зоне при легировании и обеспечивающие пиннинг фермиевского уровня. Отмечено, что наибольшая температура сверхпроводящего перехода достигается при пиннинге уровня Ферми в режиме вырождения состояний, отличающихся четным числом электронов. Это указывает на то, что на таких резонансных центрах может существовать сильное притяжение между электронами [2–4]. Недавние теоретические и экспериментальные исследования соединений $A^IV B^VI$ и связи сверхпроводимости с особенностями легирования проводились в работах [5–6].

Электронный газ переходит в сверхпроводящее состояние даже при слабом притяжении между частицами. Образование электронных пар и их последовательная конденсация происходят при одной и той же температуре. При сильном притяжении энергия связи электронных пар может превышать температуру конденсации [7, 8]. Такому явлению способствует узкая электронная зонная структура [9] и наличие плоских зон [10].

Модели с локальным примесным притяжением вблизи области вырождения можно свести к системе псевдоспинов взаимодействующих обменным образом с электронами проводимости. Сверхпроводимость

здесь соответствует дальнему порядку псевдоспинов [11 и ссылки там].

Мы используем преобразование Хаббарда–Стратоновича в модели отрицательных U центров для изучения сверхпроводимости как в режиме слабой, так и сильной связи. В последнем случае по мере усиления притяжения возникает локальный порядок с некоррелированными фазами на разных центрах. Когерентное же состояние возникает из-за андреевского рассеяния между центрами. Вычислено верхнее критическое магнитное поле. Показано, что в режиме сильной связи магнитное поле не приводит к подавлению локального порядка, а разрушает когерентность между центрами.

1. Основные определения. Гамильтониан системы с отрицательными U центрами, которые слабо перекрываются с проводящими состояниями, имеет вид

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\mathbf{p}, \sigma} [\epsilon(\mathbf{p}) - \mu] a^\dagger(\mathbf{p}, \sigma) a(\mathbf{p}, \sigma) + U_{\text{imp}} + \\
 & + \sum_{i, \sigma} U [a^\dagger(\mathbf{r}_i, \sigma) a_i(\sigma) + a_i^\dagger(\sigma) a(\mathbf{r}_i, \sigma)] + \\
 & + \sum_i [E_R(n_{i, \downarrow} + n_{i, \uparrow}) - W n_{i, \downarrow} n_{i, \uparrow}]. \quad (1)
 \end{aligned}$$

Здесь $a^\dagger(\mathbf{p}, \sigma)$, $a(\mathbf{p}, \sigma)$ – операторы рождения и уничтожения проводящих электронов со спектром $\epsilon(\mathbf{p})$, μ – химический потенциал, а U_{imp} описывает случайное рассеяние проводящих электронов. Третий член гамильтониана (1) описывает слабую гибридизацию между проводящими и резонансным состояниями. Здесь $a_i^\dagger(\sigma)$, $a_i(\sigma)$ – операторы рождения и

¹⁾e-mail: a.zyuzin@mail.ioffe.ru

уничтожения электронов в резонансном состоянии на примеси в точке r_i . Последний член в (1) содержит сумму гамильтонианов, описывающих резонансные узлы. E_R – энергия резонанса, измеренная относительно химического потенциала и $W > 0$ – энергия электрон-электронного притяжения на узле. Используем единицы, где $\hbar = k_B = 1$.

Функция Грина резонансного узла на мацубаровской частоте $\omega_n = (2n + 1)\pi T$ имеет вид

$$g_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega_n) = \frac{\psi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)\psi(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_i)}{i\omega_n - E_R + i\gamma \text{sign } \omega_n}. \quad (2)$$

Предполагается, что волновая функция $\psi(\mathbf{r}) \sim a^{-3/2}$ в области размером порядка длины локализации центра a . Из-за гибридизации с зонными состояниями уровень уширяется на величину $\gamma = \pi^3 \nu_0 |U|^2$, где ν_0 – односпиновая плотность проводящих состояний на уровне Ферми.

При малой концентрации резонансных центров среднее время свободного пробега τ зонных электронов определяется в основном рассеянием на нерезонансных узлах. Функция Грина проводящих электронов, усредненная по рассеянию на примесях, определяется выражением [12]

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega_n) = \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\exp[i\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] }{i\omega_n - \epsilon(\mathbf{p}) + \mu + i \text{sign } \omega_n / 2\tau}. \quad (3)$$

Режим сильного беспорядка в модели Хаббарда обсуждался в [13].

Распространение электронной пары между центрами при многократном рассеянии описывается пропагатором, изображенным на рис. 1. Он находится из уравнения

$$(-D\nabla^2 + |\omega_n - \omega_m|)C(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega_n, \omega_m) = \Theta(-\omega_n \omega_m) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (4)$$

где D – константа диффузии проводящих электронов за счет рассеяния на примесях.

В магнитном поле в градиентной части надо заменить $\nabla \rightarrow \nabla - \frac{2e}{c} \mathbf{A}$.

2. Сверхпроводящая неустойчивость при слабом притяжении. Неустойчивость системы по отношению к переходу в сверхпроводящее состояние соответствует расходимости суммы лестничных диаграмм [12], показанной на рис. 2. Мы учитываем электрон-электронное взаимодействие только на резонансных узлах, а распространение электронных пар между ними описываем пропагатором (4).

Электронная петля $\Pi(i, m)$ на рис. 2 состоит из локального и дальнего вклада.

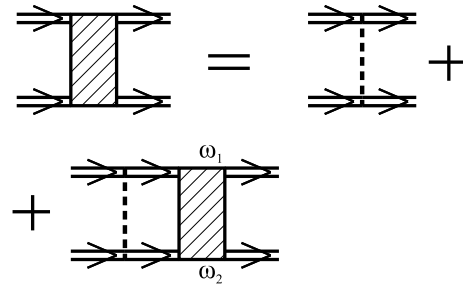


Рис. 1. Графическое уравнение, описывающее диффузионное распространение куперовских пар. Двойная линия соответствует функции Грина (3) проводящих электронов. Пунктир описывает рассеяние на случайном потенциале

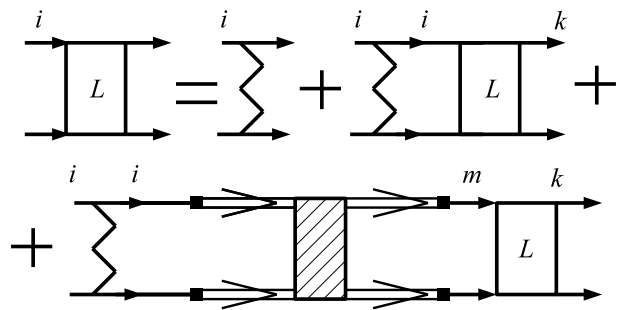


Рис. 2. Графическое уравнение для сверхпроводящей лестницы $L(i, k)$. Одиночные линии соответствуют функциям Грина резонансных узлов (2). Черный квадрат соответствует гибридизации с проводящими состояниями. Зигзагообразные вертикальные линии соответствуют электрон-электронному взаимодействию W на отрицательных U центрах. Распространение между узлами i и m описывается диффузионным пропагатором, показанным на рис. 1

Локальный вклад $\Pi(0)$ построен на функциях Грина (2) резонансных узлов.

В дальнедействующем вкладе, соответствующем последнему слагаемому на рис. 2, можно заменить суммирование по узлам $m \neq i$ на интегрирование по координатам центров \mathbf{r}_k , взвешенным с плотностью резонансных узлов n_R .

Температура сверхпроводящего перехода определяется уравнением

$$1 - W\Pi(0) = Wn_R \int d\mathbf{r} \Pi(\mathbf{r}). \quad (5)$$

Дисперсионное уравнение на температуру перехода (5) при подстановке функций Грина (2) и пропагатора (4) приобретает вид

$$1 - W/W_c = \frac{2Wn_R\gamma^2}{\pi\nu_0} T \sum_{\omega_n} \frac{C(\mathbf{q} = 0, \omega_n, -\omega_n)}{((\omega_n + \gamma \text{sign } \omega_n)^2 + E_R^2)^2}. \quad (6)$$

Здесь

$$W_c^{-1} = T \sum_{\omega_n} \frac{1}{(\omega_n + \gamma \operatorname{sign} \omega_n)^2 + E_R^2}. \quad (7)$$

При $T \ll \gamma, |E_R|$ критическая величина взаимодействия равна $W_c = 2|E_R| \left(1 - \frac{2}{\pi} \arctan \frac{\gamma}{|E_R|}\right)^{-1}$.

Правая часть в уравнении (6) равна

$$W n_R \frac{\gamma^2 \Lambda}{\pi^2 \nu_0} \ln(E_0/T)$$

с логарифмическим обрезанием пропагатора (4) $E_0 \sim \min(\gamma, |E_R|)$. Параметр

$$\Lambda \equiv \frac{1}{(E_R^2 + \gamma^2)^2} \quad (8)$$

соответствует члену $[g(\omega_n)g(-\omega_n)]^2$, взятому в пределе $\omega_n \rightarrow 0$. Он возникает во всех определениях температуры перехода и критических магнитных полей.

Температура сверхпроводящего перехода из уравнения (6) в режиме слабой связи равна

$$T_c = E_0 \exp \left\{ - \frac{\pi^2 \nu_0 (1 - W/W_c)}{\gamma^2 \Lambda W n_R} \right\}. \quad (9)$$

Режим слабой связи соответствует $W/W_c < 1$, когда дисперсионное уравнение (5) выполняется из-за дальнего действия $\Pi(\mathbf{r})$, которое приводит к логарифмическому вкладу в (6). При $W \ll W_c$ выражение (9) соответствует результату, полученному в [14].

Отметим, что для положительных $E_R > \gamma$ режим сильной связи $W \sim W_c = 2E_R$ соответствует условию вырождения состояний с числом частиц 0 и 2 [4].

3. Сильное взаимодействие $W/W_c \geq 1$. В режиме сильной связи дисперсионное уравнение (5) удовлетворяется уже при учете только локального вклада. Этот режим удобно рассматривать в рамках функционала Гинзбурга–Ландау (Г-Л). Разделим функционал на сумму локальных вкладов отдельных резонансных узлов и вкладов, связанных с взаимодействием между ними.

3.1. Локальная часть функционала Г-Л. Локальная часть функционала Г-Л задается суммой по резонансным узлам. После расщепления взаимодействия на изолированных центрах комплексными полями Хаббарда–Стратоновича Δ_i в приближении седловой точки получаем

$$F_{\text{loc}} = \sum_i (W^{-1} - W_c^{-1}) |\Delta_i|^2 + b |\Delta_i|^4. \quad (10)$$

В (10) учитывается минимально необходимое число степеней $|\Delta_i|$. Коэффициент $b > 0$ определяется выражением

$$b = T \sum_{\omega_n > 0} [(\omega_n + \gamma)^2 + E_R^2]^{-2}. \quad (11)$$

W_c и b являются функциями T, E_R и уширения уровня γ . По величине $b^{-1} \sim W_c^3 \sim \max(|E_R|^3, \gamma^3)$.

Подчеркнем, что в режиме сильной связи при $W > W_c$ наличие ненулевого значения Δ не означает наличия сверхпроводимости. Чтобы иметь когерентное состояние, необходимо ненулевое значение корреляционной функции

$$\langle |\Delta_i \Delta_k| \exp i(\phi_i - \phi_k) \rangle \neq 0 \quad (12)$$

при больших $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k|$ для далеких центров. Это условие может быть выполнено при учете нелокальных вкладов в функционал Г-Л.

3.2. Нелокальная часть функционала Г-Л. Нелокальная часть функционала Г-Л определяется андреевскими отражениями в системе с заданным распределением Δ_i . Связь между Δ_i и Δ_k дается диаграммой, изображенной на рис. 3. Ее вклад в функционал Г-Л равняется

$$F(i, k) = -B(i, k) |\Delta_i \Delta_k| \cos \phi_{ik}, \quad (13)$$

где

$$B(i, k) = \frac{8\gamma^2 T}{\pi \nu_0} \sum_{\omega_n > 0} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{ik})}{2\omega_n + Dq^2} \times \frac{1}{[(\omega_n + \gamma)^2 + E_R^2]^2}. \quad (14)$$

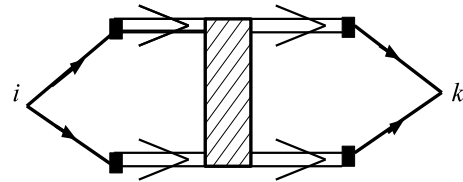


Рис. 3. Андреевское рассеяние между центрами i и k

Первый множитель в (14) определяет степенную зависимость от расстояния. Он происходит от пропагатора (4).

Мы не учитываем четверные нелокальные члены. Не зависящие от фаз члены сводятся к поправкам в нелинейную часть (10), так как $|\Delta_i| = |\Delta_m|$.

Члены типа $\Delta_i \Delta_k^* |\Delta_j|^2$ приводят к затуханию пропагатора (4) в определении (13). При малых концентрациях n_R ими можно пренебречь.

Не учитываются члены, связанные андреевским отражением между разными узлами, $\Delta_i \Delta_k \Delta_j^* \Delta_m^*$. При высоких температурах из-за случайных фазовых множителей соответствующие слагаемые малы. В методе среднего поля они не влияют на температуру перехода в сверхпроводящее состояние.

3.3. *Функционал Г-Л при $W \geq W_c$.* Выражения (10) и (13) определяют функционал Г-Л

$$F = \sum_i \left[\frac{1 - W/W_c}{W} |\Delta_i|^2 + b |\Delta_i|^4 \right] - \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} B(i, k) |\Delta_i \Delta_k| \cos(\phi_{ik}). \quad (15)$$

4. Среднее поле. Вычислим температуру сверхпроводящего перехода методом среднего поля. Заменяем на среднее $\Delta_{i \neq 0} \rightarrow \Theta \equiv \langle \Delta \rangle$. Для $i = 0$ уравнение среднего поля для комплексной функции $\Delta = \theta_1 + i\theta_2$ имеет вид

$$\Theta \equiv \langle \theta_1 + i\theta_2 \rangle = \frac{\int d\theta_1 d\theta_2 \Delta \exp(-F_{MF}(\Theta)/T)}{\int d\theta_1 d\theta_2 \exp(-F_{MF}(\Theta)/T)}, \quad (16)$$

где

$$F_{MF}(\Theta) = \frac{1 - W/W_c}{W} |\Delta|^2 + b |\Delta|^4 - \Theta \theta_1 \sum_{k \neq 0} B(0, k). \quad (17)$$

Уравнение (16) в пределе $\Theta \rightarrow 0$ приводит к уравнению для температуры перехода в когерентное состояние

$$1 = \frac{\langle |\Delta|^2 \rangle}{2T} \sum_{k \neq 0} B(0, k), \quad (18)$$

где множитель $\langle |\Delta|^2 \rangle$ есть среднее с локальным функционалом

$$\langle |\Delta|^2 \rangle = \frac{\int_0^\infty d\rho \rho \exp \left[- \left(\frac{1 - W/W_c}{W} \rho + b\rho^2 \right) / T \right]}{\int_0^\infty d\rho \exp \left[- \left(\frac{1 - W/W_c}{W} \rho + b\rho^2 \right) / T \right]}. \quad (19)$$

Снова как в (5), можно суммирование по центрам заменить интегрированием

$$\sum_{k \neq 0} B(0, k) = \frac{2\gamma^2 \Lambda n_R \ln(E_0/T)}{\pi^2 \nu_0}. \quad (20)$$

Выражения (18), (19) и (20) позволяют определить температуру перехода в когерентное состояние как в режиме слабой, так и сильной связи.

5. Температура перехода в когерентное состояние. В режиме слабой связи $W < W_c$ при вычислении корреляционной функции в (18) можно пренебречь членом $b|\Delta|^4$. В этом случае из (18), (19)

и (20) мы получаем температуру перехода в пределе слабой связи (9).

При сильном притяжении $W > W_c$ термодинамическое среднее $|\Delta|$ имеет ненулевое значение. При $(W - W_c)^2/W_c > T_c$ вкладом флуктуаций в (19) можно пренебречь, так что температура перехода определяется выражением

$$T_c(W) = \frac{(W/W_c - 1) n_R \gamma^2 \Lambda}{Wb} \frac{1}{2\pi^2 \nu_0} \ln |E_0/T_c|. \quad (21)$$

Заметим, что (21) соответствует пределу, рассмотренному в [11 и ссылки там].

В малой окрестности вблизи критического значения притяжения такой, что $T_c > (W - W_c)^2/W_c$ можно пренебречь членом $\sim \rho$ в показателе степени в (19). В этом случае мы получаем температуру перехода из (18)

$$T_c(W \sim W_c) = \left[\frac{n_R \gamma^2 \Lambda}{\pi^2 \nu_0 \sqrt{\pi b}} \ln |E_0/T_c| \right]^2. \quad (22)$$

Это выражение справедливо как для $W < W_c$, так и для $W > W_c$. Отнормированная на значение в критической точке зависимость температуры перехода от величины притяжения изображена на рис. 4.

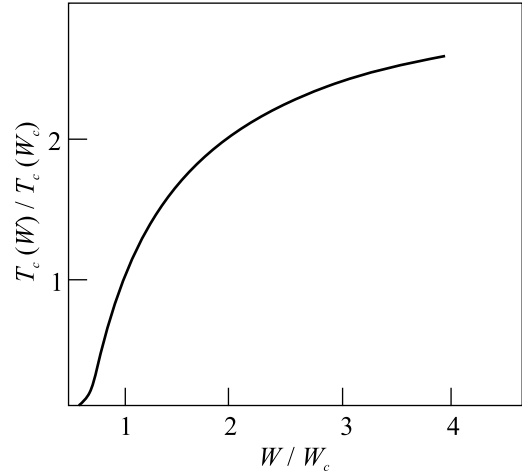


Рис. 4. Зависимость критической температуры от величины притяжения при $\nu_0 W_c / n_R \sim 1$

6. Верхнее критическое магнитное поле. В магнитном поле параметр порядка среднего поля зависит от координаты $\langle \Delta_i \rangle = \Theta_i$. Вместо (18) линейное уравнение самосогласования имеет вид

$$\Theta_i = \frac{\beta \langle |\Delta|^2 \rangle}{2T} \sum_{k \neq i} B(i, k) \Theta_k. \quad (23)$$

После замены суммирования в уравнении (23) интегрированием и разложением параметра порядка в магнитном поле с $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ вблизи \mathbf{r}_i

$$\Theta_k = \Theta(\mathbf{r}_i) + \frac{\mathbf{r}_{ik}^2}{2} \left(\frac{d}{d\mathbf{r}_i} - \frac{2e}{c} i\mathbf{A} \right)^2 \Theta(\mathbf{r}_i) \quad (24)$$

перед градиентным членом возникает комбинация

$$\int d\mathbf{r} r^2 B(\mathbf{r}) = \frac{D\Lambda\gamma^2}{2\pi\nu_0 T_c}. \quad (25)$$

Для определения верхнего критического магнитного поля H_{c2} необходимо выбрать собственное состояние $\Theta(\mathbf{r})$ оператора (24) с наибольшим собственным значением.

В случае слабой связи $W < W_c$ и при температуре вблизи T_c верхнее критическое поле имеет обычное для неупорядоченных сверхпроводников выражение.

При сильном притяжении, когда $W > W_c$ и $\langle |\Delta|^2 \rangle \simeq \langle |\Delta| \rangle^2 = \left| \frac{1-W/W_c}{2bW} \right|$, критическое поле увеличивается на множитель $\ln |E_0/T_c|$

$$\frac{D|e|H_{c2}}{c} = \frac{4}{\pi} (T_c - T) \ln |E_0/T_c|. \quad (26)$$

Подчеркнем, что магнитное поле не влияет на локальное значение Δ_i . Скорее, оно уменьшает эффективные значения джозефсоновской связи между разными резонансными центрами.

7. Выводы. В данной работе мы исследовали сверхпроводящий переход в разбавленной системе отрицательных U центров с сильным электрон-электронным притяжением.

Мы показали, что если притяжение сильнее некоторого критического значения W_c , зависящего от энергии и ширины резонансных уровней, то в системе возникает некогерентное сверхпроводящее состояние. Глобальная сверхпроводимость устанавливается за счет андреевского отражения между резонансным уровнем при более низкой температуре. Этот режим напоминает переход из состояния БКШ в жидкость составных бозе-частиц.

Результаты не меняются при смене знака E_R . Поэтому они справедливы не только для центров с вырождением по числу электронов при малых $|2E_R - W| \ll E_R$, но и для системы узлов с отрицательными E_R при $|2E_R + W| \ll |E_R|$.

Автор благодарен А. Л. Шеланкову, В. Зюзину и А. Зюзину за интересные дискуссии.

1. I. A. Chernik and S. N. Lykov, *Sov. Phys. Solid State* **23**, 817 (1981).
2. V. I. Kaidanov and Yu. I. Ravich, *Sov. Phys.-Uspekhi* **28**, 31 (1985).
3. S. A. Nемов and Y. I. Ravich, *Sov. Phys.-Uspekhi* **41**, 735 (1998).
4. C. M. Varma, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2713 (1988).
5. N. Haldolaarachchige, Q. Gibson, W. Xie, M. B. Nielsen, S. Kushwaha, and R. J. Cava, *Phys. Rev. B* **93**, 024520 (2016).
6. P. Girado-Gallo, P. Walmsley, B. Sangiorgio, S. C. Riggs, R. D. McDonald, L. Buchauer, B. Fauque, C. Liu, N. A. Spaldin, A. Kaminski, K. Behnia, and I. R. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 207001 (2018).
7. P. Nozières and S. Schmitt-Rink, *J. Low Temp. Phys.* **59**, 195 (1985).
8. C. A. R. Sá de Melo, M. Randeria, and J. R. Engelbrecht, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3202 (1993).
9. R. Micnas, J. Ranninger, and S. Robaszkiewicz, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 113 (1990).
10. G. E. Volovik, *Письма в ЖЭТФ* **107**, 537 (2018).
11. A. G. Mal'shukov, *Solid State Commun.* **77**, 57 (1991).
12. A. A. Abrikosov, L. P. Gor'kov, and I. E. Dzyaloshinskii, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*, Dover, N.Y. (1963).
13. Н. А. Кулеева, Э. З. Кучинский, М. В. Садовский, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 603 (2020).
14. A. L. Shelankov, *Solid State Commun.* **62**, 327 (1987).

Синтез эпитаксиальных структур, содержащих двумерные слои Si, встроенные в диэлектрическую матрицу CaF₂¹⁾

В. А. Зиновьев⁺²⁾, А. Ф. Зиновьева^{+*}, В. А. Володин^{+*}, А. К. Гутаковский⁺, А. С. Дерябин⁺, А. Ю. Крупин[×],
Л. В. Кулик[°], В. Д. Живулько[∇], А. В. Мудрый[∇], А. В. Двуреченский^{+*}

⁺Институт физики полупроводников Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

^{*}Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

[×]Новосибирский технический государственный университет, 630073 Новосибирск, Россия

[°]Институт химической кинетики и горения Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

[∇]ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», 220072 Минск, Республика Беларусь

Поступила в редакцию 8 августа 2022 г.

После переработки 22 сентября 2022 г.

Принята к публикации 22 сентября 2022 г.

Проведено исследование возможности создания двумерных слоев Si на поверхности пленки CaF₂/Si(111) методом молекулярной лучевой эпитаксии. Найдены ростовые условия, при которых происходит формирование участков двумерных слоев Si. Исследования методами спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС), просвечивающей электронной микроскопии, фотолюминесценции и электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) продемонстрировали, что для эпитаксиальных структур, полученных осаждением от одного до трех биатомных слоев Si на поверхность пленки CaF₂/Si(111) при температуре 550 °С, имеет место формирование участков двумерных слоев Si. В спектрах КРС от указанных структур обнаружен узкий пик при 418 см⁻¹, который обусловлен рассеянием света на колебаниях Si атомов в плоскости двумерного слоя Si, интеркалированного кальцием. В ЭПР-спектрах многослойных структур с участками двумерных слоев Si, встроенных в CaF₂, при подсветке наблюдался изотропный сигнал с асимметричной дайсоновской формой, с $g = 1.9992$, что позволяет отнести этот сигнал к фотоиндуцированным электронам проводимости в протяженных двумерных островках Si. Полученные результаты могут быть полезны для понимания механизмов формирования двумерных материалов на подложках CaF₂/Si(111).

DOI: 10.31857/S1234567822210078, EDN: ltheawe

В настоящее время во всем мире наблюдается повышенный интерес к двумерным материалам, обладающими уникальными электронными и структурными свойствами, принципиально отличными от свойств объемных материалов, из которых они создаются [1, 2]. Наличие этих свойств открывает новые возможности для создания приборных структур, работающих на новых физических принципах, что позволит существенно расширить возможности современной микро- и нанoeлектроники. Двумерные материалы – это структуры толщиной от одного до нескольких атомных слоев. Основным представителем таких материалов является графен. Однако, существует ряд ограничений, препятствующих внедрению графена в нанoeлектронику. Ключевым из них

является отсутствие запрещенной зоны. В настоящее время является актуальным поиск нового, графеноподобного двумерного материала с наличием запрещенной зоны и возможностью получения его в промышленных масштабах. В качестве наиболее перспективных рассматриваются двумерные графеноподобные материалы IV группы на основе кремния (силицен) и германия (германен), и их твердых растворов [2, 3]. Имеющиеся в настоящее время данные свидетельствуют о том, что силицен и германен имеют ширину запрещенной зоны, близкую к нулю [4]. Однако в ряде работ [5, 6] было показано, что переход от монослойного силицена к двуслойному (би-силицену) должен приводить к появлению запрещенной зоны ~1 эВ, что делает этот материал перспективным для различных оптических приложений. В настоящее время наиболее удачные попытки синтеза двумерных материалов на основе Si,

¹⁾См. дополнительный материал к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru.

²⁾e-mail: zinoviev@isp.nsc.ru

Ge были реализованы на атомарно-чистых подложках из благородных металлов. В случае силицена обычно используют подложки серебра (Ag(111)) [7], а в случае германена подложки золота или платины (Au(111) [8], Pt(111) [9]). С точки зрения дальнейшего практического использования двумерных материалов в качестве активных составляющих приборов желателно получать эти материалы на диэлектрических подложках [2, 10]. Недавно в теоретической работе [11] было показано, что силицен должен быть стабилен на диэлектрическом слое $\text{CaF}_2(111)$. Постоянные решетки указанных материалов практически совпадают (различие составляет всего 0.5%), и силицен на $\text{CaF}_2(111)$ сохраняет дираковский конус в законе дисперсии электронов с появлением небольшой запрещенной зоны около 50 мэВ. Такие предпосылки делают актуальным поиск способов получения силицена на подложках $\text{CaF}_2(111)$. Одним из перспективных методов создания двумерных структур является молекулярно-лучевая эпитаксия (МЛЭ). Существует ряд работ по росту кремния методом МЛЭ на поверхности $\text{CaF}_2(111)$ [12–14]. Основной проблемой этого направления является неудачное соотношение поверхностных энергий кремния и фторида кальция. Первая примерно в три раза больше, чем вторая [13]. Это приводит к тому, что осаждаемый кремний собирается в трехмерные островки на поверхности $\text{CaF}_2(111)$. Для решения этой проблемы было предложено несколько подходов. Один из них состоит в использовании электронного облучения [12] для перевода поверхности CaF_2 в Са-обогащенное состояние, имеющее более высокое значение поверхностной энергии. Второй подход заключается в применении сурфактантов для понижения поверхностной энергии кремния [13]. Третий подход состоит в использовании высоких температур, что также приводит к переходу поверхности в Са-обогащенное состояние [14]. Однако, в данных работах не уделялось должного внимания начальной стадии роста кремния на $\text{CaF}_2(111)$, исследование которой может дать ключевую информацию для разработки подхода к получению силицена (или би-силицена) на поверхности $\text{CaF}_2(111)$.

В данной работе были проведены исследования возможности формирования двумерных слоев Si, встроенных в диэлектрическую матрицу CaF_2 методом МЛЭ. На основе анализа полученных в работе данных подтверждено формирование участков двумерных слоев Si.

Синтез структур проводился методом МЛЭ на подложках Si(111) при температуре 550 °С. Выбор температуры синтеза основывался на результатах

работы [15], где был найден диапазон температур, оптимальных для получения планарной поверхности пленок $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$, имеющих толщину порядка 10 нм. Для меньших толщин пленок $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$ условия получения планарных пленок могут быть другими (см. работу [16]). На первом этапе проводился эпитаксиальный рост пленки CaF_2 , толщина пленки варьировалась от 10 до 120 нм для разных структур. На втором этапе на поверхность пленки CaF_2 последовательно осаждались тонкие слои Si. Количество кремния, осаждаемого при формировании двумерных слоев, варьировалось от 1 атомного бислоя (БС, $d \approx 0.3$ нм) до 3 БС для разных структур. При выбранной температуре подложки десорбцией Si с поверхности CaF_2 нельзя пренебречь [13, 17], поэтому точное значение толщины Si слоя могло отличаться от планируемой. Было выращено два типа структур: с девятью слоями Si и с одним слоем Si. Слои Si разделялись прослойками CaF_2 толщиной либо 6 нм, либо 2 нм в зависимости от номера структуры (см. табл. 1). На третьем этапе созданные структуры закрывались защитным слоем CaF_2 толщиной 3 нм.

Таблица 1. Параметры экспериментальных структур

#	Толщина буфера CaF_2	Толщина осажденного Si	Количество Si слоев	Толщина прослойка CaF_2
1	70 нм	3 БС	9	6 нм
2	70 нм	2 БС	9	6 нм
3	20 нм	1 БС	9	6 нм
4	10 нм	1 БС	9	2 нм
5	120 нм	1 БС	1	-
6	40 нм	-	-	-

Созданные структуры были исследованы методами спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС), просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), фотолюминесценции (ФЛ) и электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Описание экспериментальных методик дано в дополнительном материале к статье.

На рисунке 1а, б показано ПЭМ изображения бокового сечения многослойной структуры 3 (описание в табл. 1). Хорошо видны плоскости нарушения эпитаксиального роста слоев CaF_2 , период расположения которых совпадает с периодом осаждения слоев кремния (рис. 1б). В определенных местах наблюдаются “переходы” с одного плоского участка на другой, что, видимо, связано с образованием ступеней на поверхности растущей пленки CaF_2 . Эти ступени могут быть обусловлены введением дислокаций, ко-

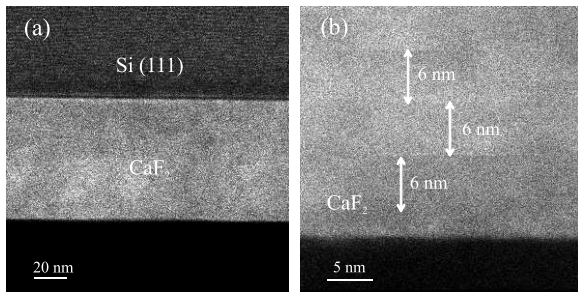


Рис. 1. (а) – ПЭМ – изображения бокового сечения многослойной структуры, представляющей собой слой CaF_2 толщиной 20 нм на $\text{Si}(111)$ подложке, на который последовательно осаждалось 9 слоев Si толщиной 1 БС, разделенных прослойками CaF_2 толщиной 6 нм. (б) – ПЭМ – изображения той же структуры, но в увеличенном масштабе. Температура формирования структуры составляла 550°C

которые образуются при росте CaF_2 в процессе пластической релаксации деформаций из-за несоответствия между решетками CaF_2 и Si ($\approx 1.2\%$ при 550°C). Такое несоответствие появляется из-за разницы коэффициентов теплового расширения Si и CaF_2 [18, 19]. Оценка критической толщины для введения дислокаций согласно модели энергетического баланса Пипла–Бина [20, 21] дает значение ≈ 67 нм. Действительно, согласно исследованиям методом АСМ для образцов с толщиной эпитаксиального слоя более 60 нм (рис. 2б), на поверхности наблюдается сетка из

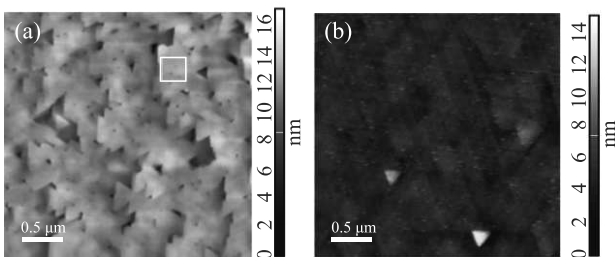


Рис. 2. (Цветной онлайн) АСМ – сканы поверхности структур различной толщины: (а) – структуры 4 толщиной 29 нм; (б) – структуры 5 толщиной 123 нм (параметры структур см. в табл. 1). Среднеквадратичная шероховатость поверхности составляет 1.24 нм для структуры 4 и 0.89 нм для структуры 5. На плоском участке поверхности размером 300×300 нм, выделенном белым квадратом (панель (а)) среднеквадратичная шероховатость составляет 0.32 нм

ступеней, образующихся из-за введения дислокаций вследствие процессов пластической релаксации. В то время как для образцов с меньшей толщиной эпитаксиального слоя на поверхности присутствуют только

ростовые ступени (рис. 2а), разделенные достаточно широкими планарными террасами со среднеквадратичной шероховатостью, не превышающей 0.4 нм.

Спектроскопия КРС использовалась как один из основных методов для определения присутствия в образцах двумерных слоев кремния. Результаты исследований методом КРС продемонстрировали, что в выбранных условиях синтеза структур происходит формирование двумерных слоев кремния (или их участков), встроенных в диэлектрическую матрицу CaF_2 . В спектрах КРС от структур с Si слоями обнаружен узкий пик при 418 см^{-1} (рис. 3, кривые 1, 2, 3, 5). Положение этого пика совпадает с поло-

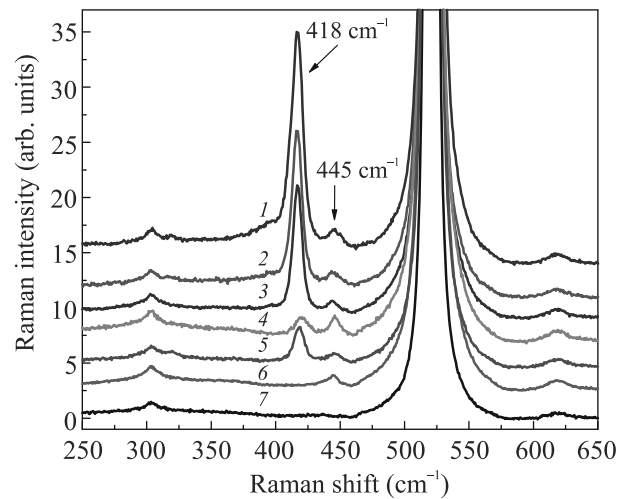


Рис. 3. (Цветной онлайн) Спектры КРС от многослойных структур с 9 слоями Si толщиной: 1 БС (кривые 3 и 4), 2 БС (кривая 2) и 3 БС (кривая 1), встроенными в CaF_2 . Спектр от структуры с одним слоем Si толщиной 1 БС (кривая 5). Для сравнения на рисунке приведены спектры КРС от исходной подложки $\text{Si}(111)$ (кривая 7) и пленки CaF_2 (кривая 6) толщиной 40 нм, выращенной на подложке $\text{Si}(111)$ при температуре 550°C . Номера кривых соответствуют номерам структур, указанных в табл. 1

жением одного из трех пиков в спектрах КРС (при 418 , 388 и 346 см^{-1}), характерных для кристаллических слоев CaSi_2 [22–24]. Кристаллическая решетка объемного CaSi_2 включает в себя двумерные слои Si , интеркалированные кальцием [25, 26]. Согласно теоретическому рассмотрению в работе [26], наблюдаемый пик при 418 см^{-1} можно связать с колебаниями Si атомов в плоскости двумерных слоев кремния, интеркалированных кальцием (мода колебаний $E_g(\text{Si})$). Небольшое несоответствие с теоретическим значением 413 см^{-1} , полученным в работе [26] для объемного CaSi_2 , может быть связано с наличием деформаций в экспериментальной структуре или размерным эф-

фектом [23]. Пики при 388 и 346 см^{-1} , соответствующие колебаниям атомов Si вне плоскости двумерных слоев кремния, для наших структур не наблюдаются.

Из сравнения спектров КРС (рис. 3) от структур 3 и 5, для которых Si слои формировались при осаждении 1 БС кремния на CaF_2 , получено, что интенсивность узкого пика при 418 см^{-1} для многослойной структуры 3 с 9-ю слоями кремния примерно в 4 раза превышает интенсивность пика для структуры 5 с одним Si слоем. Из простых соображений можно было ожидать 9-кратного увеличения сигнала КРС, однако эффект оказался слабее. Этот результат указывает на то, что количество кремния, приходящегося на один двумерный слой, в многослойной структуре 3 оказывается меньше, чем в структуре 5. Мы связываем это с меньшим количеством ступеней на поверхности многослойной структуры. Согласно литературным данным в многослойных гетероструктурах введение дислокаций просходит при больших толщинах пленки, чем в однослойных, из-за перераспределения и компенсации деформации в слоях структуры [27, 28]. Кроме того, суммарная толщина структуры 3 меньше, чем структуры 5 (см. табл. 1), поэтому степень пластической релаксации у структуры 3 меньше. Можно предположить, что зарождение двумерных островков кремния происходит именно на ступенях, где появляются свободные от фтора атомы кальция, к которым и прикрепляются атомы кремния.

В пользу данного предположения свидетельствует сравнение спектров КРС от многослойной структуры 4 и однослойной структуры 5. Структура 4 имеет толщину, не превышающую критическую для введения дислокаций, и интенсивность сигнала КРС для нее оказывается меньше, чем для структуры 5 с одним Si слоем, но имеющей толщину больше критической. Для пластически релаксированной структуры 5 плотность ступеней больше (рис. 2b), чем для нерелаксированной структуры 4 (рис. 2a), и соответственно, сигнал КРС от двумерного Si для структуры 5 более интенсивный.

Для нерелаксированной структуры 4 обнаружен сдвиг пика КРС на 2 см^{-1} , что можно связать с наличием упругих деформаций в выращенной пленке (рис. 3, кривая 4). Положение пика в этом случае составляет 420 см^{-1} .

При увеличении количества кремния, идущего на формирование двумерных слоев с 1-го до 3-х БС (структуры 1, 2, 3), наблюдается небольшое возрастание интенсивности сигнала КРС при 418 см^{-1} , составляющее в случае структуры с 3-мя БС примерно 25% (рис. 3). Кроме этого, для структуры с 3-мя

БС наблюдается появление небольшого плеча у пика КРС при 418 см^{-1} со стороны меньших энергий (рис. 3, кривая 1), что может свидетельствовать о начале процесса нарушения планарности Si слоев при таком количестве осажденного материала.

Во всех спектрах КРС сформированных структур обнаружен еще один пик при 445 см^{-1} , который, как мы предполагаем, связан с формированием дополнительной структурной фазы на границе раздела между слоем CaF_2 и подложкой Si(111). В пользу этого свидетельствует тот факт, что данный пик наблюдается так же в спектрах КРС от структур с пленками CaF_2 (без встроенных тонких слоев Si), выращенными на подложках Si(111) (рис. 3, кривая б).

В спектрах ЭПР многослойных структур 1 и 2 (см. табл. 1) наблюдался изотропный сигнал ЭПР с $g = 1.9992$ и шириной линии $\Delta H \approx 0.7\text{ Гс}$. Сигнал проявлялся при подсветке белым светом (рис. 4) в температурном диапазоне $4.5\text{--}20\text{ К}$. При повыше-

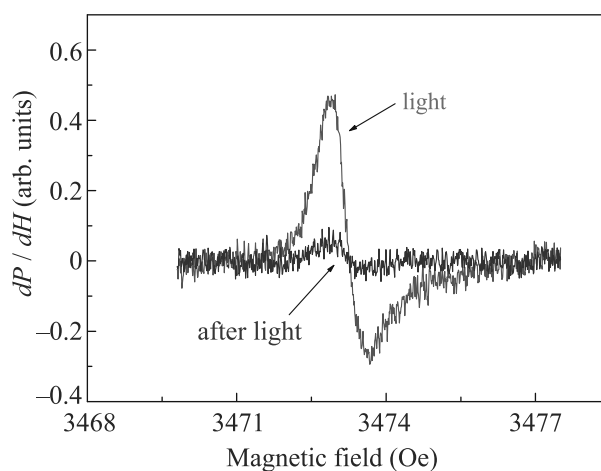


Рис. 4. (Цветной онлайн) ЭПР спектры от структуры 2 (см. табл. 1), измеренные при подсветке белым светом (красная линия) и в темноте, после выключения света (синяя линия). Магнитное поле приложено вдоль направления [111]. Мощность микроволнового излучения $P = 0.063\text{ мВт}$, $T = 6\text{ К}$

нии температуры интенсивность сигнала падала и после 20 К сигнал исчезал. Интересным результатом является эффект последействия. При достаточно низких температурах $< 10\text{ К}$, после выключения света сигнал проявлялся в спектре, однако его величина падала в несколько раз. Сигнал имел асимметричную дайсоновскую форму, что вместе со значением g -фактора позволяет предложить, что этот сигнал принадлежит фотоиндуцированным электронам проводимости в Si слоях. Наблюдаемый эффект последействия может быть объяснен пространствен-

ным разделением электронов и дырок в исследуемой гетеросистеме, что приводит к замедлению процесса рекомбинации. Однако этот вопрос требует дополнительных исследований. Сопоставление результатов ЭПР с микроскопическими исследованиями позволяет сделать вывод, что сигнал происходит от протяженных двумерных островков кремния, сформировавшихся в исследуемых структурах. Формирование сплошных планарных двумерных слоев кремния не подтверждается. При образовании сплошных непрерывных двумерных слоев кремния должен был наблюдаться более узкий ЭПР сигнал с шириной ЭПР – линии порядка 0.1–0.2 Гс и меньше. Изотропность сигнала свидетельствует об отсутствии дополнительных механизмов спиновой релаксации (изотропность ширины ЭПР – линии), связанных с асимметрией квантовых ям относительно плоскости роста (за счет взаимодействия Бычкова–Рашбы). Для структур, полученных осаждением 1 БС Si (структуры 3, 4, 5, см. табл. 1) вышеописанный сигнал ЭПР не наблюдался, что может быть объяснено недостаточной чувствительностью метода при малых количествах осажденного кремния. Следует отметить, что все образцы, на которых наблюдался сигнал ЭПР, согласно данным АСМ исследований, имеют характерную сетку ступеней на поверхности, что указывает на связь между присутствием ступеней на поверхности и наличием протяженных двумерных островков кремния, которые дают сигнал ЭПР при подсветке.

На основании сопоставления результатов КРС, ЭПР и микроскопических исследований можно сделать предположение, что рост Si слоев происходит преимущественно от ступеней на поверхности CaF₂. На краю ступеней на поверхность выходят атомы кальция, с которыми могут связаться атомы кремния. Чем больше ступеней, тем более вероятно зарождение и дальнейший рост двумерного слоя кремния. С этим предположением согласуется возрастание интенсивности сигнала КРС при 418 см⁻¹ для структур с более толстыми слоями CaF₂. Здесь плотность ступеней намного больше и, соответственно, вероятность зарождения двумерных слоев Si выше.

Дополнительным свидетельством в пользу формирования участков двумерных Si слоев являются результаты исследования методом фотолюминесценции. На рисунке 5 показан спектр ФЛ от структуры 4, на котором хорошо видны два широких пика P2 при ≈ 480 нм (2.6 эВ) и P1 при ≈ 685 нм (1.8 эВ). Первый пик мы относим к дефектам в CaF₂ [29], а второй можно связать с участками двумерных Si слоев. Согласно литературным данным для би-силицена

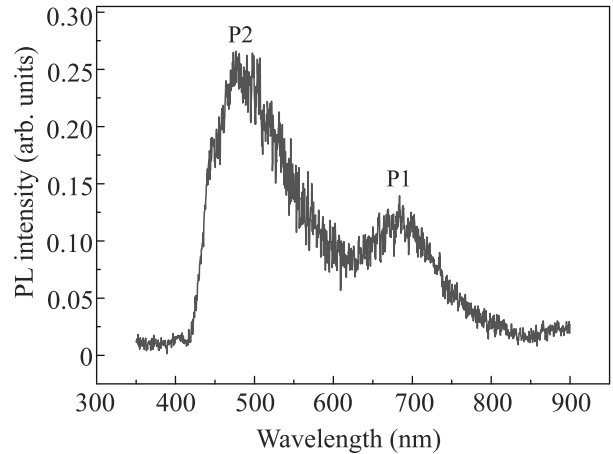


Рис. 5. (Цветной онлайн) Спектр ФЛ от структуры 4 (см. табл. 1), измеренный при 78 К. Для возбуждения люминесценции использовался диодный лазерный модуль, работающий на длине волны 405 нм

в этом спектральном диапазоне должны наблюдаться оптические переходы. В работе [5] было показано, что двухслойный силицен является непрямозонным материалом с шириной запрещенной зоны 1.08 эВ. При пассивации би-силицена фтором (например, при встраивании в CaF₂) ширина запрещенной зоны увеличивается до 1.78 эВ, что как раз соответствует наблюдаемому пику P1.

Таким образом, в данной работе была продемонстрирована возможность формирования участков двумерных слоев кремния на CaF₂ методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Полученные результаты могут быть использованы в дальнейшем для разработки подходов к получению двумерных материалов на основе кремния.

Работа поддержана грантом Министерства науки и высшего образования РФ #075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).

Авторы выражают благодарность ЦКП “ВТАН” НГУ и ЦКП “Наноструктуры” ИФП СО РАН за предоставление измерительного оборудования.

1. S. Z. Butler, S. M. Hollen, L. Cao et al. (Collaboration), ACS Nano **7**, 2898 (2013).
2. M. Galbiati, N. Motta, M. De Crescenzi, and L. Camilli, Appl. Phys. Lett. **6**, 041310 (2019).
3. G. Vogg, A. J.-P. Meyer, C. Miesner, M. S. Brandt, and M. Stutzmann, Appl. Phys. Lett. **78**, 3956 (2001).
4. Z. Ni, Q. Liu, K. Tang, J. Zheng, J. Zhou, R. Qin, Z. Gao, D. Yu, and J. Lu, Nano Lett. **12**, 113 (2012).
5. R. Yaokawa, T. Ohsuna, T. Morishita, Y. Hayasaka, M. J. S. Spencer, and H. Nakano, Nat. Commun. **7**, 10657 (2016).

6. X. Wang and Z. Wu, *Phys. Chem. Phys.* **19**, 2148 (2017).
7. J. Sone, T. Yamagami, Y. Aoki, K. Nakatsuji, and H. Hirayama, *New J. Phys.* **16**, 095004 (2014).
8. M. E. Davila, L. Xian, S. Cahangirov, A. Rubio, and G. L. Lay, *New J. Phys.* **16**, 095002 (2014).
9. L. Li, S. Lu, J. Pan, Z. Qin, Y. Wang, Y. Wang, G. Cao, S. Du, and H. Gao, *Adv. Mater.* **26**, 4820 (2014).
10. Yu. Yu. Illarionov, A. G. Banskchikov, D. K. Polyushkin, S. Wachter, T. Knobloch, M. Thesberg, L. Mennel, M. Paur, M. Stöger-Pollach, A. Steiger-Thirsfeld, M. I. Vexler, M. Wautl, N. S. Sokolov, T. Mueller, and T. Grasser, *Nat. Electron.* **2**, 230 (2019).
11. S. Kokott, P. Pflugradt, L. Matthes, and F. Bechstedt, *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 185002 (2014).
12. P. O. Pettersson, R. J. Miles, and T. C. McGill, *J. Appl. Phys.* **76**, 7328 (1994).
13. C. R. Wang, B. H. Muller, E. Bugiel, and K. R. Hofmann, *Appl. Surf. Sci.* **211**, 203 (2003).
14. A. Klust, M. Grimsehl, and J. Wollschlager, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 4483 (2003).
15. J. Suela, E. Abramof, P. H. O. Rappl, F. E. Freitas, H. Closs, and C. Boschetti, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **44**, 185405 (2011).
16. Yu. Yu. Illarionov, M. I. Vexler, V. V. Fedorov, S. M. Suturin, and N. S. Sokolov, *J. Appl. Phys.* **115**, 223706 (2014).
17. A. P. Taylor, B. M. Kim, P. D. Persans, and L. J. Schowalter, *MRS Online Proceedings Library* **298**, 103 (1993).
18. Y. Okada and Y. Tokumaru, *J. Appl. Phys.* **56**, 314 (1984).
19. R. B. Roberts and G. K. White, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **19**, 7167 (1986).
20. R. People and J. C. Bean, *Appl. Phys. Lett.* **47**, 322 (1985).
21. R. People and J. C. Bean, *Appl. Phys. Lett.* **49**, 229 (1986).
22. A. V. Kacyuba, A. V. Dvurechenskii, G. N. Kamaev, V. A. Volodin, and A. Y. Krupin, *Mater. Lett.* **268**, 127554 (2020).
23. A. Kacyuba, A. Dvurechenskii, G. Kamaev, V. Volodin, and A. Krupin, *J. Cryst. Growth* **562**, 126080 (2021).
24. A. V. Dvurechenskii, A. V. Kacyuba, G. N. Kamaev, V. A. Volodin, and Zh. V. Smagina, *Nanomaterials* **12**, 1407 (2022).
25. G. Vogg, M. S. Brandt, M. Stutzmann, and M. Albrecht, *J. Cryst. Growth* **203**, 570 (1999).
26. S. M. Castillo, Z. Tang, A. P. Litvinchuk, and A. M. Guloy, *Inorg. Chem.* **55**, 10203 (2016).
27. J. W. Matthews and A. E. Blakeslee, *J. Cryst. Growth* **27**, 118 (1974).
28. S. M. Hu, *J. Appl. Phys.* **69**, 7901 (1991).
29. N. Salah, N. D. Alharbi, S. S. Habib, and S. P. Lochab, *Journal of Nanomaterials* **2015**, 136402 (2015).

Theoretical modeling of high spin to low spin transition and structural stability under pressure in CaFeO_3

A. O. Shorikov¹⁾

M. N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 620108 Yekaterinburg, Russia

Department of Theoretical Physics and Applied Mathematics, Ural Federal University, 620002 Yekaterinburg, Russia

Submitted 7 September 2022
Resubmitted 22 September 2022
Accepted 22 September 2022

DOI: 10.31857/S123456782221008X, EDN: lhjogt

Compounds with a perovskite structure have been intensively investigated during the last decades due to the variety of electronic and magnetic properties and the great interest in their practical applications [1–7]. CaFeO_3 is of a special interest due to unusual valence of iron ions Fe^{4+} which is in a high spin (HS) state at ambient pressure with electronic configuration $t_{2g}^3 e_g^1$. Since the double degenerate e_g subshell is occupied by one electron, the instability known as the Jahn–Teller effect could arise. It is energetically favorable to lift the degeneracy by distorting the octahedron around the transition metal. Another way for lifting the degeneracy and minimizing the total energy is charge ordering or charge disproportionation (CD) which is observed in the CaFeO_3 in the low temperature phase.

CaFeO_3 has a perovskite-like structure consisting of corners-shared octahedrons FeO_6 and Ca ions in the spaces of this 3D structure. The structure of CaFeO_3 is distorted by the tilt of the octahedrons, leading to orthorhombic or monoclinic symmetry. Takeda et al. showed that at room temperature CaFeO_3 has $Pnma$ space group with the average Fe–O bond length 1.91870(6) Å. With decreasing temperature the CD state occurs at $T_{CD} \approx 290$ K, that leads to a phase transition to the monoclinic structure with $P2_1/n$ space group and with two inequivalent FeO_6 octahedrons [1]. The average Fe–O bond length for the small octahedron is 1.87244(6) Å, and 1.97317(6) Å for the larger one.

At ambient pressure and temperature above 290 K CaFeO_3 is paramagnetic without CD and all iron ions are equivalent and have Fe^{4+} valence. With decreasing temperature the CD state with Fe^{3+} and Fe^{5+} ions is observed below 290 K, but CaFeO_3 remains paramagnetic until the CD AFM phase occurs at $T_N = 115$ K.

The GGA + U calculations were performed using the pseudopotential method implemented in the Quan-

tum ESPRESSO package [8]. We use the exchange-correlation potential in the form proposed by Perdew, Burke, and Ernzerhof [9]. A similar approach was previously successfully applied for modeling structural transition and for description of the evolution of magnetic properties in correlated materials under pressure [10]. To take into account the correlation effects, $U = 4.5$ eV and $J = 0.95$ eV were applied to the Fe d -shell.

We consider three magnetic orders, namely AFM-A, AFM-C, and AFM-G for both structures: $Pnma$ and $P2_1/n$. For each magnetic order full structure optimization was performed. The AFM-A ordering has the lowest total energy for both structures, which agrees with experimental data for the monoclinic structure. One can see that the AFM-A ordering is persistent against the structural transition and its traces could be observed in the $Pnma$ structure at high pressure. Optimization of the crystal structures in the framework of the GGA + U method shows that both structures are stable at ambient pressure. The monoclinic structure $P2_1/n$ has a total energy 0.029 eV lower than the orthorhombic $Pnma$ structure in agreement with the experimental phase diagram.

A series of calculations with full relaxation of the crystal structure was performed for various external pressures (cell volumes). The unit cell parameters obtained in the GGA + U calculation are in a good agreement with the experimental data [1]. If the shape of the unit cell was not preserved during relaxation of the crystal structure, the orthorhombic phase keeps the symmetry below 30 GPa only. At higher pressures FeO_6 octahedrons become non-equivalent indicating that the monoclinic structure might be favorable. The length of the Fe–O bonds at various pressures obtained in GGA + U is shown in Fig. 1. One can see that the bond length is tending to the values obtained for monoclinic phase, which gives two metastable structures with non-equivalent octahedrons. However, high pres-

¹⁾e-mail: shorikov@imp.uran.ru

sure XRD shows that orthorhombic structure is stable above 30 GPa at room temperature [2]. This result can indicate that the transition is entropy driven and proper accounting of phonon entropy and temperature is necessary. Similar results were obtained for transition under pressure in FeS [11]. It was shown recently, that transition from $P2_1/n$ to $Pnma$ structure under pressure could be reproduced in the framework of DFT + DMFT method [12] at finite temperature without full relaxation of atomic positions but with accurate accounting for many body correlation effects, which underscores the importance of the temperature effects.

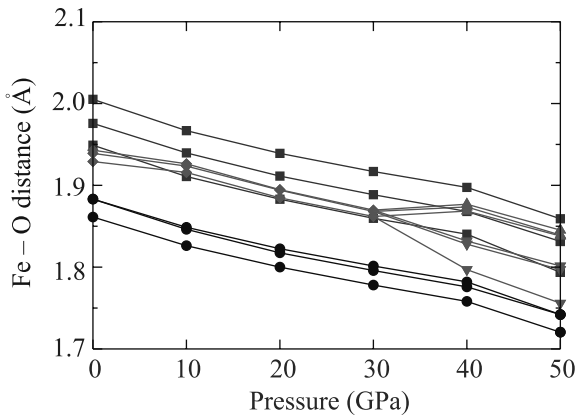


Fig. 1. (Color online) Dependence of Fe-O bond length from pressure for orthorhombic (red and green lines) and monoclinic (black and blue lines) structures obtained in GGA + U calculations

Spin transition pressure ≈ 35 GPa obtained in GGA + U is close to the experimental value of 30 GPa at room temperature. At pressures lower than 30 GPa, the LS solution was unstable and only HS was obtained. In the pressure range 30–40 GPa the value of magnetic moment decreases from $3.18\mu_B$ to $1.6\mu_B$ which indicates the spin transition. This agrees well with the experimentally observed HS state in CaFeO_3 at ambient pressure [2]. Calculations made for $P2_1/n$ show similar magnetic collapse with decreasing magnetic moments from $3.55\mu_B$ for Fe(1) and $2.7\mu_B$ for Fe(2) to $1.52\mu_B$ and $1.47\mu_B$, correspondingly.

In the present work, magnetic and spectral properties of CaFeO_3 $Pnma$ and $P2_1/n$ phases under pressure were investigated in framework of GGA + U method. A-type AFM was found energetically favorable for both structures that agrees with experimental data for monoclinic phase below 127 K [13]. With increasing pressure and decreasing Fe-O distance, hybridization increases,

leading to the HS-to-LS transition at ≈ 35 GPa. However, the structural phase transition cannot be reproduced in the framework of the GGA + U method. The explanation of this could be the following: the ground state energy calculated in DFT + U assumes $T = 0$ K, whereas the impact of temperature and vibrational entropy [11] could be important for a proper description of the phase transition under pressure in CaFeO_3 .

Calculations were carried out within the state assignment of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme “Electron” # 122021000039-4) and supported by the Russian Foundation for Basic Research (RFBR): grant # 20-42-660027.

This is an excerpt of the article “Theoretical modeling of high spin to low spin transition and structural stability under pressure in CaFeO_3 ”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022601993

1. P. M. Woodward, D. E. Cox, E. Moschopoulou, and S. Morimoto, Phys. Rev. B **62**, 844 (2000).
2. M. Takano, S. Nasu, T. Abe, K. Yamamoto, S. Endo, Y. Takeda, and J. B. Goodenough, Phys. Rev. Lett. **67**(23), 3267 (1991).
3. S. Morimoto, T. Yamanaka, and M. Tanaka, Physica B: Condensed Matter **237–238**, 66 (1997).
4. T. Takeda, R. Kanno, Y. Kawamoto, M. Takano, S. Kawasaki, T. Kamiyama, and F. Izumi, Solid State Sciences **2**, 673 (2000).
5. J. B. Yang, M. S. Kim, Q. Cai, X. D. Zhou, H. U. Anderson, W. J. James, and W. B. Yelon, J. Appl. Phys. **97**, 8 (2005).
6. T. Kawakami, S. Nasu, T. Sasaki, S. Morimoto, S. Endo, S. Kawasaki, and M. Takano, J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 1491 (2001).
7. A. Sadoc, C. de Graaf, and R. Broer, Phys. Rev. B **75**, 165116 (2007).
8. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini et al. (Collaboration), J. Phys. Condens. Matter **21**, 395502 (2009).
9. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
10. D. Y. Novoselov, D. M. Korotin, A. O. Shorikov, A. R. Oganov, and V. I. Anisimov, JETP Lett. **109**, 387 (2019).
11. A. O. Shorikov, V. V. Roizen, A. R. Oganov, and V. I. Anisimov, Phys. Rev. B **98**, 094112 (2018).
12. I. Leonov, Phys. Rev. B **105**, 035157 (2022).
13. A. Cammarata and J. M. Rondinelli, Phys. Rev. B **86**, 195144 (2012).

Диаграммы Ванье для полупроводникового искусственного графена

О. А. Ткаченко⁺¹⁾, В. А. Ткаченко^{+*}, Д. Г. Бакшеев^{*}, О. П. Сушков[×]

⁺Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

^{*}Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

[×]University of New South Wales, 2052 Sydney, Australia

Поступила в редакцию 19 сентября 2022 г.

После переработки 19 сентября 2022 г.

Принята к публикации 21 сентября 2022 г.

Промоделирован квантовый транспорт в полупроводниковых гексагональных решетках антиточек с периодом 80 нм и коротковолновым беспорядком. Вычислены карты плотности состояний DoS как функции от напряженности магнитного поля B и концентрации электронов n (диаграммы Ванье) для нескольких амплитуд модуляции потенциала, сравнимых или существенно больше энергии Ферми. Глубокие провалы плотности состояний на картах имеют вид лучей положительного, нулевого и отрицательного наклона. Помимо веера лучей, разделяющих первый и второй, второй и третий уровни Ландау, на картах есть лучи им параллельные, сдвинутые по вертикали и горизонтали на целое число характерных значений концентрации n_0 и магнитного поля B_0 . Показано, что знак и величина наклона лучей DoS соответствуют центрам плато квантованных холловских сопротивлений R_{xy} . Яркими проявлениями решетки на картах $R_{xy}(n, B)$ являются реплики первого и второго плато R_{xy} и осцилляции R_{xy} между отрицательными и положительными значениями при фиксированном магнитном поле или концентрации, что говорит о смене дырочного и электронного типа носителей.

DOI: 10.31857/S1234567822210091, EDN: lhuotl

В настоящее время активно создаются и изучаются искусственные материалы и системы, подобные естественному графену, с дираковским конусом в законе дисперсии, но в другом диапазоне параметров [1–4]. Гексагональные решетки антиточек с периодом 80–120 нм, сформированные с помощью нанолитографии в высокоподвижном двумерном электронном газе (ДЭГ) гетероструктур GaAs/AlGaAs, называют полупроводниковым искусственным графеном (ПИГ) [4, 5]. В ПИГ интересны две точки Дирака: первая возникает при пересечении двух нижних минизон, и вторая – при пересечении четвертой и пятой минизон [6–9]. Было показано, что в отсутствие беспорядка квантование Ландау–Дирака возникает вблизи точки Дирака в очень слабых магнитных полях $B < 10$ мТл [5]. Однако до сих пор не было сообщений о наблюдении точек Дирака в квантовом транспорте ПИГ. Главной помехой в этом является беспорядок [9, 10], и пока присутствие точек Дирака в ПИГ подтверждено только изучением фотолюминисценции при межзонных переходах в квантовой яме GaAs при $B = 0$ [4]. Тем не менее, проявления магнито-электрического минизонного спектра решетки или бабочки Хофштадтера [11] были

зарегистрированы на квадратной решетке с периодом около 100 нм, когда энергия Ферми E_F во много раз превосходила амплитуду модуляции V [12]. Для высоких уровней Ландау наблюдалось немонотонное поведение холловского сопротивления, при этом беспорядок хорошо экранировался.

Для появления хорошо определенного дираковского конуса в ПИГ высота барьеров потенциала в антиточках должна существенно превышать уровень Ферми. Влияние беспорядка в этом случае становится сильным и может разрушать дираковскую точку [9]. Как показывают измерения, от амплитуды периодической модуляции зависят наблюдаемые эффекты [13]. Так, при слабой модуляции видны только эффекты магнитного пробоя [14, 15], и с ростом амплитуды модуляции они пропадают. Расчеты квантового транспорта в ПИГ без учета беспорядка показали, что в окрестности точек Дирака при низких магнитных полях снизу и сверху по концентрации от нулевого уровня Ландау формируются плато дырочной и электронной проводимости [5]. Недавно без учета беспорядка промоделированы магнито-электрические минизоны и краевые состояния в ПИГ при больших магнитных полях [16]. Интегральную картину влияния решетки можно получить, если построить карты DoS(n, B) в зависимости от магнит-

¹⁾e-mail: otkach@list.ru

ного поля и концентрации носителей, т. е. диаграммы Ванье [17]. Примером могут служить экспериментально изученные графеновые сверхрешетки, имеющие период около 15 и 35 нм и демонстрирующие клонирование основной дираковской точки и бабочку Хофштадтера [1–3].

В настоящей работе мы представляем вычисленные диаграммы Ванье для разных амплитуд модуляции полупроводниковой решетки антиточек с учетом коротковолнового беспорядка. Расчеты холловского сопротивления R_{xy} показывают тесную связь $\text{DoS}(n, B)$ с $R_{xy}(n, B)$. Вычисленные карты плотности состояний помогут прогнозировать результаты измерений и дать оценку реальных уровней модуляции и беспорядка.

Мы используем в расчетах аналитическое задание потенциала $U(\mathbf{r})$ гексагональной решетки на квадрате размером 2–3 мкм: $U(\mathbf{r}) = V_d(\mathbf{r}) + V_0 \sum \cos(\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{r})$, где L – период решетки, V_0 определяет амплитуду модуляции потенциала, а функция $V_d(\mathbf{r})$ задает беспорядок. Векторы обратной решетки определяются как

$$\mathbf{g}_1 = g_0(1, 1/\sqrt{3}), \quad (1)$$

$$\mathbf{g}_2 = g_0(0, 2/\sqrt{3}), \quad (2)$$

$$\mathbf{g}_3 = \mathbf{g}_1 - \mathbf{g}_2 = g_0(1, -1/\sqrt{3}), \quad (3)$$

$$g_0 = 2\pi/L.$$

Подобно работе [15], функция $V_d(\mathbf{r}) = \delta \cdot V_r$ задает случайную добавку к потенциалу решетки в каждом сайте дискретной сетки ($h_x = h_y = 8$ нм), где величина V_r определяет амплитуду беспорядка, а δ – случайное число в диапазоне от -0.5 до 0.5 . В работе [9] было показано, что зонный спектр решетки зависит только от безразмерной амплитуды модуляции потенциала $w_0 = 0.5V_0/E_0$, где характерная энергия $E_0 = \frac{8\pi^2}{9} \frac{\hbar^2}{m^*L^2}$. Для эффективной массы в GaAs $m^* = 0.067m_e$ и периода решетки $L = 80$ нм характерная энергия равна $E_0 = 1.56$ мэВ. При низкой модуляции, $w_0 < 1$, третья и более высокие минизоны решетки налагаются на вторую минизону. С ростом модуляции минизоны поднимаются и расправляются, при $w_0 = 1.5$ уже сформированы третья плоская зона и вторая точка Дирака [9].

При рассмотрении решеток вводят характерные значения концентрации n_0 и магнитного поля B_0 , где n_0 определяется как отношение двух частиц на площадь ячейки $n_0 = 2/(\sqrt{3}L^2/2)$, а B_0 соответствует значению, при котором магнитный поток, пронизывающий ячейку решетки $\phi = B\sqrt{3}L^2/2$, равен кванту $\phi_0 = h/e$. Отметим, что n_0 совпадает с концентраци-

ей в первой точке Дирака $n_0 = n_{1D}$. Для периода $L = 80$ нм $B_0 \approx 0.75$ Тл и $n_0 \approx 3.6 \cdot 10^{10}$ см $^{-2}$.

Потенциал на полосе за пределами выделенной квадратной области принимался однородным и равным минимальному значению потенциала решетки в отсутствие беспорядка. Затем решалась задача одночастичного двумерного квантового рассеяния электронных волн, падающих слева и справа на обозначенный квадрат. В результате решения этой задачи методом рекурсивных функций Грина [18] вычислялись зависимости локальной плотности состояний DoS от энергии E и перпендикулярного магнитного поля B . Интегрированием DoS(E) на большом интервале по энергии вплоть до E_F можно находить зависимость $n(E_F)$ при заданном B [19]. Было показано, что задание малой мнимой части энергии в определении функции Грина позволяет эффективно сгладить интерференционные осцилляции DoS(E) без потери точности расчета концентрации. Дополнительно, с малым шагом менялся параметр B от нуля до режима квантового эффекта Холла. Таким образом были построены карты DoS(E, B), DoS(n, B) и определены зависимости $E_F(n, B)$. В этих расчетах период решетки был фиксирован $L = 80$ нм, для амплитуд модуляции $w_0 = 0.1, 0.25, 0.5, 1$ использован локальный беспорядок $V_r = 2$ мэВ, а для $w_0 = 1.5 - V_r = 5$ мэВ.

На рисунках 1 и 2 изображены карты, на которых желтым цветом показаны максимальные значения плотности состояний, а темным цветом минимальные значения. На этих картах можно наблюдать переход от веера уровней Ландау ($w_0 = 0.1$) до установления почти периодической картины ($w_0 = 1$) в области низких значений концентрации ($n < 2n_0$) и магнитного поля ($B < 2B_0$). В расчетах полная модуляция менялась от 1.4 мэВ ($w_0 = 0.1$) до 21.1 мэВ ($w_0 = 1.5$), циклотронная частота $\hbar\omega_c$ от 0 до 3.46 мэВ при 2 Тл.

На первых двух картах модуляция сравнительно слабая и мы видим уровни Ландау (Шубниковские осцилляции) – горбы DoS; провалы DoS между ними расходятся лучами из нуля по концентрации и магнитному полю. Провалы DoS отвечают либо крайевым состояниям (наклонные линии), когда электроны внутри решетки отсутствуют и двигаются только вдоль края решетки, либо запрещенным зонам в решетке, когда электроны вовсе не входят в образец (горизонтальные линии). Наклон $k = \tilde{n}/\tilde{B}$ темных линий в безразмерных переменных $\tilde{n} = n/n_0$, $\tilde{B} = B/B_0$ прямо связан с квантованным кондактансом $G = kG_0$ или холловским сопротивлением $R_{xy} = 1/kR_0$, где $G_0 = 2e^2/h$, а $R_0 = 1/G_0$: тем-

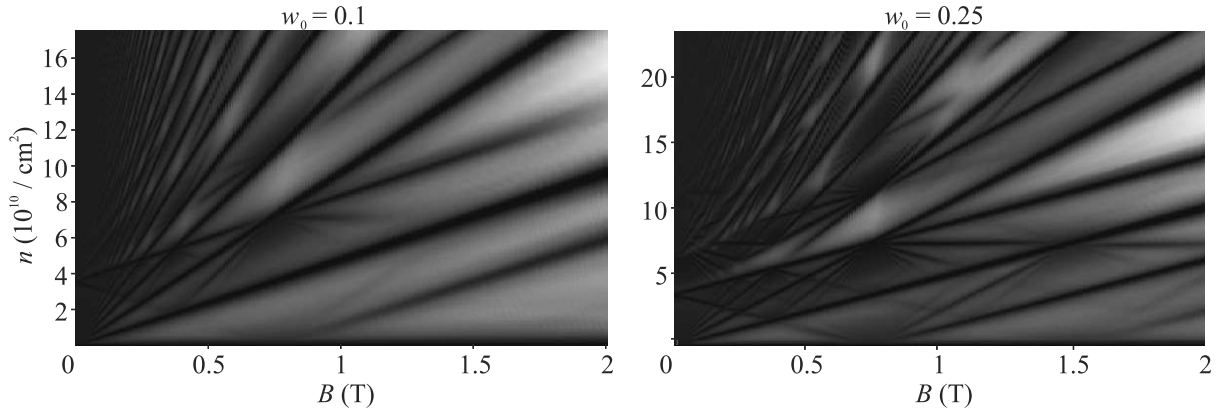


Рис. 1. (Цветной онлайн) Карты DoS(n, B) для решетки с модуляцией $w_0 = 0.1, 0.25$

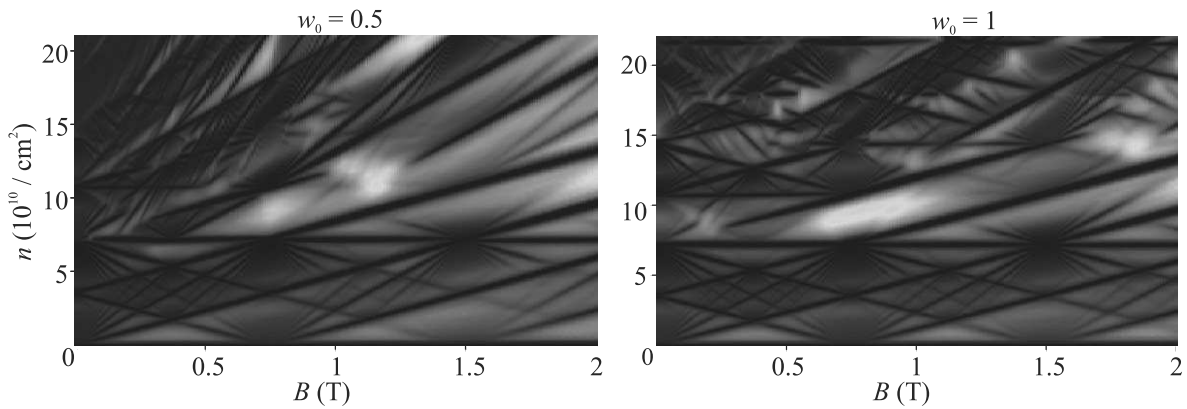


Рис. 2. (Цветной онлайн) Карты DoS(n, B) для решетки с модуляцией $w_0 = 0.5, 1$

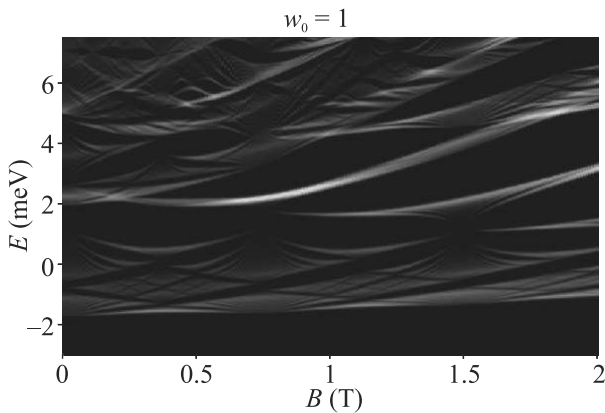


Рис. 3. (Цветной онлайн) Карта DoS(E, B) для $w_0 = 1$

ные линии определяют центры плато квантованных значений кондактанса или сопротивлений. Сами плато R_{xy} , как показывают наши расчеты, всегда шире провалов DoS. Звездочки лучей DoS отвечают отстраиванию уровней Ландау от краев зон и выходят из точек на карте, координаты которых кратны ха-

рактерным значениям концентрации n_0 и магнитного поля решетки B_0 .

Отметим особенности графиков. Для $w_0 = 0.1$ из точки Дирака $(n_0, 0)$ выходят луч с наклоном вверх ($k = 1$) и луч вниз ($k = -1$), луч вниз выражен гораздо хуже. Точки $(2n_0, B_0)$, $(3n_0, B_0)$ являются центрами лучей разных наклонов, из точки $(0, B_0)$ выходит луч с наклоном $+1$. Появляются линии параллельные основным лучам, разделяющим уровни Ландау. Например, луч с наклоном $k = 2$, который сверху входит в точку $(3n_0, B_0)$, можно продолжить вниз до первой точки Дирака. Для $w_0 = 0.25, 0.5$, карта лучей становится более четкой. Поскольку лучи отвечают центрам плато холловского сопротивления, картина квантового Холла должна быть совершенно необычной и содержать три или четыре повторения первого плато $R_{xy} = R_0$. Хотя для $w_0 = 0.1-0.5$ в законе дисперсии при $B = 0$ нет щели запрещенных энергий, горизонтальный луч, который сначала появляется из точки $(2n_0, B_0)$ при $w_0 = 0.1-0.25$, распространяется в сторону слабых и сильных магнитных полей при $w_0 = 0.5$. Щель может замываться

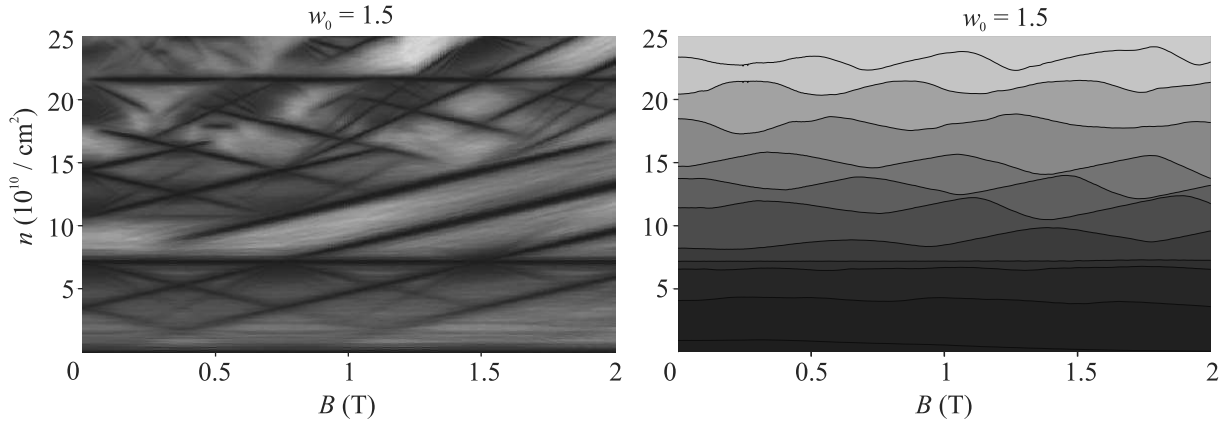


Рис. 4. (Цветной онлайн) Карты DoS(n, B) (слева) и карта $E_F(n, B)$ (справа) для $w_0 = 1.5$ при $V_r = 5$ мэВ

беспорядком, но она проявляется в расчетах как область высоких сопротивлений.

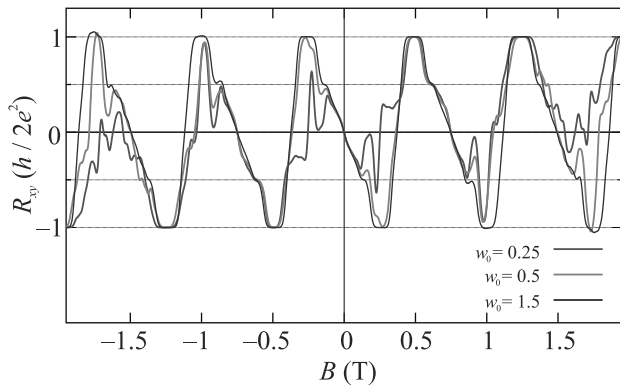


Рис. 5. (Цветной онлайн) $R_{xy}(B)$ для $w_0 = 0.25, 0.5, 1.5$, при постоянной концентрации $n = 6 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ и беспорядке $V_r = 2$ мэВ

При $w_0 = 1$ между второй и третьей минизонами уже есть запрещенная зона, она видна на карте DoS как горизонтальный луч из точки $(2n_0, 0)$. Карта в диапазоне концентраций ниже $2n_0$ выглядит по магнитному полю почти периодически с периодом B_0 . Из второй точки Дирака $(4n_0, 0)$ выходят два луча с наклоном ± 1 и лучи вниз с наклонами $-3, -5, -7$, которые говорят о квантовании Ландау–Дирака. При более высоких концентрациях из-за наложения разных минизон решетки ясная структура пропадает. Третья минизона решетки (плоская) характеризуется высокой плотностью состояний, она выделена яркой полоской DoS, которая идет от точки $(E = 2 \text{ мэВ}, B = 0)$ на рис. 3. Картина DoS(E, B) на плоскости (E, B) – это аналог бабочки Хофштадтера, рассчитанной почти на трех периодах по B_0 для решетки конечного размера с полной модуляцией 14 мэВ и с

учетом беспорядка. При пересчете энергии в соответствующую концентрацию области с низким значением DoS сжимаются в узкие полосы, а области с высоким DoS расширяются, и вся криволинейная картина DoS(E, B) расправляется в серию прямых линий на плоскости (n, B) (аналог диаграммы Ванье).

На рисунке 4 при $w_0 = 1.5$ после заполнения 6 минизон в магнитном поле появляется еще одна горизонтальная линия, идущая из точки $n = 6n_0 = 21.65 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$. Сильный по амплитуде беспорядок $V_r = 5$ мэВ замыкает тонкую структуру DoS. Доминируют лучи с наклонами ± 1 , а веер обычных уровней Ландау исчез. В правой части рис. 4 показана карта энергии Ферми $E_F(n, B)$. Цветовая гамма карты $E_F(n, B)$ соответствует изменению энергии от -4 мэВ (темный цвет) до 8 мэВ (желтый). $E_F(B)$ при постоянной n почти периодически осциллирует.

Холловские сопротивления вычислялись с помощью программы Kwant [20] при таком же задании потенциала и беспорядка, в четырехтерминальной постановке. Сверху и снизу к правой и левой боковым граням квадрата с решеткой подходят два горизонтальных канала, через которые происходит рассеяние электронов. Четырехтерминальные сопротивления восстанавливаются по формулам Бьютиккера по вычисляемым в системе коэффициентам прохождения между контактами [21].

На рисунке 5 показан пример расчета холловского сопротивления для $n = 6 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ для трех амплитуд модуляции при беспорядке $V_r = 2$ мэВ. При этой концентрации с ростом магнитного поля последовательно пересекаются полосы провалов DoS с отрицательным и положительным наклонами ± 1 , при этом пилообразным образом меняется $R_{xy}(B)$. Плато $R_0/2, R_0/3$ не проявляются здесь из-за их узости. Области отрицательного холловского сопро-

тивления свидетельствуют о дырочном типе проводимости. Поведение $R_{xy}(B)$ согласуется с картами DoS(n, B) и становится более выраженным с ростом модуляции. При $w_0 = 1.5$ кривая $R_{xy}(B)$ пересекает нуль почти точно при $jB_0/2$, где $j = 1, 2, 3, 4, 5$. Дополнительное замечание относится к типу беспорядка. Даже сильный коротковолновый беспорядок, учтенный в данных расчетах, не разрушает плато квантованных значений холловского сопротивления. Влияние длинноволнового беспорядка оказывается гораздо более сильным. Он возникает из-за немного разных размеров отверстий в затворе, задающим решетку антиоточек. Мы обнаружили в расчетах, что беспорядок этого типа разрушает квантование холловского сопротивления в низких магнитных полях $B < 0.5B_0$ (значения R_{xy} уменьшаются, но знак сохраняется) и подавляет решеточные эффекты в сильных магнитных полях $B_0 < B < 3B_0$.

Итак, для полупроводникового искусственно графена вычислены зависимости DoS(E, B), DoS(n, B), $E_F(n, B)$ для амплитуды модуляции потенциала, сравнимой или больше энергии Ферми. Полученные карты являются наглядным и емким представлением квантования Ландау–Дирака, бабочки Хофштадтера и магнито-электрических осцилляций уровня Ферми. Показано, что на картах (n, B) веер уровней Ландау с ростом модуляции решетки трансформируется в ячеистую сеть, образованную набором параллельных линий разных наклонов и противоположных знаков. Особенностью ПИГ является чередование типов носителей: дырочного и электронного, в результате чего холловское сопротивление $R_{xy}(B)$ осциллирует между отрицательными и положительными значениями. Результаты моделирования могут помочь интерпретации измерений магнитотранспорта в решетках. Примером в этом отношении являются диаграммы Ванье, которые были получены емкостными измерениями DoS в короткопериодных графеновых сверхрешетках [2, 3].

Данная работа выполнена с использованием ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН и при поддержке Российского научного фонда, грант # 19-72-30023.

Авторы благодарны за стимулирующее обсуждение коллегам, прежде всего, О. Клочану, Д. К. Ванг, З. Е. Криксу, А. Р. Гамильтону из Университета Нового Южного Уэльса, Австралия.

1. L. A. Ponomarenko, R. V. Gorbachev, G. L. Yu et al. (Collaboration), *Nature* **497**, 594 (2013).
2. G. L. Yu, R. V. Gorbachev, J. S. Tu et al. (Collaboration), *Nature physics* **10**, 525 (2014).
3. C. Forsythe, X. Zhou, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. Pasupathy, P. Moon, M. Koshino, P. Kim, and C. R. Dean, *Nature Nanotech.* **13**, 566 (2018).
4. L. Du, Z. Liu, S. J. Wind, V. Pellegrini, K. W. West, S. Fallahi, L. N. Pfeiffer, M. J. Manfra, and A. Pinczuk, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 106402 (2021).
5. O. A. Tkachenko and V. A. Tkachenko, *JETP Lett.* **99**, 204 (2014).
6. C.-H. Park and S. G. Louie, *Nano Lett.* **9**, 1793 (2009).
7. M. Gibertini, A. Singha, V. Pellegrini, M. Polini, G. Vignale, A. Pinczuk, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. B* **79**, 241406(R) (2009).
8. L. Nádvořník, M. Orlita, N. A. Goncharuk, L. Smrčka, V. Novák, V. Jurka, K. Hruška, Z. Výborný, Z. R. Wasilewski, M. Potemski, and K. Výborný, *New J. Phys.* **14**, 053002 (2012).
9. O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko, I. S. Terekhov, and O. P. Sushkov, *2D Materials* **2**, 014010 (2015).
10. О. А. Ткаченко, В. А. Ткаченко, Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: Физика **11**, 80 (2016).
11. D. R. Hofstadter, *Phys. Rev. B* **14**, 2239 (1976).
12. C. Albrecht, J. H. Smet, K. von Klitzing, D. Weiss, V. Umansky, and H. Schweizer, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **20**, 143 (2003).
13. D. Q. Wang, D. Reuter, A. D. Wieck, A. R. Hamilton, and O. Klochan, *Appl. Phys. Lett.* **117**, 032102 (2020).
14. C. Albrecht, J. H. Smet, D. Weiss, K. von Klitzing, R. Hennig, M. Langenbuch, M. Suhrke, U. Rössler, V. Umansky, and H. Schweizer, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 223470 (1999).
15. J. Schluck, J. Feilhauer, K. Pierz, H. W. Schumacher, D. Kazazis, U. Gennser, and T. Heinzel, *Phys. Rev. B* **98**, 165415 (2018).
16. Z. E. Krix and O. P. Sushkov, *Phys. Rev. B* **101**, 245311 (2020).
17. G. H. Wannier, *Phys. Status Solidi B* **88**, 757 (1978).
18. A. Cresti, R. Farchioni, G. Grosso, and G. P. Parravicini, *Phys. Rev. B* **68**, 075306 (2003).
19. O. A. Tkachenko, V. A. Tkachenko, D. G. Baksheev, and O. P. Sushkov, *JETP Lett.* **112**, 186 (2020).
20. C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, and X. Waintal, *New J. Phys.* **16**, 063065 (2014).
21. M. Büttiker, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1761 (1986).

Магнито-межподзонные осцилляции в условиях перекрывающихся зон Ландау

А. А. Быков¹⁾, И. С. Стрыгин, Е. Е. Родякина, А. К. Бакаров

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 4 сентября 2022 г.

После переработки 25 сентября 2022 г.

Принята к публикации 26 сентября 2022 г.

Экспериментально исследованы магнито-межподзонные осцилляции в высокоподвижной двухподзонной электронной системе с одномерной периодической модуляцией потенциала в условиях перекрывающихся зон Ландау. Обнаружена сильная модификация магнито-межподзонных осцилляций по амплитуде и фазе – подавление амплитуды и инверсия магнито-межподзонных осцилляций в некоторых диапазонах магнитных полей. Полученные экспериментальные данные объясняются “двугорбой” структурой энергетического спектра электронов в зонах Ландау.

DOI: 10.31857/S1234567822210108, EDN: linnxd

Одним из вариантов реализации двухподзонной (2D) электронной системы является квантовая яма с двумя заполненными подзонами размерного квантования E_j (j – индекс подзоны), изображенная схематически на рис. 1а. В такой квазидвумерной электронной системе, помещенной во внешнее перпендикулярное магнитное поле B возникают две серии уровней Ландау, обозначенных на рис. 1б цифрами 1 и 2. При увеличении B уровни Ландау последовательно пересекают уровень Ферми (E_F), что приводит к двум сериям осцилляций Шубникова–де Гааза (ШдГ). Осцилляции ШдГ периодичны по $1/B$, а их частоты (f_j) определяются концентрациями электронов в подзонах (n_j): $f_j = hn_j/2e$. В двухподзонной системе наряду с осцилляциями ШдГ возникает еще один тип квантовых осцилляций – магнито-межподзонные (ММП) [1–8]. Они возникают на частоте $f_{12} = f_1 - f_2$.

ММП осцилляции сопротивления обусловлены упругим межподзонным рассеянием, которое становится резонансным при смыкании уровней Ландау различных подзон. В двухподзонной системе ММП осцилляции сопротивления задаются соотношением [7]:

$$\Delta\rho_{\text{MISO}}/\rho_0 = A_{\text{MISO}}\lambda_{\text{MISO}}^2 \cos(2\pi\Delta_{12}/\hbar\omega_c), \quad (1)$$

где $\rho_0 = \rho_{xx}(B = 0)$, $A_{\text{MISO}} = 2\tau_{tr}/\tau_{12}$, τ_{tr} – транспортное время рассеяния, τ_{12} – время межподзонного рассеяния, $\lambda_{\text{MISO}}^2 = \lambda_1 \times \lambda_2$, $\lambda_j = \exp(-\pi/\omega_c\tau_{qj})$ – фактор Дингла, τ_{qj} – квантовое

время жизни, $\lambda_{\text{MISO}} = \exp(-\pi/\omega_c\tau_q^{\text{MISO}})$, $\tau_q^{\text{MISO}} = 2\tau_{q1}\tau_{q2}/(\tau_{q1} + \tau_{q2})$, $\Delta_{12} = (E_2 - E_1)$, $\omega_c = eB/m^*$ – циклотронная частота, а m^* – эффективная электронная масса. ММП осцилляции не подавляются температурным уширением функции распределения Ферми [1], и поэтому позволяют исследовать квантовый транспорт в условиях, когда осцилляции ШдГ не проявляются [9–17].

Настоящая работа посвящена изучению ММП осцилляций в двухподзонной электронной системе, помещенной в одномерный периодический потенциал: $V(x) = V_0 \cos(2\pi x/a)$, где V_0 – амплитуда модуляции потенциала, a – период латеральной потенциальной модуляции. Один из вариантов реализации латеральной сверхрешетки (ЛСР) представлен на рис. 1с. В этом варианте $V(x)$ задается затворным напряжением V_g на серии металлических полосок, сформированных на поверхности полупроводниковой гетероструктуры. К настоящему времени электронные свойства одномерных ЛСР на основе одноподзонных систем исследованы широко и подробно [18–30]. Однако многие аспекты электронных свойств ЛСР на основе двухподзонных систем остаются до сих пор неизученными [31–35].

В двухподзонных системах с одномерной периодической модуляцией потенциала $V(x)$ наблюдаются две серии ($j = 1, 2$) соизмеримых осцилляций (СО) магнетосопротивления, минимумы и максимумы которых возникают при выполнении равенств [31, 33, 35]:

$$2R_{cj}/a = (i - 1/4), \quad (2)$$

$$2R_{cj}/a = (i + 1/4), \quad (3)$$

¹⁾e-mail: bykov@isp.nsc.ru

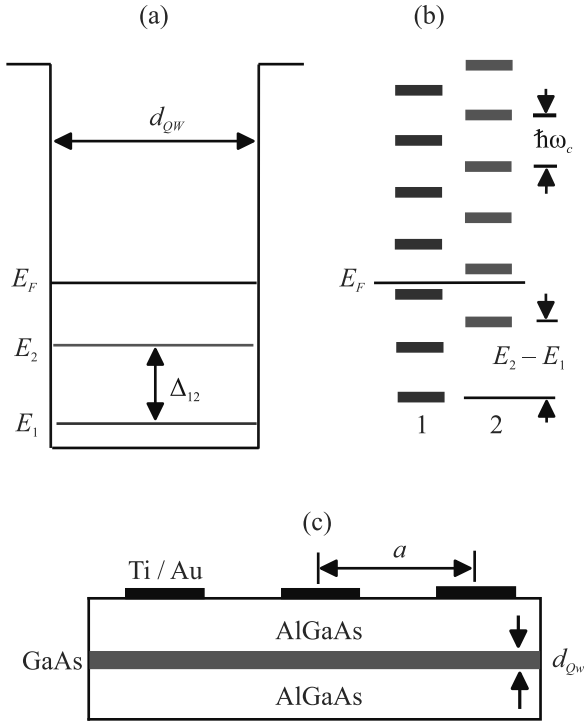


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Схематическое изображение профиля ограничивающего потенциала квантовой ямы шириной d_{QW} с двумя заполненными подзонами размерного квантования; E_1 – положение дна первой подзоны; E_2 – положение дна второй подзоны; E_F – положение уровня Ферми. (б) – Две серии уровней Ландау, возникающие в первой и второй подзонах; $\hbar\omega_c$ – энергетическое расстояние между уровнями Ландау в каждой подзоне. (с) – Схематический разрез одномерной латеральной сверхрешетки на основе квантовой ямы GaAs с боковыми барьерами AlGaAs; a – период расположения Ti/Au полосок

где $R_{cj} = \hbar(2\pi n_j)^{1/2}/eB$ – циклотронный радиус, а i – целое положительное число. В рамках классической модели эти осцилляции возникают вследствие соизмеримости между R_{cj} и a [21], а в рамках квантово-механической – вследствие осцилляций ширины зон Ландау [19, 20]. Недавно было показано, что одномерный периодический потенциал $V(x)$ в двухподзонной системе приводит не только к СО, но и к амплитудной модуляции ММП осцилляций [35]. Обнаруженное явление было объяснено ролью зон Ландау в двухподзонном квантовом магнетотранспорте.

Одномерный периодический потенциал $V(x)$ видоизменяет энергетический спектр электронов в 2D системе, помещенной в перпендикулярное B вследствие снятия вырождения по отношению к координате центра волновой функции x_0 , что приводит к

формированию зон Ландау [20]. Плотность состояний в условиях $V_0 \ll E_F - E_j = \varepsilon_{Fj}$ при большом числе заполненных уровней Ландау $N_j \sim \varepsilon_{Fj}/\hbar\omega_c \gg 1$, выражается следующим соотношением [25]:

$$D_j/D_0 = 1 + 2 \sum_{k=0}^{\infty} \cos\{2\pi k[(\varepsilon_{Fj}/\hbar\omega_c) - 0.5]\} \times J_0(2\pi k V_{Bj}/\hbar\omega_c) \exp(-\pi k/\tau_{qj} \hbar\omega_c), \quad (4)$$

$$V_{Bj} = V_0 J_0(2\pi R_{cj}/a), \quad (5)$$

где $D_0 = m^*/\pi\hbar^2$. Нули и максимумы функции $|V_{Bj}|$ реализуются при значениях R_{cj}/a , описываемых формулами (2) и (3) в условиях $2\pi R_{cj}/a \geq 1$. В этом случае ширина зон Ландау $\Gamma_{Bj} = 2|V_{Bj}|$ равна нулю при выполнении равенства (2) и принимает максимальное значение при выполнении равенства (3).

Рисунок 2а демонстрирует зависимости $\Gamma_{Bj}(B)$, рассчитанные по формуле (5) для режимов слабой

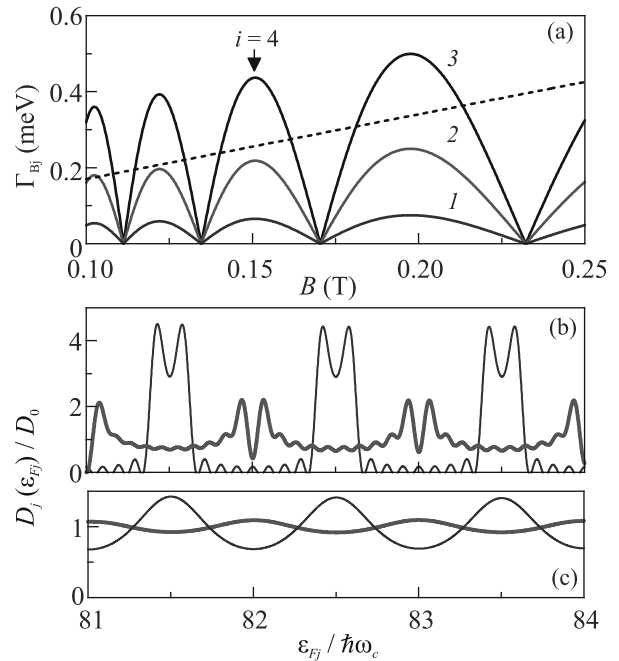


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Зависимости $\Gamma_{Bj} = 2|V_{Bj}|$ от B , рассчитанные по формуле (5) для $j = 1$, $n_1 = 6 \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$, $a = 400 \text{ нм}$, и различных величин V_0 : 1 – 0.15; 2 – 0.5 и 3 – 1 мэВ. Стрелкой указано положение максимума для $i = 4$. Пунктирная линия – зависимость $\hbar\omega_c$ от B . (б) и (с) – Зависимости D_j/D_0 от $\varepsilon_{Fj}/\hbar\omega_c$ для энергетической подзоны с индексом $j = 1$, рассчитанные по формуле (4) для $\varepsilon_{Fj} = 21.13 \text{ мэВ}$. Тонкая линия: $V_0 = 0.12 \text{ мэВ}$; $\tau_{qj} = 100 \text{ пс}$ (б); $\tau_{qj} = 5 \text{ пс}$ (с). Толстая линия: $V_0 = 0.54 \text{ мэВ}$; $\tau_{qj} = 100 \text{ пс}$ (б); $\tau_{qj} = 5 \text{ пс}$ (с)

(1), средней (2) и сильной (3) модуляции потенциала по отношению к $\hbar\omega_c$ в диапазоне B от 0.1 до 0.25 Тл. Зависимости D_j/D_0 от $\varepsilon_{Fj}/\hbar\omega_c$, рассчитанные по формуле (4) для фиксированной ε_{Fj} представлены на рис. 2b и с. В расчете мы ограничились суммой первых десяти членов. Расчетные зависимости показывают влияние V_0 и τ_{qj} на поведение D_j/D_0 в первой подзоне вблизи максимума функции $\Gamma_{Bj}(B)$ с номером $i = 4$. Рисунки 2b и с демонстрируют “двугорбый” и осциллирующий характер спектров для слабой и средней модуляции потенциала в условиях $1/\tau_{qj} \ll \omega_c$ и $1/\tau_{qj} \sim \omega_c$ соответственно. При этом, как показано на рис. 2с, в условиях $1/\tau_{qj} \sim \omega_c$ для слабой модуляции потенциала максимумы осцилляций D_j/D_0 возникают при полужелых числах отношения $\varepsilon_{Fj}/\hbar\omega_c$, а для средней – при целых. Таким образом, при переходе от слабой модуляции потенциала к средней происходит “переворот” осцилляций D_j/D_0 в зависимости от $\varepsilon_{Fj}/\hbar\omega_c$.

ММП осцилляции для двухподзонной электронной системы в одномерном периодическом потенциале $V(x)$ в условиях $N_j \sim \varepsilon_{Fj}/\hbar\omega_c \gg 1$, $V_0 \ll \varepsilon_{Fj}$ и $\tau_{qj} \sim 1/\omega_c$ задается следующим соотношением [35]:

$$\Delta\rho_{\text{MISO}}/\rho_0 = A_{\text{MISO}} \times J_0(2\pi V_{B1}/\hbar\omega_c) \times \lambda_1 \times J_0(2\pi V_{B2}/\hbar\omega_c) \times \lambda_2 \times \cos(2\pi\Delta_{12}/\hbar\omega_c). \quad (6)$$

В формуле (6) влияние $V(x)$ на амплитуду и фазу ММП осцилляций учитывается множителями $J_0(2\pi V_{Bj}/\hbar\omega_c)$ перед факторами Дингла λ_j . Соотношение (6) предсказывает существенную трансформацию амплитуды и фазы ММП осцилляций в условиях, когда $\Gamma_{Bj} \sim \hbar\omega_c$. Цель работы заключается в экспериментальном обнаружении ММП осцилляций в таких условиях. Насколько нам известно, ММП осцилляции в условиях перекрывающихся зон Ландау до настоящего времени не наблюдались.

В работах [6, 8] было показано, что в высокоподвижных двухподзонных системах с высокой электронной концентрацией на основе селективно легированных квантовых ям GaAs с боковыми сверхрешеточными барьерами AlAs/GaAs возникают ММП осцилляции значительной амплитуды, что открыло широкие экспериментальные возможности для изучения многоподзонного квантового транспорта при больших факторах заполнения уровней Ландау [9, 11, 13, 15, 16]. При этом было установлено, что в гетероструктурах GaAs/AlAs с модулированным сверхрешеточным легированием при подаче отрицательного напряжения на затвор Шоттки уменьшаются не только концентрация и подвижность 2D электронного газа [36], но и величина τ_q [37]. Кроме того, было показано, что увеличение

V_0 в одноподзонных ЛСР на основе гетероструктур GaAs/AlAs приводит к разрушению электронных состояний с нулевым сопротивлением, индуцированных микроволновым излучением в 2D системах с одномерной периодической модуляцией [26].

С учетом этих экспериментальных фактов основной целью работы [35] было исследование квантового магнетотранспорта в двухподзонных ЛСР с минимально возможной для регистрации СО величиной V_0 и соответственно с максимально возможным τ_{qj} . Было впервые показано, что в двухподзонных ЛСР с периодом одномерной потенциальной модуляции $a = 300$ нм и амплитудой $V_0 = 0.2$ мэВ СО сосуществуют с ММП осцилляциями. В такой ЛСР удалось изучить лишь режим амплитудной модуляции ММП осцилляций. В этом режиме одномерный периодический потенциал $V(x)$ приводит к дополнительному уширению уровней Ландау и существенно не влияет на спектр электронных состояний. Новизна настоящей работы заключается в том, что в ней впервые исследуется принципиально иная ситуация, когда периодический потенциал $V(x)$ приводит к “двугорбой” структуре энергетического спектра, что радикально изменяет двухподзонный квантовый магнетотранспорт в ЛСР.

В настоящей работе исследовалось поведение ММП осцилляций в высокоподвижной двухподзонной электронной системе, изготовленной на основе селективно легированной гетероструктуры GaAs/AlAs. Исходная гетероструктура представляла собой одиночную GaAs квантовую яму шириной 26 нм с боковыми сверхрешеточными барьерами AlAs/GaAs [36–38]. Носители заряда в квантовой яме обеспечивались Si δ -легированием. Одиночные Si δ -легированные слои располагались с двух сторон от GaAs квантовой ямы на расстоянии 29.4 нм от ее границ. Расстояние от центра квантовой ямы до планарной поверхности структуры составляло 117.7 нм. Гетероструктура выращивалась методом молекулярно-лучевой эпитаксии на (100) GaAs подложке.

Исследования проводились на мостиках шириной $W = 50$ мкм и длиной $L = 100$ мкм. Они изготавливались с использованием оптической фотолитографии и жидкостного травления. На вставке к рис. 3 изображена упрощенная геометрия образца. Образец состоит из двух мостиков, на одном из которых формировалась одномерная латеральная сверхрешетка. ЛСР представляла собой набор металлических полосок длиной 60 мкм и шириной 200 нм. Период решетки a составлял 400 нм. Сверхрешетка изготавливалась при помощи электронно-лучевой литографии

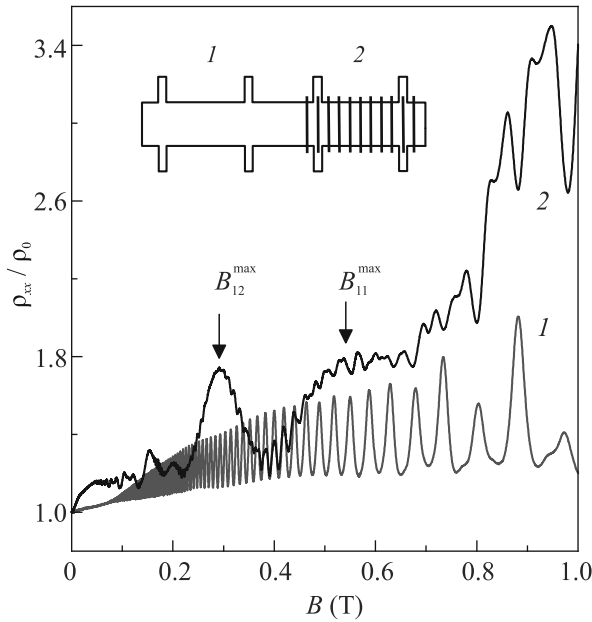


Рис. 3. (Цветной онлайн) Экспериментальные зависимости ρ_{xx}/ρ_0 от B , измеренные при $T = 4.2$ К на контрольном мостике (1) и на мостике с одномерной ЛСР (2). Стрелками указаны положения максимумов СО для $i = 1$ в первой ($j = 1$) и второй ($j = 2$) подзонах. На вставке изображена упрощенная схема образца

и метода “взрыва” двухслойной металлической пленки Ti/Au. Толщина слоя Au составляла 40 нм, а слоя Ti – 5 нм.

Эксперименты проводились при температуре $T = 4.2$ К в магнитных полях $B < 2$ Тл. Сопротивление образцов измерялось на переменном токе частотой 733 Гц, величина которого не превышала 10^{-6} А. В исходной гетероструктуре холловская концентрация и подвижность электронов составляли: $n_H \approx 8.2 \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$; $\mu \approx 115 \text{ м}^2/\text{Вс}$. Формирование решетки не изменяло n_H , а лишь незначительно уменьшало подвижность до $\mu \approx 104 \text{ м}^2/\text{Вс}$. В исследуемых латеральных решетках модуляция потенциала возникала без подачи электрического напряжения V_g на металлические полоски. Одна из причин такой модуляции – упругие механические напряжения, возникающие между металлическими полосками и гетероструктурой [23].

На рисунке 3 представлены зависимости ρ_{xx}/ρ_0 от B , измеренные при $T = 4.2$ К на контрольном мостике (1) и на одномерной ЛСР (2). На контрольном мостике в диапазоне магнитных полей $0.1 < B < 0.6$ Тл наблюдаются лишь ММП осцилляции, которые в магнитных полях $B > 0.6$ Тл сосуществуют с осцилляциями ШдГ. В Фурье спектре (не показано) зависимости ρ_{xx}/ρ_0 от $1/B$ для контрольного мо-

стика проявляются три частоты. Две из них соответствуют частотам осцилляций ШдГ ($f_1 \approx 12.8$ Тл и $f_2 \approx 4.0$ Тл), а третья – ММП осцилляциям ($f_{12} \approx 8.8$ Тл). Вычисленные из частот осцилляций ШдГ концентрации электронов в подзонах составили: $n_1 \approx 6.2 \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$; $n_2 \approx 1.9 \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$. Определенная из частоты f_{12} величина межподзонной энергии составила $\Delta_{12} \approx 15$ мэВ.

Исходя из того, что в используемом варианте реализации ЛСР максимально возможная амплитуда V_0 тем выше, чем больше период a [26, 28], для достижения поставленной в работе цели желательно иметь максимально возможную величину a . ММП осцилляции в исходной гетероструктуре при $T = 4.2$ К проявляются лишь в полях $B > 0.1$ Тл, что ограничивает величину a сверху. В магнитных полях $B > 0.6$ Тл ММП осцилляции сосуществуют с осцилляциями ШдГ, а также уменьшаются величины отношений $V_0/\hbar\omega_c$ и $\varepsilon_{Fj}/\hbar\omega_c$, что осложняет изучение роли зон Ландау в резонансном межподзонном рассеянии. Из сказанного выше следует, что для экспериментального изучения ММП осцилляций в условиях перекрывающихся зон Ландау желательно иметь величину отношения $2R_{cj}/a \sim 1$ в магнитном поле $B \sim 0.6$ Тл.

На одномерной ЛСР в магнитных полях $0.1 < B < 0.6$ Тл наиболее ярко проявляются осцилляции сопротивления, положение максимумов которых B_{ij}^{\max} определяется формулой (3), что позволяет считать их соизмеримыми. В этом диапазоне магнитных полей также наблюдаются ММП осцилляции, однако их амплитуда мала по сравнению с амплитудой ММП осцилляций на контрольном мостике. В Фурье спектре (не показано на рис. 3) зависимости ρ_{xx}/ρ_0 от $1/B$ для одномерной ЛСР в исследуемом диапазоне обратных магнитных полей, кроме частот f_1 , f_2 и f_{12} наблюдаются еще две дополнительные частоты: $f_{CO1} = 0.64$ Тл и $f_{CO2} = 0.36$ Тл. Дополнительные частоты $f_{COj} = 2R_{cj}B/a$ соответствуют СО в первой и второй подзонах. Величины магнитных полей $B_{ij}^{\max} = f_{COj}/(i + 1/4)$, при которых СО имеют максимумы для $i = 1$, указывают на то, что величина $a = 400$ нм является оптимальной для решения поставленной задачи. Для ЛСР с таким периодом величины $R_{cj}/a = f_{COj}/2B$ для $B = 0.5$ Тл в первой и второй подзонах равны 0.64 и 0.36 соответственно.

Периодические компоненты зависимостей ρ_{xx}/ρ_0 от $1/B$ в диапазоне $2 < 1/B < 8 \text{ Тл}^{-1}$ для контрольного мостика и одномерной ЛСР, полученные после вычитания сглаженных составляющих приведены на рис. 4а. Для контрольного мостика поведение ММП осцилляций полностью согласуется с урав-

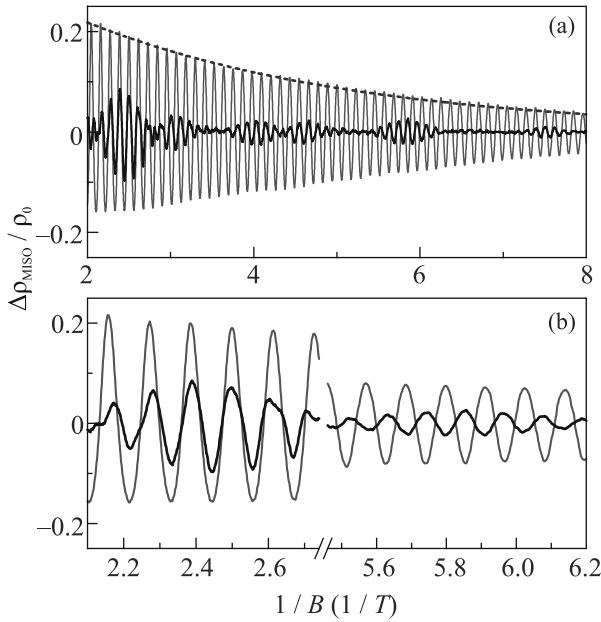


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Зависимости $\Delta\rho_{\text{MISO}}/\rho_0$ от $1/B$ для контрольного мостика (тонкая линия) и одномерной ЛСР (толстая линия) в широком интервале обратных магнитных полей. Пунктирная линия – зависимость $A_{\text{MISO}} \times \lambda_{\text{MISO}}^2$ от $1/B$: $A_{\text{MISO}} = 0.4$; $\tau_q^{\text{MISO}} = 8$ пс. (б) – Зависимости $\Delta\rho_{\text{MISO}}/\rho_0$ от $1/B$ для контрольного мостика (тонкая линия) и одномерной ЛСР (толстая линия) в двух узких интервалах обратных магнитных полей

нением (1). В этом случае зависимость амплитуды ММП осцилляций от $1/B$ описывается двумя подгруппными параметрами: $A_{\text{MISO}} = 0.4$ и $\tau_q^{\text{MISO}} = 8$ пс. По сравнению с контрольным мостиком амплитуда ММП осцилляций в одномерной ЛСР сильно подавлена. Кроме того, в некоторых интервалах обратных магнитных полей наблюдается “переворот” ММП осцилляций. Рисунок 4б показывает, что в области $2.2 < 1/B < 2.6 \text{ Тл}^{-1}$ ММП осцилляции на ЛСР и контрольном мостике идут синфазно, а в интервале $5.6 < 1/B < 6.2 \text{ Тл}^{-1}$ – противофазно.

Зависимости $\Delta\rho_{\text{MISO}}/\rho_0$ от $1/B$ для одномерной ЛСР, рассчитанные по формуле (6), представлены на рис. 5а. Периодический потенциал с амплитудой $V_0 = 0.25$ мэВ приводит лишь к амплитудной модуляции ММП осцилляций. В этом случае “двугорбая” структура энергетического спектра зон Ландау не проявляется, так как $\Gamma_{Bj} \sim \hbar/\tau_q^{\text{MISO}}$. Хорошее количественное согласие расчетной зависимости с экспериментальной наблюдается для величины $V_0 = 0.65$ мэВ. На рисунке 5б приведены зависимости Γ_{Bj} от $1/B$, рассчитанные для $V_0 = 0.65$ мэВ. Серым цветом выделены две области, в которых ММП осцилляции для контрольного мостика и ЛСР идут

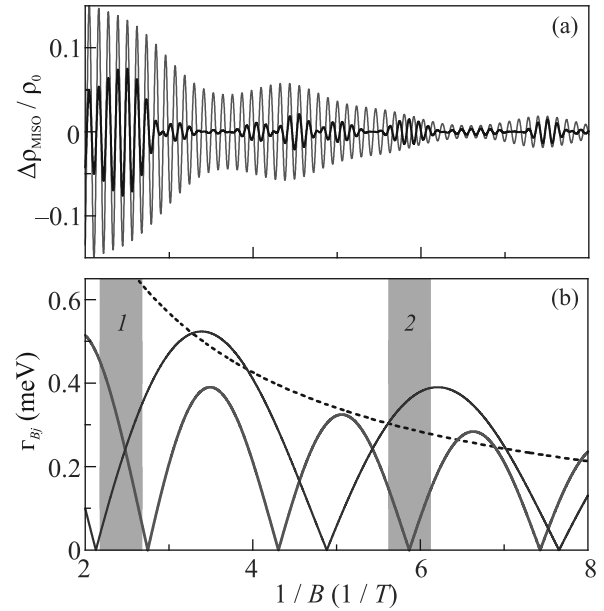


Рис. 5. (Цветной онлайн) (а) – Зависимости $\Delta\rho_{\text{MISO}}/\rho_0$ от $1/B$ для одномерной ЛСР, рассчитанные по формуле (6): $A_{\text{MISO}} = 0.4$; $\tau_q^{\text{MISO}} = 6$ пс; $n_1 = 6 \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$; $n_2 = 1.9 \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$; $a = 400$ нм; $V_0 = 0.25$ мэВ (тонкая линия) и 0.65 мэВ (толстая линия). (б) – Зависимости $\Gamma_{Bj}(1/B)$, рассчитанные для энергетических подзон с индексами $j = 1$ (толстая линия) и $j = 2$ (тонкая линия) по формуле (5): $n_1 = 6 \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$; $n_2 = 1.9 \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$; $a = 400$ нм; $V_0 = 0.65$ мэВ. Пунктирная линия – зависимость $\hbar\omega_c(1/B)$. Цифрами 1 и 2 обозначены интервалы, в которых ММП осцилляции для ЛСР и контрольного образца идут синфазно и противофазно

синфазно (область 1) и противофазно (область 2). В области 1 – $\Gamma_{Bj} < \hbar\omega_c/2$. В области 2 – $\Gamma_{B1} < \hbar\omega_c/2$, а $\Gamma_{B2} > \hbar\omega_c$.

В области 1 максимумы осцилляций D_j/D_0 в условиях $1/\tau_{qj} \sim \omega_c$ возникают при полужелых числах отношения $\varepsilon_{Fj}/\hbar\omega_c$, как и для контрольного мостика. В такой ситуации одномерный периодический потенциал $V(x)$ с учетом рассеяния электронов на случайном потенциале примесей и дефектов приводит лишь к уменьшению амплитуды ММП осцилляций, но не изменяет их фазу. В области 2 осцилляции D_1/D_0 , как и в области 1, имеют максимумы при полужелых числах отношения $\varepsilon_{Fj}/\hbar\omega_c$, а для D_2/D_0 – при целых. В такой ситуации $V(x)$ приводит не только к подавлению амплитуды ММП осцилляций, но и к изменению их фазы. В этом случае “переворот” ММП осцилляций обусловлен тем, что в области 2 – $\Gamma_{B1} < \hbar\omega_c/2$, а $\Gamma_{B2} > \hbar\omega_c$.

Отметим, что обнаруженный переворот ММП осцилляций принципиально отличается от переворота

осцилляций ШДГ в одномерной ЛСР [24]. Осцилляции ШДГ в 2D электронном газе обусловлены высокой плотностью состояний вблизи уровней Ландау. При увеличении $\hbar\omega_c$ области с высокой плотностью состояний периодически пересекают E_F , что и приводит к осцилляциям ШДГ. Одномерный периодический потенциал снимает вырождение уровней Ландау, что приводит к особенностям Ван Хофа в плотности состояний и формированию зон Ландау. Плотность состояний на краях зон Ландау имеет максимальное значение, а в центре – минимальное [22]. Такое “расщепление” уровней Ландау в одномерном периодическом потенциале ведет к расщеплению максимумов осцилляций ШДГ, а в условиях $\Gamma_{Bj} \sim \hbar\omega_c$ и $1/\tau_{qj} \sim \omega_c$ к их “перевороту” [24].

В двухподзонной электронной системе при изменении B периодически возникают резонансные изоэнергетические переходы электронов между уровнями Ландау различных подзон, которые и приводят к ММП осцилляциям. Резонансный характер таких межподзонных переходов не связан с положением E_F , что принципиально отличает механизмы возникновения ММП осцилляций и осцилляций ШДГ. Максимумы ММП осцилляций возникают при совпадении уровней Ландау различных подзон. Одномерный периодический потенциал существенно трансформирует условия возникновения резонансных магнетомежподзонных переходов. Обусловлено это изменением спектра энергетических состояний в подзонах. В этом случае условия резонансных магнетомежподзонных переходов возникают лишь в некоторых интервалах магнитных полей, что и наблюдается в эксперименте.

Таким образом, на основе высокоподвижной двухподзонной электронной системы изготовлена одномерная ЛСР, в которой экспериментально исследованы ММП осцилляции в условиях перекрывающихся зон Ландау. Обнаружена инверсия ММП осцилляций в некоторых диапазонах магнитных полей. Показано, что “переворот” ММП осцилляций происходит в условиях, когда ширина зон Ландау в первой подзоне существенно меньше циклотронной энергии, а во второй – сравнима с ней.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда #РНФ-22-22-00726, <https://rscf.ru/project/22-22-00726/>.

1. V. M. Polyanovskii, *Sov. Phys. Semicond.* **22**, 1408 (1988).
2. P. T. Coleridge, *Semicond. Sci. Technol.* **5**, 961 (1990).

3. D. R. Leadley, R. Fletcher, R. J. Nicholas, F. Tao, C. T. Foxon, and J. J. Harris, *Phys. Rev. B* **46**, 12439 (1992).
4. M. E. Raikh and T. V. Shahbazyan, *Phys. Rev. B* **49**, 5531 (1994).
5. N. S. Averkiev, L. E. Golub, S. A. Tarasenko, and M. Willander, *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, 2517 (2001).
6. A. A. Bykov, D. R. Islamov, A. V. Goran, and A. I. Toropov, *JETP Lett.* **87**, 477 (2008).
7. O. E. Raichev, *Phys. Rev. B* **78**, 125304 (2008).
8. A. V. Goran, A. A. Bykov, A. I. Toropov, and S. A. Vitkalov, *Phys. Rev. B* **80**, 193305 (2009).
9. A. A. Bykov, A. V. Goran, and S. A. Vitkalov, *Phys. Rev. B* **81**, 155322 (2010).
10. O. E. Raichev, *Phys. Rev. B* **81**, 195301 (2010).
11. A. A. Bykov, A. V. Goran, and A. K. Bakarov, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **51**, 28LT01 (2018).
12. I. L. Drichko, I. Yu. Smirnov, M. O. Nestoklon, A. V. Suslov, D. Kamburov, K. W. Baldwin, L. N. Pfeiffer, K. W. West, and L. E. Golub, *Phys. Rev. B* **97**, 075427 (2018).
13. A. A. Bykov, I. S. Strygin, A. V. Goran, I. V. Marchishin, D. V. Nomokonov, A. K. Bakarov, S. Abedi, and S. A. Vitkalov, *JETP Lett.* **109**, 400 (2019).
14. G. M. Minkov, O. E. Rut, A. A. Sherstobitov, S. A. Dvoretzki, and N. N. Mikhailov, *JETP Lett.* **110**, 301 (2019).
15. S. Abedi, S. Vitkalov, A. A. Bykov, and A. K. Bakarov, *Phys. Rev. B* **104**, 075416 (2021).
16. A. A. Bykov, D. V. Nomokonov, A. V. Goran, I. S. Strygin, A. K. Bakarov, S. Abedi, and S. A. Vitkalov, *JETP Lett.* **114**, 423 (2021).
17. M. Lodari, L. Lampert, O. Zietz, R. Pillarisetty, J. S. Clarke, and G. Scappucci, *Phys. Rev. Lett.* **128**, 176603 (2022).
18. D. Weiss, K. von Klitzing, K. Ploog, and G. Weimann, *Europhys. Lett.* **8**, 179 (1989).
19. R. R. Gerhardts, D. Weiss, and K. von Klitzing, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1173 (1989).
20. R. W. Winkler, J. P. Kotthaus, and K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1177 (1989).
21. C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2020 (1989).
22. D. Weiss, C. Zhang, R. R. Gerhardts, K. von Klitzing, and G. Weimann, *Phys. Rev. B* **39**, 13020(R) (1989).
23. I. A. Larkin, J. H. Davies, A. R. Long, and R. Cuscó, *Phys. Rev. B* **56**, 15242 (1997).
24. K. W. Edmonds, B. L. Gallagher, P. C. Main, N. Overend, R. Wirtz, A. Nogaret, M. Henini, C. H. Marrows, B. J. Hickey, and S. Thoms, *Phys. Rev. B* **64**, 041303(R) 2001.
25. A. Endo and Y. Iye, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 054709 (2008).

26. A. A. Bykov, I. S. Strygin, A. V. Goran, A. K. Kalagin, E. E. Rodyakina, and A. V. Latyshev, *Appl. Phys. Lett.* **108**, 012103 (2016).
27. O. E. Raichev, *Phys. Rev. B* **97**, 245310 (2018).
28. K. Tanaka, J. Falson, Y. Kozuka, M. Uchida, D. Maryenko, J. T. Ye, Y. Iwasa, A. Tsukazaki, J. H. Smet, and M. Kawasaki, *Appl. Phys. Lett.* **115**, 153101 (2019).
29. A. Endo, Sh. Katsumoto, and Y. Iye, *Phys. Rev. B* **103**, 235303 (2021).
30. C. Hnatovsky, M. A. Zudov, G. D. Austing, A. Bogan, S. J. Mihailov, M. Hilke, K. W. West, L. N. Pfeiffer, and S. A. Studenikin, *J. Appl. Phys.* **132**, 044301 (2022).
31. J. P. Lu and M. Shayegan, *Phys. Rev. B* **58**, 1138 (1998).
32. J. P. Lu, M. Shayegan, L. Wissinger, U. Rössler, and R. Winkler, *Phys. Rev. B* **60**, 13776 (1999).
33. S. Lindemann, M. Bänninger, T. Ihn, T. Heinzel, S. E. Ulloa, K. Ensslin, K. Maranowski, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. B* **66**, 165317 (2002).
34. O. Gunawan, Y. P. Shkolnikov, E. P. De Poortere, E. Tutuc, and M. Shayegan, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 246603 (2004).
35. A. A. Bykov, I. S. Strygin, A. V. Goran, D. V. Nomokonov, I. V. Marchishin, A. K. Bakarov, E. E. Rodyakina, and A. V. Latyshev, *JETP Lett.* **110**, 354 (2019).
36. K.-J. Friedland, R. Hey, H. Kostial, R. Klann, and K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4616 (1996).
37. D. V. Dmitriev, I. S. Strygin, A. A. Bykov, S. Dietrich, and S. A. Vitkalov, *JETP Lett.* **95**, 420 (2012).
38. A. A. Bykov, I. S. Strygin, A. V. Goran, D. V. Nomokonov, and A. K. Bakarov, *JETP Lett.* **112**, 437 (2020).

Квантовая обратная связь вне контролируемой системы

В. А. Томилин¹⁾, Л. В. Ильичев

Институт автоматки и электротметрии Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 25 июля 2022 г.

После переработки 8 сентября 2022 г.

Принята к публикации 20 сентября 2022 г.

Предложен новый метод управления квантовыми системами при помощи обратной связи. Обратная связь не затрагивает параметры самой управляемой системы, а меняет информационное содержание ее контактов с окружением (меняет так называемое “распутывание” квантовой операции, описывающей эти контакты). В качестве примера рассмотрена задача об управлении состоянием двухмодового атомарного конденсата Бозе-Эйнштейна, одна из мод которого подвергается фазо-контрастному зондированию в интерферометре Маха-Цандера. Различные “распутывания” операции фотодетектирования осуществляются при помощи изменения фазового сдвига в свободном от конденсата плече интерферометра. Выведено кинетическое уравнение, описывающее эволюцию состояния конденсата с учетом обратной связи, и на основе его стационарного решения рассчитано расхождение Кульбака-Лейблера между распределениями атомов по модам с обратной связью и в ее отсутствие. Показано, что это расхождение достигает максимума при нетривиальных значениях задающих распутывание параметров.

DOI: 10.31857/S123456782221011X, EDN: lirimb

1. Введение. Каноническое определение кибернетики как науки об общих закономерностях получения, хранения, преобразования и передачи информации в сложных управляющих системах [1] можно несколько сузить на класс *самоуправляемых* систем. При этом в фокусе внимания оказывается петля обратной связи как основа автоконтроля. С развитием экспериментальных техник обращения с системами, демонстрирующими существенно квантовые свойства, сформировалась наука о квантовой обратной связи [2]. Первые эксперименты в этом направлении были проведены в 1980-х гг. [3, 4]. Некоторые ранние методы теории квантового (само)управления изложены в [5, 6].

Все множество подходов к организации квантовой обратной связи может быть разделено на две большие группы: так называемая обратная связь, основанная на измерениях (*measurement-based feedback*), и когерентная обратная связь (*coherent feedback*). В первом случае непрерывно наблюдаемая квантовая система оказывается генератором классической информации, например, серии фоторегистраций. С помощью механизма обратной связи эта информация инициирует дополнительные преобразования состояния системы (помимо вызванного самим измерением) или условий ее эволюции. В альтернативном подходе, коим является когерентная обратная связь, управление осуществляется через

взаимодействие рассматриваемой системы с другой квантовой системой. При этом стадия извлечения из системы классической информации отсутствует [7, 8]. В работе [9] предложен эффективный способ контроля состояния атомарного бозе-конденсата с помощью комбинации обоих типов обратной связи.

Для управления системой S при помощи петли обратной связи, основанной на измерениях, используется взаимодействующая с S вспомогательная система-контроллер C . Такая схема появилась в работах Р. Эшби [10] на самой заре кибернетики, когда именно самоуправляемые системы были основным объектом исследования. На рисунке 1 стрелками показаны каналы взаимодействия систем между собой

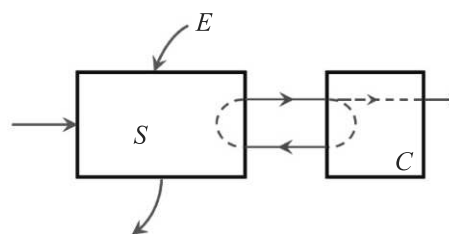


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема управления системой S при помощи контроллера C . Система взаимодействует как с контроллером, так и с более широким пространством окружения E (стрелками обозначены каналы этого взаимодействия). Петля обратной связи охватывает как систему, так и контроллер

¹⁾e-mail: 8342tomilin@mail.ru

и с внешним окружением. Обе подсистемы, S и C , являются классическими. Это предполагает наличие неконтролируемых каналов взаимодействия между ними и окружением, что неотделимо от представления о параметрах систем как элементах объективно существующей физической реальности.

Иначе обстоит дело в случае квантовой природы системы S . Мыслима ситуация практически полного контроля каналов ее взаимодействия с окружением. Элементарный акт такого взаимодействия можно представить в виде акта измерения некоторой наблюдаемой, относящейся к системе, с последующей регистрацией результата измерения (событием). При этом само состояние системы S в общем случае меняется. Таким образом, получение информации от квантовой системы неотделимо от процесса приготовления ее состояния. Это обстоятельство расширяет арсенал возможных методов контроля и формирования квантовых состояний. На схеме рисунке 2,

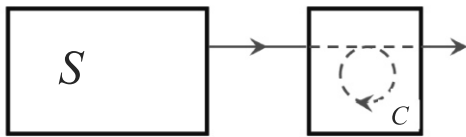


Рис. 2. (Цветной онлайн) Управление квантовой системой S при помощи обратной связи, модифицирующей способ взаимодействия системы с окружением

где и основная система S , и контроллер C являются квантовыми, информация, поступающая из S , представляется в виде серии регистрируемых событий в C . Можно организовать петлю обратной связи, замкнутую внутри контроллера и не затрагивающую систему S , как в классическом случае на рис. 1. Такая обратная связь будет управлять самим способом взаимодействия контроллера с системой S , основываясь на истории предшествующих событий, подходящим образом модифицируя параметры контроллера. Подобное внешнее замыкание петли обратной связи целесообразно, когда включение в нее системы S затруднено по каким-либо обстоятельствам.

В [11] было показано, что при помощи такого рода обратной связи в виде адаптивного фотодетектирования можно осуществить оптимальное измерение фазы волнового пакета. Настоящая работа посвящена непосредственно аспекту управления, т.е. изучению эволюции состояния системы, подверженной действию обратной связи, замкнутой внутри контроллера.

Состояние системы S оказывается функцией истории регистрации событий. В организации такой

обратной связи может быть задействован (что сделано в настоящей работе) корпускулярно-волновой дуализм, как специфически квантовое явление, превращающий схему рис. 2 в весьма интересный объект изучения. Определенный и, возможно, простейший вариант квантовой обратной связи, организованный внутри контроллера, есть предмет настоящей работы. Она завершает цикл из трех работ, где квантовая обратная связь используется для контроля состояния атомарного конденсата Бозе–Эйнштейна (БЭК). В первой работе [12] конденсат в одной из двух локализованных мод зондируется оптическим пучком внутреннего канала интерферометра Маха–Цандера (MZI). Регистрация фотона в том или ином выходном канале интерферометра переключала параметры удерживающего конденсат потенциала. Сохраняя единство обозначений с работой [12], будем обозначать эти события символами \pm . Было показано, что надлежащий выбор этих параметров приводит к радикальной перестройке состояния конденсата. Не менее эффективный инструмент его контроля предложен в [9]. Препятствия из [12] модифицированы дополнительной оптической петлей, создающей когерентную обратную связь в зондирующем пучке. Иницируемые фоторегистрациями переключения происходят между различными фазовыми сдвигами в петле когерентной обратной связи. Сам конденсат уже не затронут внешней обратной связью, но еще нельзя говорить о реализации схемы рис. 2. Это делается в настоящей работе, где переключения между фазовыми сдвигами φ_{\pm} происходят во втором внутреннем канале MZI, не задействованном в зондировании конденсата. На рисунке 3 (как отсылка к схеме рис. 2) отмечены границы систем S и C .

Необходимы некоторые дополнительные комментарии касательно мотивации такого рода исследований. Организация автоконтроля систем с помощью искусственной обратной связи радикально меняет их свойства. Это в полной мере относится уже к классическим системам [13]. Часто новые свойства оказываются неожиданными и труднообъяснимыми. Обычная физическая интуиция помогает не всегда. В еще большей степени сказанное касается квантовых систем. Процесс генерации событий открытой квантовой системой обладает имманентной случайностью, природа которой лежит в самых фундаментальных основах квантовой физики. Организация обратной связи на основе этой случайности способна породить систему с совершенно неожиданными и потенциально ценными свойствами, как показано в [14]. Следовательно, вполне оправдан “свободный поиск” и накопление теоретических моделей квантовой обрат-

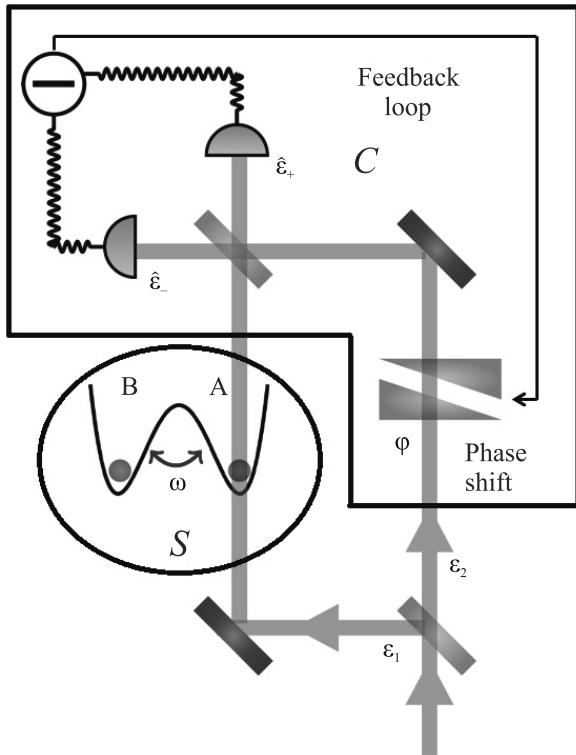


Рис. 3. (Цветной онлайн) Схема управления двухъямным атомарным конденсатом Бозе-Эйнштейна в интерферометре Маха-Цандера при помощи обратной связи, контролирующей фазовый сдвиг в свободном плече интерферометра

ной связи. К такого рода исследованиям относится и настоящая работа.

2. Модель. Действие обратной связи, рассматриваемой в данной работе, зависит от типа зарегистрированного события – в каком из двух выходных каналов интерферометра был зарегистрирован фотон. В соответствии с этим происходит переключение фазового сдвига, расположенного в свободном от конденсата плече интерферометра. Ясно, что тип события может быть описан бинарной классической переменной. Последовательность событий (история) оказывается связанной с эволюцией состояния самой контролируемой системы. Существует удобный формализм, приспособленный для описания такого рода гибридов квантовой и классической систем [15]. Предметом изучения в нем являются условные состояния $\hat{\rho}^{(\pm)}$, индексированные типом последнего по времени зарегистрированного события – типом фоторегистрации в детекторах D_{\pm} на выходе интерферометра. В таком простейшем подходе история редуцируется до последнего по времени события. Полная матрица плотности конденсата является суммой мат-

риц плотности условных состояний: $\hat{\rho} = \hat{\rho}^{(+)} + \hat{\rho}^{(-)}$, а вероятность того, что последняя фоторегистрация была в детекторе σ , есть $p_{\sigma} = Tr \hat{\rho}^{(\sigma)}$. Пространственная структура конденсата предполагается в виде двух локализованных мод a и b с операторами рождения и уничтожения $\hat{a}^{\dagger}, \hat{a}$ и $\hat{b}^{\dagger}, \hat{b}$ соответственно. Мода a зондируется оптическим пучком внутри интерферометра. Частота зондирующего излучения имеет большую отстройку от частот атомных резонансов (так называемый режим дисперсионного взаимодействия [16]). При этом реальные переходы с возбуждением атомов конденсата очень редки, а зондирующее излучение приобретает фазовый сдвиг, пропорциональный числу атомов в зондируемой моде [17].

В отсутствие обратной связи эволюция состояния конденсата в марковском приближении подчиняется управляющему уравнению (здесь и далее будем записывать управляющие уравнения в безразмерной форме):

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho} + i[\hat{H}, \hat{\rho}] = \sum_{\sigma=\pm} \left(2\hat{\mathcal{E}}_{\sigma}(\varphi) \hat{\rho} \hat{\mathcal{E}}_{\sigma}^{\dagger}(\varphi) - \{ \hat{\mathcal{E}}_{\sigma}^{\dagger}(\varphi) \hat{\rho} \hat{\mathcal{E}}_{\sigma}(\varphi), \hat{\rho} \} \right), \quad (1)$$

правую часть которого образует структура Линдблада, ответственная за необратимость эволюции. Фигурными скобками здесь и далее обозначены антикоммутаторы. Операторами Линдблада в этой структуре служат амплитуды выходных полей (см. рис. 3, оба светоделителя интерферометра предполагаются сбалансированными)

$$\hat{\mathcal{E}}_{\pm}(\varphi) \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{i\chi \hat{a}^{\dagger} \hat{a}} \pm e^{i\varphi} \right), \quad (2)$$

отвечающих событиям фоторегистраций в одном из двух детекторов на выходе MZI. $\hat{\mathcal{E}}_{\pm}(\varphi)$ сформированы выходным светоделителем как суперпозиции амплитуд внутренних пучков интерферометра. Эти амплитуды подверглись фазовым сдвигам: в зондирующем пучке сдвиг создается атомами моды a и предполагается пропорциональным их числу, χ – фазовый сдвиг, создаваемый одним атомом; φ – контролируемый фазовый сдвиг во втором пучке.

Марковское приближение в случае обратной связи не будет нарушено, если последняя достаточно быстрая. При этом следует от единого управляющего уравнения перейти к системе связанных уравнений на операторы условных состояний. Это можно сделать, заметив, что изменение состояния системы непосредственно в результате фоторегистрации

описывается так называемыми сэндвичными членами типа $\hat{\mathcal{E}}_\sigma(\varphi)\hat{\rho}\hat{\mathcal{E}}_\sigma^\dagger(\varphi)$. Действие обратной связи привязано к актам фоторегистрации и потому должно влиять на структуру именно сэндвичных слагаемых. Опираясь на эти соображения, можно записать управляющие уравнения в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{\rho}^{(+)} + \imath[\hat{H}, \hat{\rho}^{(+)}] &= \sum_{\sigma=\pm} \left(2\hat{\mathcal{E}}_+(\varphi_\sigma)\hat{\rho}^{(\sigma)}\hat{\mathcal{E}}_+^\dagger(\varphi_\sigma) - \right. \\ &\quad \left. - \{\hat{\mathcal{E}}_+^\dagger(\varphi_+)\hat{\mathcal{E}}_\sigma(\varphi_+), \hat{\rho}^{(+)}\} \right), \\ \frac{d}{dt}\hat{\rho}^{(-)} + \imath[\hat{H}, \hat{\rho}^{(-)}] &= \sum_{\sigma=\pm} \left(2\hat{\mathcal{E}}_-(\varphi_\sigma)\hat{\rho}^{(\sigma)}\hat{\mathcal{E}}_-^\dagger(\varphi_\sigma) - \right. \\ &\quad \left. - \{\hat{\mathcal{E}}_-^\dagger(\varphi_-)\hat{\mathcal{E}}_\sigma(\varphi_-), \hat{\rho}^{(-)}\} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

В отсутствие фазовых сдвигов во втором пучке операторами Линдблада являются $\hat{\mathcal{E}}_\pm(0)$. Связь с ними дается матрицами

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \hat{\mathcal{E}}_+(\varphi_{\sigma_1}) \\ \hat{\mathcal{E}}_-(\varphi_{\sigma_2}) \end{pmatrix} &= U(\varphi_{\sigma_1}, \varphi_{\sigma_2}) \cdot \begin{pmatrix} \hat{\mathcal{E}}_+(0) \\ \hat{\mathcal{E}}_-(0) \end{pmatrix}; \\ U(\varphi_{\sigma_1}, \varphi_{\sigma_2}) &= \\ \begin{pmatrix} \cos(\varphi_{\sigma_1}/2)e^{\imath\varphi_{\sigma_1}/2} & -\imath\sin(\varphi_{\sigma_1}/2)e^{\imath\varphi_{\sigma_1}/2} \\ -\imath\sin(\varphi_{\sigma_2}/2)e^{\imath\varphi_{\sigma_2}/2} & \cos(\varphi_{\sigma_2}/2)e^{\imath\varphi_{\sigma_2}/2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4)$$

В случае отсутствия обратной связи ($\varphi_+ = \varphi_- = \varphi$) матрица U унитарна. Иначе говоря, различный выбор φ соответствует различным “распутываниям” (*unraveling*) [5] операции фотодетектирования.

Для описания динамики конденсата, гамильтониана \hat{H} , выбрана простейшая модель. В ней отсутствует взаимодействие между атомами в локализованных модах. Глубины потенциальных ям обеих мод предполагаются одинаковыми. Поскольку полное число атомов конденсата не изменяется, соответствующие слагаемые, пропорциональные $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ и $\hat{b}^\dagger\hat{b}$, могут быть отброшены. В итоге оставлена только структура

$$\hat{H} = \omega(\hat{a}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{a}), \quad (5)$$

принципиально важная для дальнейшего и описывающая переходы атомов между модами. Здесь ω – безразмерный параметр, равный отношению скорости перехода атома между модами к частоте фоторегистраций.

Пользуясь (2), можно в явном виде развернуть структуру правых частей в (3):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{\rho}^{(+)} + \imath[\hat{H}, \hat{\rho}^{(+)}] &= e^{\imath\chi\hat{n}}\hat{\rho}e^{-\imath\chi\hat{n}} + \hat{\rho} - 4\hat{\rho}^{(+)} + \\ &\quad + e^{\imath\chi\hat{n}}\left(e^{-\imath\varphi_+}\hat{\rho}^{(+)} + e^{-\imath\varphi_-}\hat{\rho}^{(-)}\right) + \\ &\quad + \left(e^{\imath\varphi_+}\hat{\rho}^{(+)} + e^{\imath\varphi_-}\hat{\rho}^{(-)}\right)e^{-\imath\chi\hat{n}}, \\ \frac{d}{dt}\hat{\rho}^{(-)} + \imath[\hat{H}, \hat{\rho}^{(-)}] &= e^{\imath\chi\hat{n}}\hat{\rho}e^{-\imath\chi\hat{n}} + \hat{\rho} - 4\hat{\rho}^{(-)} - \\ &\quad - e^{\imath\chi\hat{n}}\left(e^{-\imath\varphi_+}\hat{\rho}^{(+)} + e^{-\imath\varphi_-}\hat{\rho}^{(-)}\right) - \\ &\quad - \left(e^{\imath\varphi_+}\hat{\rho}^{(+)} + e^{\imath\varphi_-}\hat{\rho}^{(-)}\right)e^{-\imath\chi\hat{n}}. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь $\hat{n} \doteq \hat{a}^\dagger\hat{a}$; $\hat{\rho}$ – полный статистический оператор атомарного конденсата: $\hat{\rho} = \hat{\rho}^{(+)} + \hat{\rho}^{(-)}$. Он получается “забвением” информации о типе последней фоторегистрации. Из (6) следует

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho} + \imath[\hat{H}, \hat{\rho}] = 2e^{\imath\chi\hat{n}}\hat{\rho}e^{-\imath\chi\hat{n}} - 2\hat{\rho}. \quad (7)$$

В этом уравнении отсутствуют следы обратной связи, что является результатом отмеченного забвения информации.

3. Случай быстрого разрушения когерентности. “Динамический” базис в пространстве состояний конденсата, диагонализующий гамильтониан (5), т.е. естественный при описании динамики, не совпадает с “кинетическим” базисом. Последний наиболее удобен для представления необратимой эволюции – правых частей (6) и (7). Диагональные матричные элементы операторов $\hat{\rho}$ и $\hat{\rho}^{(\pm)}$ в этом базисе эволюционируют независимо от недиагональных, которые претерпевают затухание – разрушение когерентности. Различие динамического и кинетического базисов представляет основную трудность при получении точных решений управляющих уравнений. Если сильно различны характерные масштабы времени гамильтоновой и диссипативной эволюции, тот или иной базис становится “главным”, что подсказывает соответствующую трансформацию и упрощение уравнений.

Мы рассмотрим ситуацию быстрого разрушения когерентности, когда главным оказывается кинетический базис. Это базис Фока по числам атомов в модах a и b . Будет предполагаться фиксированным полное число атомов в конденсате и использоваться краткое обозначение для векторов кинетического базиса: $|n\rangle \doteq |n\rangle_a \otimes |N-n\rangle_b$. Зондирование конденсата разрушает когерентность между разными n . Гамиль-

тониан генерирует эту когерентность, но относительно медленно: $|\omega| \ll 1$. Поэтому можно ограничиться диагональными и ближайшими к диагонали элементами матрицы плотности:

$$\hat{\rho} = \sum_{n=0}^N \left(p_n |n\rangle\langle n| + q_n |n+1\rangle\langle n| + \bar{q}_n |n\rangle\langle n+1| \right), \quad (8)$$

аналогично для $\hat{\rho}^{(\pm)}$, однако в присутствии обратной связи матричные элементы также получают зависимость от фазовых сдвигов φ_{\pm} . Черта над символом обозначает комплексное сопряжение. Уравнения $dq_n/dt = \dots$ и $dq_n^{(\pm)}/dt = \dots$ содержат в правых частях, наряду со слагаемыми $\propto \omega$, также и члены эволюционирующие со скоростью $\propto 1$ (в используемой нами безразмерной форме). В уравнениях $dp_n/dt = \dots$ и $dp_n^{(\pm)}/dt = \dots$ таких членов нет. Следовательно, q_n и $q_n^{(\pm)}$, как более быстрые переменные, оказываются подчинены медленной эволюции p_n и $p_n^{(\pm)}$. Это позволяет перейти к уравнениям, содержащим только диагональные элементы матриц плотности:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} p_n = \\ & = \frac{\omega^2}{2} \left[(n+1)(N-n)p_{n+1} + n(N-n+1)p_{n-1} \right] - \\ & \quad - \frac{\omega^2}{2} \left[(n+1)(N-n) + n(N-n+1) \right] p_n, \\ & \frac{d}{dt} p_n^{(+)}(\varphi_+, \varphi_-) + W_n(\varphi_+, \varphi_-) \cdot n(N-n+1) \times \\ & \quad \times \left(p_{n-1}^{(+)}(\varphi_+, \varphi_-) - p_n^{(+)}(\varphi_+, \varphi_-) \right) + \\ & \quad + W_{n-1}(\varphi_+, \varphi_-) \cdot (n+1)(N-n) \times \\ & \quad \times \left(p_{n+1}^{(+)}(\varphi_+, \varphi_-) - p_n^{(+)}(\varphi_+, \varphi_-) \right) = \\ & = 2 \left(V_n(\varphi_+, \varphi_-) - 2 \right) p_n^{(+)}(\varphi_+, \varphi_-) + \\ & \quad + 2 \left(1 + \cos(\chi n - \varphi_-) \right) p_n. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь использована связь $p_n^{(-)} = p_n - p_n^{(+)}$;

$$V_n(\varphi_+, \varphi_-) \doteq \cos(\chi n - \varphi_+) - \cos(\chi n - \varphi_-) \quad (10)$$

и

$$\begin{aligned} & W_n(\varphi_+, \varphi_-) \doteq \\ & \doteq \omega^2 \cdot \frac{\cos(\chi/2) V_{n+1/2}(\varphi_+, \varphi_-) - 2}{V_{n+1/2}^2(\varphi_+, \varphi_-) - 4 \cos(\chi/2) V_{n+1/2}(\varphi_+, \varphi_-) + 4}. \end{aligned} \quad (11)$$

В установившемся режиме $p_n = 1/(N+1)$.

4. Результаты и обсуждение. Нас далее будет интересовать воздействие обратной связи на распределение числа атомов по ямам, т.е. величины $p_n^{(+)}$ и $p_n^{(-)}$, в установившемся режиме. Удобным инструментом при исследовании распределений является информация Кульбака (расхождение Кульбака–Лейблера) [18]. Ее величина характеризует отклонение исследуемого распределения от некоторого реперного. Информация Кульбака всегда неотрицательна и обращается в нуль при совпадении распределений. В качестве реперных использовались поочередно два распределения. В обоих случаях обнаруживаются интересные следствия наличия обратной связи.

В первом варианте реперным выбрано однородное распределение полного числа атомов N между двумя ямами: $p_n = (1+N)^{-1}$. Напомним, что таковым является установившееся распределение в отсутствие информации о типе последней фоторегистрации. Целесообразность выбора диктуется естественным ожиданием обнаружить перекося условных распределений $p_n^{(+)}$ и $p_n^{(-)}$ с преимущественным заселением одной из ям. В сумме эти распределения, как своего рода “позитив”, и “негатив” должны давать однородное распределение. Важно понять степень преимущественного заселения одной из ям посредством используемого типа обратной связи. Информация Кульбака как функция φ_+ и φ_- для этого случая имеет вид

$$\begin{aligned} K^{(\pm)}(\varphi_+, \varphi_-) &= \sum_{n=0}^N P_n^{(\pm)}(\varphi_+, \varphi_-) \times \\ & \times \ln \left(P_n^{(\pm)}(\varphi_+, \varphi_-) \cdot (N+1) \right). \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь фигурируют нормированные на единицу распределения $P_n^{(\sigma)}(\varphi_+, \varphi_-) \doteq p_n^{(\sigma)}(\varphi_+, \varphi_-) / \sum_{n'} p_{n'}^{(\sigma)}(\varphi_+, \varphi_-)$. Величины $K^{(\pm)}(\varphi_+, \varphi_-)$ характеризуют степень неоднородности распределений $P_n^{(\pm)}(\varphi_+, \varphi_-)$. Заметим, что эту неоднородность условные распределения могут приобрести уже при $\varphi_+ = \varphi_-$, т.е. когда переключений нет и обратная связь фактически отсутствует. Поэтому целесообразно рассмотреть также вариант, где реперными распределениями, с которыми сравниваются $P_n^{(\sigma)}(\varphi_+, \varphi_-)$ выступают $P_n^{(\sigma)}(\varphi, \varphi)$, где $\varphi \doteq (\varphi_+ + \varphi_-)/2$. Это ближайшая к (φ_+, φ_-) точка диагонали плоскости фазовых сдвигов, в которой прекращаются их переключения и, соответственно, действие обратной связи. Для распределений в точках диагонали далее используются обозначения

ния $R_n^{(\pm)}(\frac{\varphi_+ + \varphi_-}{2})$, и соответствующая информация Кульбака

$$K_{fb}^{(\pm)}(\varphi_+, \varphi_-) = \sum_{n=0}^N P_n^{(\pm)}(\varphi_+, \varphi_-) \cdot \ln \left(\frac{P_n^{(\pm)}(\varphi_+, \varphi_-)}{R_n^{(\pm)}(\frac{\varphi_+ + \varphi_-}{2})} \right). \quad (13)$$

Расчеты сделаны для $N = 10$, $\chi = \pi/20$, $\omega = 0.07$. Поскольку $K^{(-)}(\varphi_+, \varphi_-) = K^{(+)}(2\pi - \varphi_-, 2\pi - \varphi_+)$ (аналогично для $K_{fb}^{(\pm)}$), результаты приведены только для $K^{(+)}(\varphi_+, \varphi_-)$ и $K_{fb}^{(+)}(\varphi_+, \varphi_-)$.

Диагонали $\varphi_+ = \varphi_-$ квадратных полей рис. 4а, б отвечают отсутствию обратной связи. Из рисунка 4а видно упомянутое выше отклонение $P_n^{(+)}(\varphi_+, \varphi_-) |_{\varphi_+ = \varphi_-}$ от однородного распределения. Однако, что весьма примечательно, максимальное отклонение в терминах информации Кульбака имеет место при наличии переключений фазовых сдвигов между $\varphi_+ \simeq -0.65\pi$ и $\varphi_- \simeq -0.2\pi$ (выбрана наиболее близкая к диагонали точка). $K_{fb}^{(+)}(\varphi_+, \varphi_-)$ является показателем расхождения распределения в точке (φ_+, φ_-) от распределения в ближайшей диагональной точке $(\frac{\varphi_+ + \varphi_-}{2}, \frac{\varphi_+ + \varphi_-}{2})$, где отсутствует обратная связь. Во всех диагональных точках $K_{fb}^{(+)}$, естественно, обращается в нуль, и максимумы лежат в стороне. Как видно из рис. 4б, они группируются в пары, расположенные по разные стороны диагонали на одинаковом расстоянии от нее. Вся картина инвариантна при сдвиге вдоль диагонали на $2\sqrt{2}\pi$, чему соответствует одновременное изменение φ_+ и φ_- и, следовательно, их полусуммы на 2π . Можно заметить, что нижний максимум из левой пары на рис. 4б имеет координату $\varphi_+ \simeq -0.65\pi$, а верхний максимум – координату $\varphi_- \simeq -0.2\pi$. Точка с этими координатами – максимум $K^{(+)}(\varphi_+, \varphi_-)$. Остается неясным – является ли это случайным совпадением или нет.

Вышеуказанное обстоятельство, что максимумы расхождений Кульбака–Лейблера лежат в стороне от главной диагонали, может быть потенциально использовано для приготовления состояния двухмодового конденсата, в котором атомы преимущественно находятся лишь в одной из ям. Заметим, что оптическое зондирование уже делает распределение атомов по ямам не равномерным. Обратная связь способна усилить эту неравномерность (что следует из большей величины максимумов на рис. 4б по сравнению с рис. 4а). При этом нет необходимости в реальном времени изменять сам формирующий оптическую ловушку потенциал, что является несомненным преимуществом предлагаемой схемы как нового

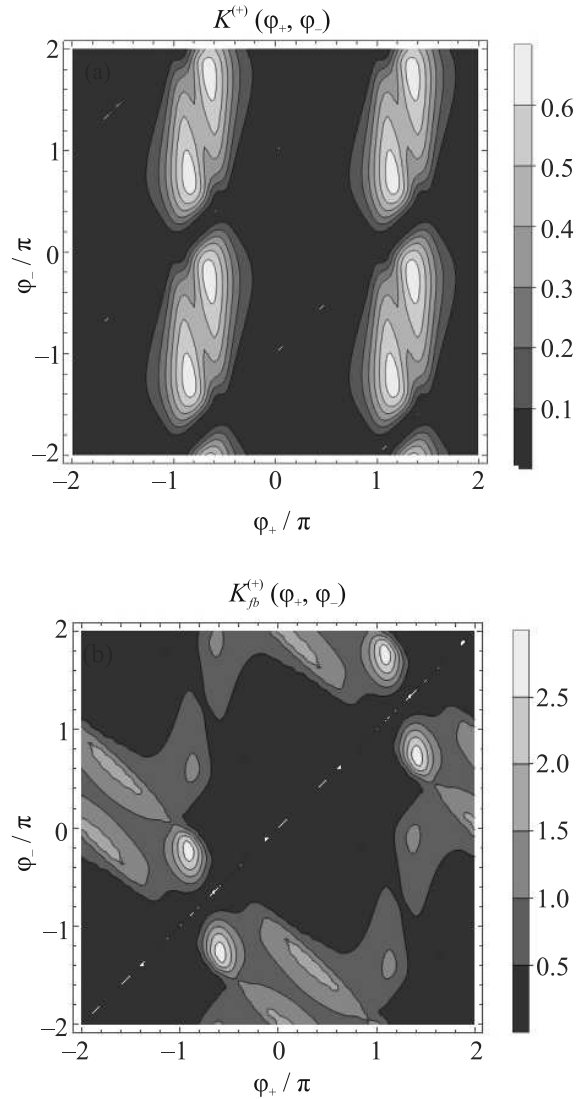


Рис. 4. (Цветной онлайн) Расхождения Кульбака–Лейблера между: (а) – распределениями $P_n^{(+)}(\varphi_+, \varphi_-)$ и $p_n = \frac{1}{N+1}$; (б) – распределениями $P_n^{(+)}(\varphi_+, \varphi_-)$ и $R_n^{(\pm)}(\frac{\varphi_+ + \varphi_-}{2})$, вычисленные при $\chi = \pi/20$, $\omega = 0.07$, $N = 10$

перспективного инструмента инженерии квантовых состояний.

5. Заключение. Рассмотренная модель интерферометрического контроля состояния атомарного бозе-конденсата с помощью системы обратной связи демонстрирует контринтуитивное явление. Обратная связь не затрагивает динамику конденсата (не меняет параметры гамильтониана) и не модифицирует его состояние сверх того, что диктуется “стандартной” реакцией системы на очередное событие фоторегистрации. Обратная связь инициирует переключения между различными распутываниями ин-

формационных событий. Система, как генератор событий, оказывается чувствительной к наличию такого переключения, что странно с классической точки зрения, поскольку манипуляции производятся над уже рассеянной системой излучением. Есть основания толковать это как исключительно квантовое явление: во-первых, понятие распутывания отсутствует в классике; во-вторых, зондирующее излучение, как неотъемлемая часть системы обратной связи, демонстрирует в нашей модели и волновые, и корпускулярные свойства. Первые позволяют вносить фазовые сдвиги в пучки, а вторые позволяют оперировать с хорошо локализованными во времени событиями фоторегистраций и привязывать к ним переключения фазовых сдвигов (переключения распутываний). И конденсат, и зондирующее излучение проявляют существенно квантовые свойства, что выражается в формировании квантовой запутанности между числом атомов в конденсате и фазой поля. Именно это обстоятельство и делает рассмотренную схему обратной связи рабочей и эффективной.

В плане дальнейших исследований представляет интерес переход от событий (+) и (-) как спецификаторов состояний $\hat{\rho}^{(+)}$ и $\hat{\rho}^{(-)}$ к более длинным историям. Есть основания ожидать, что обратная связь в этом случае обеспечит еще более сильный перекося условных распределений полного числа атомов между ямами.

Работа выполнена в рамках Государственного задания (проект # АААА-А21-121021800168-4) в Институте автоматизации и электрометрии СО РАН.

1. Н. Винер, *Кибернетика, или управление и связь в животном и машинном мире*, Советское радио, М. (1968).
2. J. Zhang, arXiv:1407.8536v3 (2014).
3. Y. Yamamoto, N. Imoto, and S. Machida, Phys. Rev. A **33**, 3243 (1986).

4. J. H. Shapiro, G. Saplakoglu, S.-T. Ho, P. Kumar, B. E. A. Saleh, and M. C. Teich, J. Opt. Soc. Am. B **4**, 1604 (1987).
5. H. M. Wiseman and G. J. Milburn, *Quantum Measurement and Control*, Cambridge University Press, Cambridge (2010).
6. K. Jacobs, *Quantum Measurement Theory and Its Applications*, Cambridge University Press, Cambridge (2015).
7. S. Lloyd, Phys. Rev. A **62**, 022108 (2000).
8. R. J. Nelson, Y. Weinstein, D. Cory, and S. Lloyd, Phys. Rev. Lett. **85**, 3045 (2000).
9. В. А. Томилин, Л. В. Ильичев, Квантовая электроника **50**, 537 (2020).
10. У. Росс Эшби, *Схема усилителя мыслительных способностей*, в сб. "Автоматы", К. Э. Шеннон, Дж. Маккарти, ред., Издательство иностранной литературы, М. (1956), с. 281 [W. Ross Ashby, *Design for an Intelligence-Amplifier*, in *Automata Studies*, ed. by C. E. Shannon and J. McCarthy, Ann. Math. Stud. Princeton University Press, Princeton, New Jersey (1956), v. 34, p. 215].
11. L. S. Martin, W. P. Livingston, S. Hacoheh-Gourgy, H. M. Wiseman, and I. Siddiqi, Nat. Phys. **16**, 1046 (2020).
12. V. A. Tomilin and L. V. Il'ichov, Ann. Phys. (Berlin) **528**, 619 (2016).
13. G. F. Franklin, J. D. Powell, and A. Emami-Naeini, *Feedback Control of Dynamic Systems*, 6th ed., Pearson, London (1999).
14. В. А. Томилин, Л. В. Ильичев, Письма в ЖЭТФ **94**, 734 (2011) [V. A. Tomilin and L. V. Il'ichov, JETP Lett. **94**, 676 (2012)].
15. L. Diósi, Preprint arXiv:1401.0476v1 (2014).
16. D. F. Walls and G. Milburn, *Quantum Optics*, Springer-Verlag, Berlin (1994).
17. M. R. Andrews, M. Mewes, N. J. van Druten, D. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, Science **273**, 5271 (1996).
18. S. Kullback and L. A. Leibler, *Information and Statistics*, Wiley, N.Y. (1959).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

П И С Ь М А
В
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

том 116

Выпуск 10

25 ноября 2022

*Журнал издается под руководством
Отделения физических наук РАН*

Главный редактор В. М. Пудалов

Заместители главного редактора
Г. Е. Воловик, В. П. Пастухов

Зав. редакцией *И. В. Подыниглазова*

Адрес редакции 119334 Москва, ул. Косыгина 2

тел./факс (499)-137-75-89

e-mail letters@kapitza.ras.ru

Web-страница <http://www.jetpletters.ac.ru>

Интернет-версия английского издания
<http://www.springerlink.com/content/1090-6487>

© Российская академия наук, 2022

© Редколлегия журнала “Письма в ЖЭТФ” (составитель), 2022

Особенности альфа-распада высоковозбужденных состояний ядра ^{10}Be

Д. М. Родкин^{+*1)}, Ю. М. Чувильский^{+*}

⁺Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова, 127055 Москва, Россия

^{*}Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына

МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 6 сентября 2022 г.

После переработки 4 октября 2022 г.

Принята к публикации 4 октября 2022 г.

В рамках оболочечной модели без инертного кора (МОБИК) рассчитан спектр ядра ^{10}Be в широком диапазоне энергий возбуждения. Для уточнения положения уровней использована процедура экстраполяции. Вычислены ширины альфа-распада резонансных состояний этого ядра, использовался разработанный авторами метод ортогональных функций кластерных каналов, который использует волновые функции МОБИК. Теоретически предсказана уникальная для альфа-распада легких ядер мода – испускание альфа-частиц не только в канал $\alpha + ^6\text{He}$, но и в канал $\alpha + ^6\text{He}^*(2^+)$. Она характерна для состояний аномальной, но играет заметную роль и в распаде состояний нормальной четности с большим спином, причем для некоторых таких резонансов второй канал оказывается доминирующим.

DOI: 10.31857/S123456782220013, EDN: lxmjgc

Высокоточные теоретические методы описания свойств легких ядер и ядерных реакций, вызываемых их столкновениями, активно развиваются в настоящее время. Важную роль среди этих методов играют подходы, называемые *ab initio*, основанные на использовании многочастичного уравнения Шредингера с реалистическими нуклон-нуклонными потенциалами и его решении с помощью мощных компьютерных кодов на широком функциональном базисе. Одним из основных методов, описывающих структуру легких ядер, является Модель Оболочек Без Инертного Кора [1, 2]. Используемые в данном подходе реалистические NN-потенциалы могут быть получены исходя из Киральной Эффективной Теории Поля [3–5] или из данных о нуклон-нуклонном рассеянии с использованием метода обратной J -матрицы [6], в текущей работе использовался потенциал Daejeon16 [7], относящийся к потенциалам первого типа. Этот потенциал был проверен в разнообразных расчетах различных свойств ядер с массами $A \leq 16$ и доказал свою эффективность для подобных задач.

Данные теоретические подходы открывают новые перспективы исследования свойств атомных ядер, лежащих близко к границе области нуклонной стабильности. Экспериментальное изучение таких ядер

является достаточно трудной задачей, разные эксперименты нередко дают противоречивые результаты, поэтому результаты теоретических расчетов могут служить хорошим ориентиром для уточняющих экспериментов, а иногда и “третьей стороной”.

Нижние состояния легких стабильных ядер экспериментально хорошо известны. Поэтому теоретические расчеты характеристик подобных состояний могут служить для проверки качества NN-потенциала и оценки скорости сходимости результатов расчетов для изучаемого класса ядерных систем.

Модель Оболочек Без Инертного Кора (МОБИК) и подобные ей методы, однако, не приспособлены для непосредственного описания распада ядерных состояний и ядерных реакций. Для решения таких задач были предложены разные *ab initio* подходы, описывающие процесс перехода в кластерные каналы. Среди них методы, которые объединяют МОБИК и Модель Резонирующих Групп (МРГ) [8], а именно, МОБИК/МРГ [9] и Модель Оболочек Без Инертного Кора с Континуумом (МОБИКК) [10] представляются наиболее развитыми, но их область применимости оказалась довольно узкой. В частности, в рамках этих схем крайне затруднен расчет характеристик распада ядерных состояний в каналы в случаях, когда масса легкого фрагмента $A_l > 3$. Это обстоятельство не позволяет проводить с их помощью систематические исследования альфа-распада. Авторами

¹⁾e-mail: rodkindm92@gmail.com

был разработан новый подход – Метод Ортогональных Функций Кластерных Каналов (МОФКК), который использует решения МОБИК модели и базис ортогонализированных волновых функций (ВФ) кластерных каналов [11–16]. Одним из его преимуществ является то, что он позволяет обойти указанные затруднения при исследовании значительного числа ядерных систем.

В предыдущих работах в рамках МОФКК мы рассматривали каналы альфа-распада на примере резонансных состояний ${}^7\text{Li}$ [16] (в данном случае более легким фрагментом оказывается тритон) и ${}^8\text{Be}$ [14]. В последней работе были проведены расчеты энергий связи, спектра, а также ширин альфа-распада большого числа состояний положительной четности, в том числе и для высоковозбужденных состояний. В данной работе представленные результаты вычисления характеристик резонансных состояний как положительной, так и отрицательной четности существенно более системы – ядра ${}^{10}\text{Be}$ для всех возможных каналов с образованием в конечном состоянии систем ${}^4\text{He} + {}^6\text{He}(0^+)$ и ${}^4\text{He} + {}^6\text{He}(2^+)$.

Ядро ${}^{10}\text{Be}$ представляет собой довольно популярный объект теоретических исследований, хотя его чаще изучали в рамках общих исследований ядер этой массы и в основном проводились расчеты характеристик стабильных нижних состояний, а не высоколежащих резонансов. Расчеты проводились как на базе самых разнообразных кластерных моделей – [17–19], так и оболочечных *ab initio* моделей – в рамках МОБИК [20, 21] или в рамках оболочечной Монте-Карло модели [22, 23]. В рамках более простых моделей проводились расчеты плотностей [24], спектроскопических факторов [25], асимптотических нормировочных коэффициентов [26] и ширин распада в ${}^4\text{He} + {}^6\text{He}(0^+)$ -канал [27, 28]. Наиболее важные экспериментальные данные о свойствах резонансных уровней ${}^{10}\text{Be}$ базируются на анализе реакций ${}^4\text{He}({}^6\text{He}, {}^6\text{He}){}^4\text{He}$, ${}^6\text{Li}({}^6\text{He}, {}^{10}\text{Be})d$, ${}^6\text{Li}({}^6\text{He}, {}^6\text{He} + {}^4\text{He})d$, ${}^7\text{Li}(t, \gamma){}^{10}\text{Be}$, сводка этих данных приведена в работе [29].

В настоящей работе представлены результаты *ab initio* вычислений энергий и ширин альфа-распада состояний ядра ${}^{10}\text{Be}$. Использовались МОБИК и МОФКК соответственно. *Ab initio* расчеты ширин альфа-распада состояний этого ядра проведены впервые. Изучены различные каналы распада, включая и те, в которых ядро-остаток находится в возбужденном состоянии, т.е. его “тонкая структура”.

Кратко представим основные моменты МОФКК подхода. Более подробно данный подход изложен

в работах [14, 16]. Основным элементом данного метода является построение трансляционно-инвариантных А-нуклонных ВФ произвольного двухфрагментного кластерного канала $A = A_1 + A_2$ в виде суперпозиции детерминантов Слейтера (ДС).

Волновые функции отдельного кластерного канала c_κ выражаются в следующем виде:

$$\Psi_{A,nl}^{c_\kappa} = \hat{A}\{\Psi_{A_1}^{\{k_1\}}\Psi_{A_2}^{\{k_2\}}\varphi_{nl}(\rho)\}_{J_cJMJT}, \quad (1)$$

где \hat{A} – антисимметризатор, $\Psi_{A_i}^{\{k_i\}}$ – трансляционно-инвариантная внутренняя ВФ фрагмента, задаваемая набором квантовых чисел $\{k_i\}$; $\varphi_{nlm}(\rho)$ – ВФ относительного движения. Волновая функция кластерного канала задается множеством квантовых чисел c_κ , которое включает в себя $\{k_1\}, \{k_2\}, n, l, J_c, J, M_J, T$, где J – полный момент, а J_c – спин канала.

Следует отметить, что ВФ (1) одного и того же канала c_κ с разными n не ортогональны. Создание ортонормированных базисных функций канала c_κ выполняется путем диагонализации матрицы обменного ядра

$$\begin{aligned} ||N_{nn'}|| &= \langle \Psi_{A,n'}^{c_\kappa} | \Psi_{A,n}^{c_\kappa} \rangle = \\ &= \langle \Psi_{A_1}^{\{k_1\}} \Psi_{A_2}^{\{k_2\}} \varphi_{nl}(\rho) | \hat{A}^2 | \Psi_{A_1}^{\{k_1\}} \Psi_{A_2}^{\{k_2\}} \varphi_{n'l}(\rho) \rangle. \end{aligned} \quad (2)$$

Собственные значения и собственные функции матрицы обменного ядра задаются следующими выражениями:

$$\varepsilon_{\kappa,k} = \langle \hat{A}\{\Psi_{A_1}^{\{k_1\}}\Psi_{A_2}^{\{k_2\}}f_l^k(\rho)\} | \hat{1} | \hat{A}\{\Psi_{A_1}^{\{k_1\}}\Psi_{A_2}^{\{k_2\}}\}f_l^k(\rho) \rangle; \quad (3)$$

$$f_l^k(\rho) = \sum_n B_{nl}^k \varphi_{nl}(\rho). \quad (4)$$

В результате ВФ ортонормированного базиса канала c_κ принимают вид

$$\Psi_{A,kl}^{SD,c_\kappa} = \varepsilon_{\kappa,k}^{-1/2} | \hat{A}\{\Psi_{A_1}^{\{k_1\}}\Psi_{A_2}^{\{k_2\}}f_l^k(\rho)\} \rangle; \quad (5)$$

Кластерный формфактор (КФФ), который описывает относительное движение кластеров А-нуклонной волновой функции, в форме разложения по осцилляторному базису выражается как:

$$\Phi_A^{c_\kappa}(\rho) = \sum_k \varepsilon_{\kappa,k}^{-1/2} \sum_{n,n'} B_{nl}^k B_{n'l}^k C_{AA_1A_2}^{n'l} \varphi_{nl}(\rho), \quad (6)$$

где коэффициент $C_{AA_1A_2}^{nl}$ выражается как:

$$C_{AA_1A_2}^{nl} = \langle \hat{A}\{\Psi_{A_1}^{\{k_1\}}\Psi_{A_2}^{\{k_2\}}\varphi_{nl}(\rho)\} | \Psi_A \rangle. \quad (7)$$

Спектроскопический фактор (СФ) определяется как норма КФФ, для обсуждаемого канала c_κ его можно записать в виде

$$S_l^{c_\kappa} = \sum_k \varepsilon_k^{-1} \sum_{nn'} C_{AA_1A_2}^{ml} C_{AA_1A_2}^{n'l} B_{nl}^k B_{n'l}^k. \quad (8)$$

Как и в наших предыдущих работах [15, 16], мы используем процедуру сшивки КФФ с асимптотической волновой функцией соответствующего канала. В общем случае процедура включает, во-первых, нахождение точек сшивки ρ_m , в которых логарифмические производные КФФ и функции

$$\Xi_l(\rho) = (F_l^2(\rho) + G_l^2(\rho))^{1/2}, \quad (9)$$

где $F_l(\rho)$ и $G_l(\rho)$ – регулярная и нерегулярная кулоновские функции, совпадают. Ширина резонанса рассчитывается с помощью выражения, подобного тому, которое используется в традиционной R-матричной теории:

$$\Gamma = \frac{\hbar^2}{\mu k_0} \Xi_l(\rho_m)^{-2} (\Phi_A^{c_\kappa}(\rho_m))^2. \quad (10)$$

В то же время следует подчеркнуть, что наш подход отличается от традиционного R-матричного тем, что выбор точки сшивки четко определяется упомянутой процедурой, а не является подгоночным параметром.

Таким образом, КФФ в ее новом (учитывающем требование ортогональности и нормировки – см. [11, 12]) определении позволяет сшить его с асимптотической волновой функцией на относительно малых расстояниях, где влияние ядерного взаимодействия мало по сравнению с кулоновскими эффектами и обменными эффектами, порожденными антисимметризацией.

В расчетах используется базис, включающий все десятиуклонные функции вплоть до числа дополнительных квантов $N^{\max} = 10$. Его размерность – $1.34 \cdot 10^9$ детерминантов Слейтера. Таким образом, характеристики состояния положительной четности вычислялись для базисов с $N^{\max} = 0, 2, 4, 6, 8, 10$, а отрицательной четности – для $N^{\max} = 1, 3, 5, 7, 9$. Расчеты МОБИК были выполнены с помощью кода Bigstick [30], который удобен для использования на многопроцессорных вычислительных кластерах.

В наших предыдущих работах [15, 16] было показано, что даже не слишком большое отклонение расчетной энергии резонанса от экспериментальной приводит к заметному изменению расчетных значений парциальных ширин его распада. По этой причине использование экспериментальных значений резонансных энергий для расчета ширин является предпочтительным. Если они не известны, то используются теоретические результаты.

Результаты МОБИК расчетов энергий состояний ядра ^{10}Be на максимальном доступном для расчетов базисе с $N^{\max} = 10$ сходятся не полностью, поэтому в дополнение проводится процедура их экстраполяции. В данной работе использовался метод экстраполяции “A5” [31] для получения полных энергий связи состояний (ТВЕ) ядра ^{10}Be в “бесконечном” базисе МОБИК модели.

Результаты применения развитого подхода для описания спектра ^{10}Be в диапазоне вплоть до $E^* \simeq 13$ МэВ представлены в табл. 1. В расчете воспроизводятся все экспериментально наблюдаемые в этом диапазоне уровни. Имеет место хорошее соответствие между экспериментальными E_{exp}^* и теоретически рассчитанными E_{th}^* энергиями связи состояний для большинства известных экспериментально уровней, со средней точностью в несколько сотен кэВ. Исключение составляет уровень 0_2^+ , для которого $E_{\text{exp}}^* - E_{\text{th}}^* = 1.75$ МэВ. За счет этой большой разницы возникает “инверсия” – изменение последовательности уровней по сравнению с экспериментальной. Формально в исследованной области энергий есть еще один пример инверсии уровней 10.15 и 10.57 МэВ. Однако в соответствии как с расчетными, так и с экспериментальными данными эти уровни лежат очень близко друг к другу. Для низколежащих уровней качество описания несколько выше, чем для высоколежащих. Характерным является превышение экспериментальных значений энергий связи над теоретическими, но это вызвано, по всей видимости, не с недостатками экстраполяционной процедуры, а со свойствами используемого NN-потенциала. Для основного состояния ^{10}Be разница составляет всего 53 кэВ. Столь высокая точность описания полных энергий связи нуклонно-стабильных ядер является характерной для потенциала Daejeon16. Расчеты указывают на существование в исследованном диапазоне значительного количества теоретически рассчитанных уровней, которым не находится явного соответствия. Для нескольких экспериментальных уровней, спин которых, согласно [29], определен недостаточно надежно (отмечены в табл. 1 индексом ^a), наши расчеты подтверждают корректность его идентификации. Единственному в данном диапазоне состоянию с энергией $E^* = 11.23$ МэВ с не идентифицированным спином, а также и неточно определенной шириной распада можно, по всей видимости, поставить в соответствие полученный в расчетах уровень 0_4^+ , фоном для которого является сильно перекрывающееся с ним чрезвычайно широкое (и, поэтому, не выделенное при анализе экспериментов) состояние 0_3^+ (см. ниже табл. 2).

Отсутствие в спектроскопических таблицах девяти полученных нами уровней (столбцы 4 и 5 табл. 1) может быть объяснено, хотя и предположительно, вполне естественными причинами. За исключением состояния 0_1^- , для всех уровней аномальной четности открыты либо s -, либо p -волновые нейтронные каналы распада, а для таких каналов характерны большие парциальные ширины, которые сильно затрудняют наблюдение таких резонансов. Для 0_1^- характерна противоположная ситуация – он распадается лишь в нейтронный d -волновой канал с, очевидно, весьма малой шириной. Малая ширина (см. ниже табл. 2) является препятствием для обнаружения также и для состояния 4_1^+ . Менее надежным представляется объяснение отсутствия в спектре состояния 2_4^+ . Возможно, оно, так же как и большинство других, обладает большой нейтронной шириной и перекрывается с состоянием 2_5^+ .

Сравнение результатов вычислений спектра уровней ядра ^{10}Be в представленном *ab initio* подходе с результатами расчетов в моделях с инертным кором демонстрирует более высокое качество описания экспериментальных данных в первом случае. Так, в работе [28] был проведен расчет спектра обсуждаемого ядра. Кором служила система ^4He , осцилляторный базис был ограничен однонуклонными функциями p - и $(2s - 1d)$ -оболочек. Использовался феноменологический гамильтониан из работы [32]. Наборы уровней в данном диапазоне энергий, полученные в двух подходах, почти совпадают. Однако феноменологический подход порождает два не наблюдаемых уровня в нижней, хорошо исследованной части спектра, и приводит к появлению нескольких случаев инверсии.

Основной целью данной работы является изучение альфа-распада резонансных состояний ^{10}Be в рамках *ab initio* подхода. В первую очередь исследованы процессы распада в канал $\alpha + ^6\text{He}(0^+)$. Он открыт для достаточно высоко лежащих состояний, его экспериментально измеренная пороговая энергия $Q = -7.4133$ МэВ. Также в него не могут распадаться состояния аномальной четности. Таким образом, вплоть до энергии возбуждения ~ 13 МэВ остается довольно небольшой список распадающихся в этот канал резонансов, представленный в табл. 2. Как указано выше, в вычислениях ширин мы предпочитали использовать, по возможности, известные экспериментальные значения энергии испускания α -частиц $E_{\text{exp}}^{\text{He}}$. Для остальных случаев (они помечены в табл. 2 индексом b) расчеты ширин были проведены для теоретически рассчитанных значений $E_{\text{th}}^{\text{He}}$.

В верхней части исследуемого спектра альфа-распад состояний ^{10}Be имеет тонкую структуру –

Таблица 1. Сравнение теоретического и экспериментального спектров ядра ^{10}Be

J^π	TBE_{th}	E_{th}^*	TBE_{exp}	E_{exp}^*
0_1^+	65.030	0.00	64.977	0.00
2_1^+	61.302	3.72	61.609	3.37
0_2^+	60.599	4.43	58.797	6.18
1_1^-	59.160	5.87	59.017	5.96
2_2^+	58.749	6.28	59.018	5.96
2_1^-	58.535	6.49	58.713	6.26
3_1^-	57.314	7.71	57.606	7.37
2_3^+	56.531	8.49	57.435	7.54
1_1^+	56.322	8.71	—	—
2_2^-	55.935	9.09	—	—
4_1^+	55.398	9.63	—	—
2_4^+	55.187	9.84	—	—
3_1^+	55.068	9.96	—	—
4_1^-	55.033	9.99	55.707	9.27 ^a
2_5^+	54.684	10.34	55.417	9.56
1_2^-	53.895	11.13	54.455	10.57 ^a
3_2^-	53.821	11.21	54.827	10.15
2_3^-	53.579	11.45	—	—
1_2^+	53.327	11.70	—	—
0_1^-	53.020	12.01	—	—
0_3^+	52.843	12.18	—	—
0_4^+	52.798	12.23	53.798	11.23
4_2^+	52.505	12.52	53.218	11.76 ^a
5_1^-	52.296	12.73	53.047	11.93 ^a

он может проходить не только в канал $\alpha + ^6\text{He}(0^+)$, но и в канал $\alpha + ^6\text{He}^*$ ($E^* = 1.797$ МэВ, $J^\pi = 2^+$). Особенности этого канала являются более высокая пороговая энергия – 9.055 МэВ, а также то, что в этот канал могут распадаться состояния аномальной четности. Результаты расчетов парциальных ширин распада резонансов в этот канал также представлены в табл. 2.

В последнем столбце табл. 2 приведены измеренные к настоящему времени полные ширины распада резонансных состояний $\Gamma_{\text{exp}}^{\text{tot}}$, представленные в таблицах работы [29], а также основные моды распада. Эти ширины включают в себя парциальные ширины как альфа-распада, так и нейтронные, соотношения между которыми неизвестны. Это затрудняет прямое сравнение полученных нами результатов с экспериментальными. Можно, однако, указать, что ни в одном из случаев полученная нами парциальная ширина альфа-распада не превышает полную. С другой стороны, отсутствие в спектроскопических таблицах ссылки на наличие нейтронного распада какого-либо уровня, по нашему мнению, не означает недооценку в расчетах ширины альфа-распада, поскольку экспе-

Таблица 2. Энергии распада (МэВ), спектроскопические факторы (SF), парциальные ширины распада (кэВ) в каналы $\alpha + ^6\text{He}$ и $\alpha + ^6\text{He}^*$, характеризующие угловым моментом l и спином канала S резонансных состояний ^{10}Be

J^π	E^{He}	$l(S)$	SF	Γ^{He}	E^{He^*}	$l(S)$	SF	Γ^{He^*}	Decay $\Gamma_{\text{exp}}^{\text{tot}}$
2_3^+	0.13	2(0)	0.344	0.0002	-1.67	—	—	—	n, α 6.3 ± 0.8
2_2^-	—	—	—	—	0.035 ^b	1(2) 3(2)	0.0058 0.413	$8.8 \cdot 10^{-12}$ $7.4 \cdot 10^{-14}$	—
4_1^+	2.37 ^b	4(0)	0.246	8.8	0.572 ^b	2(2) 4(2)	0.529 0.072	4.77 $6 \cdot 10^{-4}$	—
2_4^+	2.58 ^b	2(0)	0.067	18.1	0.783 ^b	0(2) 2(2) 4(2)	0.130 0.108 0.171	63.5 4.29 $6.7 \cdot 10^{-3}$	—
3_1^+	—	—	—	—	0.902 ^b	2(2) 4(2)	0.561 0.556	13.55 0.011	—
4_1^-	—	—	—	—	0.061	3(2) 5(2)	0.652 0.043	$3.6 \cdot 10^{-9}$ $1.2 \cdot 10^{-16}$	n 150 ± 20
2_5^+	2.15	2(0)	0.027	25.3	0.351	0(2) 2(2) 4(2)	0.0019 0.089 0.0038	0.031 0.025 $2.6 \cdot 10^{-7}$	n, α 141 ± 10
1_2^-	3.11	1(0)	0.232	892	1.31	1(2) 3(2)	0.0417 0.005	20.5 0.063	—
3_2^-	2.74	3(0)	0.269	71.8	0.941	1(2) 3(2) 5(2)	0.065 0.112 0.095	15 0.345 $1.2 \cdot 10^{-4}$	α 296 ± 15
2_3^-	—	—	—	—	2.39 ^b	1(2) 3(2)	0.122 0.024	107 0.285	—
1_2^+	—	—	—	—	2.64 ^b	2(2)	0.017	5.55	—
0_3^+	3.77	0(0)	0.161	764	1.97	2(2)	0.200	145	—
0_4^+	3.77	0(0)	0.059	216	1.97	2(2)	0.054	20.4	α 200 ± 80
4_2^+	4.35	4(0)	0.389	42.2	2.55	2(2) 4(2)	0.0013 0.461	0.728 2.68	α 121 ± 10
5_1^-	4.52	5(0)	0.118	2.21	2.72	3(2) 5(2)	0.722 0.115	136 0.102	α 200 ± 80

риментальное измерение парциальных ширин распада в нейтронные каналы является значительно более трудной задачей, чем измерение ширин альфа-распада.

Весьма интересными представляются результаты исследования распада $^{10}\text{Be} \rightarrow \alpha + ^6\text{He}^*(2^+)$. Оказывается, что ширины распада некоторых состояний аномальной четности не малы (> 10 кэВ), а в случае резонанса 2_3^- эта величина достигает 107 кэВ. Таким образом, обсуждаемый процесс доступен для экспериментального наблюдения.

Полученные в данной работе результаты указывают на еще более интересный эффект – конкуренцию двух обсуждаемых мод распада состояний нормальной четности. Несмотря на существенно меньшую по сравнению с каналом $\alpha + ^6\text{He}(0^+)$ энергию

вылетающих α -частиц, в ряде примеров эта мода вносит существенный вклад в полную ширину распада, а для состояния 5^- – доминирует. Причиной этого являются, очевидно, более низкие центробежные барьеры, характерные для распада высокоспиновых резонансов в этот канал. В итоге перспективы наблюдения тонкой структуры распада таких состояний представляются хорошими. Отметим еще, что из-за высокого центробежного барьера в нейтронном канале, очевидно, можно утверждать, что нейтронная ширина распада состояния 5^- достаточно мала. Следовательно, именно учет парциальной ширины распада в канал $\alpha + ^6\text{He}^*$ приводит в соответствие расчетные и экспериментальные данные.

Сравнение результатов расчета спектроскопических факторов и ширин альфа-распада, полученных

в феноменологических схемах (в частности, в подходе работы [28]) приводит к следующим выводам. В значительном числе случаев спектроскопические факторы отличаются в несколько раз. Расчеты парциальных ширин в рамках обычной R-матричной схемы базируются на данных о спектроскопических факторах и значениях одночастичных приведенных ширин в точке сшивки (на радиусе канала r_c). Выясним различия нашего подхода и таких схем на простом примере, когда ядерная часть потенциала взаимодействия фрагментов распада выбирается в виде прямоугольной ямы. В таком случае парциальная ширина равняется:

$$\Gamma = 2kP_l\gamma^2 = 2kP_lSF\gamma_0(r_c)^2, \quad (11)$$

где k – волновой вектор относительного движения, P_l – проницаемость барьера, $\gamma_0(r_c)$ – одночастичная приведенная ширина. При этом одночастичная приведенная ширина записывается как

$$\gamma_0(r_c)^2 = \frac{\hbar^2}{M_c r_c} \frac{1}{2} r_c^3 (\Phi_A^{c_k}(r_c))^2 \approx \frac{\hbar^2}{M_c r_c}. \quad (12)$$

Несколько примеров, позволяющих сравнить результаты таких упрощенных расчетов ширин альфа-распада состояний 2_5^+ , 0_3^+ , 4_2^+ и 5_1^- в канал ${}^4\text{He} + {}^6\text{He}$ с полученными в рамках последовательного расчета, включающего в себя процедуру сшивки кластерного формфактора с асимптотической волновой функцией в точке совпадения логарифмических производных, приведены в табл. 3. Энергии распада и спектроскопические факторы для всех схем вычисления – фиксированы. Величины, соответствующие выбору радиуса канала r_c в этой точке помечены индексом 1, а в точке $r_c = 6$ фм – эта точка была выбрана в работе [28] в результате подгонки полного набора известных ширин распада состояний ядра ${}^{10}\text{Be}$ – индексом 2. Как видно из таблицы 3, применение упрощенной схемы для каналов с малым орбитальным моментом $l = 0 \div 2$ приводит к удовлетворительным результатам. Для каналов с большим орбитальным моментом $l = 4.5$ эта упрощенная схема дает завышенные результаты при корректном выборе значения радиуса канала – без процедуры подгонки приближение (12) оказывается грубым.

Однако еще большее влияние на результаты расчета ширин альфа-распада высокоспиновых состояний оказывает отклонение точки сшивки КФФ и асимптотической функции в рамках процедуры подгонки. Действительно, в представленных примерах точка сшивки $r_c = 6$ фм находится в районе внешней точки поворота, где значение $\Xi_l(\rho_m)^{-2}$ становится

Таблица 3. Результаты расчета ширин альфа-распада ядра ${}^{10}\text{Be}$ для различных схем сшивки, r_c (фм) Γ_i (кэВ)

J^π	SF	r_1	Γ_{He}	Γ_{He}^1	Γ_{He}^2
2_5^+	0.027	3.74	25.3	18.6	33.94
0_3^+	0.161	3.66	764	793	532
4_2^+	0.388	4.02	42.2	110	477
5_1^-	0.118	4.08	2.21	5.73	61.2

очень большим. В итоге, при подгонке радиуса канала под экспериментальные данные, относящиеся к состояниям с большим спином, могут возникать резкие искажения реальной картины распада.

Перечислим основные результаты проведенных исследований.

1. В рамках МОБИК с использованием потенциала Daejeon16 проведены *ab initio* расчеты спектра системы ${}^{10}\text{Be}$ вплоть до энергии возбуждения ~ 13 МэВ. В расчете успешно воспроизводятся все наблюдаемые в этом диапазоне уровни и, почти точно, их последовательность. Предсказывается существование еще нескольких уровней.

2. Впервые проведены *ab initio* вычисления ширин альфа-распада всех полученных состояний этого ядра. Для этого были изучены все открытые каналы альфа-распада этих состояний. Использовался разработанный для задач такого рода Метод Ортогональных Функций Кластерных Каналов.

3. Изучены ширины канала распада $\alpha + {}^6\text{He}^*(2^+)$, включая и распад состояний аномальной четности, а также тонкая структура альфа-распада высоковозбужденных состояний нормальной четности ядра ${}^{10}\text{Be}$. Показано, что ширина распада некоторых резонансов в этот канал, несмотря на существенно меньшую по сравнению с каналом $\alpha + {}^6\text{He}(0^+)$ энергию вылетающих α -частиц, не мала. Для определенных состояний нормальной четности эта мода распада вносит существенный вклад в полную ширину распада, а для состояния 5^- – доминирует. Обнаруженный эффект доступен для экспериментального наблюдения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 22-22-00096, <https://rscf.ru/project/22-22-00096/>.

Авторы выражают благодарность А. М. Широкову, А. И. Мазуру и И. А. Мазуру за предоставленный ими NN-потенциал Daejeon16 и К. В. Джонсону за его высокопроизводительный оболочечный код Bigstick и консультации, касающиеся его применения в расчетах МОБИК.

1. C. Stump, J. Braun, and R. Roth, Phys. Rev. C **93**, 021301 (2016).

2. P. Navratil, S. Quaglioni, I. Stetcu, and B. Barrett, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **36**, 083101 (2009).
3. R. Machleidt and D. R. Entem, *Phys. Rep.* **503**, 1 (2011).
4. D. R. Entem and R. Machleidt, *Phys. Rev. C* **66**, 014002 (2002).
5. D. R. Entem and R. Machleidt, *Phys. Rev. C* **68**, 041001 (2003).
6. A. M. Shirokov, J. P. Vary, A. I. Mazur, and T. A. Weber, *Phys. Lett. B* **644**, 33 (2007).
7. A. M. Shirokov, I. J. Shin, Y. Kim, M. Sosonkina, P. Maris, and J. P. Vary, *Phys. Lett. B* **761**, 87 (2016).
8. J. A. Wheeler, *Phys. Rev.* **52**, 1107 (1937).
9. S. Quaglioni and P. Navratil, *Phys. Rev. C* **79**, 044606 (2009).
10. S. Baroni, P. Navratil, and S. Quaglioni, *Phys. Rev. C* **87**, 034326 (2013).
11. Д. М. Родкин, Ю. М. Чувильский, *Письма в ЖЭТФ* **108**(7), 459 (2018).
12. D. M. Rodkin and Yu. M. Tchuvil'sky, *J. Phys.: Conf. Ser.* **966**, 012022 (2018).
13. D. M. Rodkin and Yu. M. Tchuvil'sky, *Phys. Lett. B* **788**, 238 (2019).
14. D. M. Rodkin and Yu. M. Tchuvil'sky, *Chin. Phys. C* **44**, 12410 (2020).
15. D. M. Rodkin, Yu. M. Tchuvil'sky, *Phys. Rev. C* **103**, 024304 (2021).
16. D. M. Rodkin and Yu. M. Tchuvil'sky, *Phys. Rev. C* **104**, 044323 (2021).
17. Y. Kanada-En'yo, H. Horiuchi, and A. Dote, *Phys. Rev. C* **60**, 064304 (1999).
18. N. Itagaki, S. Hirose, T. Otsuka, S. Okabe, and K. Ikeda, *Phys. Rev. C* **65**, 044302 (2002).
19. P. Descouvemont and N. Itagaki, *Prog. Theor. Exp. Phys.* **2**, 023D02 (2020).
20. E. Caurier, P. Navratil, W. Ormand, and J. Vary, *Phys. Rev. C* **66**, 024314 (2002).
21. P. Navratil and W. Ormand, *Phys. Rev. C* **68**, 034305 (2003).
22. L. Liu, *Chin Phys. Lett.* **31**(8), 082102 (2014).
23. L. Liu, T. Otsuka, N. Shimizu, Y. Utsuno, and R. Roth, *J. Phys.: Conf. Ser.* **445**, 012005 (2013).
24. V. K. Lukyanov, D. N. Kadrev, E. V. Zemlyanaya, K. Spasova, K. V. Lukyanov, A. N. Antonov, and M. K. Gaidarov, *Phys. Rev. C* **91**, 034606 (2015).
25. J. Li, C. Bertulani, and F. Xu, *Phys. Rev. C* **105**, 024613 (2022).
26. N. Timofeyuk, *Phys. Rev. C* **88**, 044315 (2013).
27. Yu. M. Tchuvil'sky and A. Volya, *JPS Conf. Proc.* **6**, 030055 (2015).
28. A. Volya and Yu. M. Tchuvil'sky, *Physics of Atomic Nuclei* **79**, 5, 772 (2016).
29. D. R. Tilley, J. H. Kelleys, J. L. Godwinac, D. J. Millener, J. E. Purcellae, C. G. Sheuac, and H. R. Wellerac, *Nuclear Physics A* **745**, 155 (2004).
30. C. W. Johnson, W. E. Ormand, K. S. McElvain, and H. Shan, arXiv: 1801.08432 (2018).
31. I. J. Shin, Y. Kim, P. Maris, J. P. Vary, C. Forssen, J. Rotureau, and N. Michel, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **44**, 075103 (2017).
32. Y. Utsuno and S. Chiba, *Phys. Rev. C* **83**, 021301 (2011).

Результат эксперимента Нейтрино-4 и космологические ограничения на стерильные нейтрино (Миниобзор)

А. П. Серебров¹⁾, Р. М. Самойлов, М. Е. Чайковский, О. М. Жеребцов

Петербургский институт ядерной физики Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”,
188300 Гатчина, Россия

Поступила в редакцию 4 октября 2022 г.

После переработки 4 октября 2022 г.

Принята к публикации 6 октября 2022 г.

Представлен краткий анализ результата эксперимента Нейтрино-4 и результатов других экспериментов по поиску стерильного нейтрино. Сделана оценка вклада в плотность энергии Вселенной стерильных нейтрино с параметрами $\Delta m_{14}^2 \approx 7.3 \text{ эВ}^2$ и $\sin^2 2\theta_{14} \approx 0.36$, измеренными в эксперименте Нейтрино-4. Обсуждается проблема противоречия между измеренными параметрами стерильного нейтрино и наблюдаемыми космологическими ограничениями. Этой статьей мы хотим привлечь внимание к ситуации, возникающего противоречия между экспериментом и теорией, с целью поиска теоретических обоснований существования стерильного нейтрино в области масс порядка нескольких электронвольт, а также к необходимости значительного увеличения точности эксперимента.

DOI: 10.31857/S1234567822220025, EDN: lxxrle

1. Введение. Начиная с эксперимента LSND в 2001 г., накопилось достаточно много указаний на возможность существования стерильного нейтрино. Аномалии наблюдались в нескольких ускорительных и реакторных экспериментах: LSND на уровне достоверности 3.8σ [1], MiniBooNE 4.7σ [2], реакторная аномалия (РАА) 3σ [3, 4], а также в экспериментах с радиоактивными источниками GALLEX/GNO, SAGE 3.2σ и BEST [5–7].

В 2018 году в эксперименте Нейтрино-4 [8] наблюдался прямой процесс осцилляций с достаточно высокой частотой. Это было первое прямое наблюдение эффекта осцилляций реакторных антинейтрино в стерильное состояние, в котором можно было определить одновременно частоту и амплитуду колебаний. Параметры этого процесса составили $\Delta m_{14}^2 \approx 7.26 \text{ эВ}^2$ и $\sin^2 2\theta_{14} \approx 0.38$ при CL 3.5σ . Был предложен и реализован метод когерентного сложения результатов измерений, позволивший непосредственно наблюдать процесс осцилляций. В 2021 году было опубликовано [9] подробное описание эксперимента, начиная от подготовительных операций до конечного результата с детальным анализом возможных систематических ошибок и МС моделированием. Результат был подтвержден: на уровне 2.9σ с параметрами $\Delta m_{14}^2 = (7.3 \pm 0.13_{\text{st}} + 1.16_{\text{sys}}) \text{ эВ}^2 = (7.3 \pm 1.17) \text{ эВ}^2$ и $\sin^2 2\theta_{14} = 0.36 \pm 0.12_{\text{stat}} (2.9\sigma)$. Статистический ана-

лиз на основе Монте-Карло дал оценку уровня достоверности в 2.7σ .

В работе 2022 г. [10] представлен анализ результатов, полученных в эксперименте “Нейтрино-4”, в сравнении с результатами экспериментов NEOS, DANSS, STEREO, PROSPECT на реакторах, экспериментами MiniBooNE, LSND, MicroBooNE на ускорителях, с экспериментом IceCube и экспериментом BEST с источником нейтрино ^{51}Cr . Объединением результата эксперимента Нейтрино-4 и результата эксперимента BEST $\sin^2 2\theta_{14} = 0.34^{+0.14}_{-0.09}$, можно получить уточнение амплитуды осцилляций: $\sin^2 2\theta_{14} = 0.35^{+0.09}_{-0.07} (4.9\sigma)$. Было показано, что результаты вышеупомянутых прямых экспериментов по поиску стерильных нейтрино согласуются в рамках нейтринной модели $3 + 1$ при имеющейся экспериментальной точности. Параметры стерильного нейтрино позволяют оценить массу стерильного нейтрино $m_4 = (2.70 \pm 0.22) \text{ эВ}$ и эффективную массу электронного нейтрино $m_{4\nu_e} = (0.82 \pm 0.16) \text{ эВ}$. Наконец, можно представить PMNS матрицу нейтринной модели $3 + 1$ и схему смешивания флейверов.

Следует отметить, что полученное в реакторном эксперименте значение $\sin^2 2\theta_{14}$ вступает в противоречие с интерпретируемыми на основе Солнечной модели, результата измерений солнечных нейтрино. Но главной проблемой для полученного экспериментального результата является ограничение на стерильное нейтрино из космологии. Рассмотрению этой

¹⁾e-mail: serebrov_ap@npni.nrcki. ru

проблемы и определению роли стерильного нейтрино в космологии посвящена эта статья.

2. Результаты эксперимента Нейтрино-4 в сравнении с результатами других экспериментов. Подробное сравнение результатов эксперимента Нейтрино-4 с результатами других экспериментов представлено в нашей работе [10]. Здесь мы ограничимся только двумя иллюстрациями: демонстрацией экспериментальной кривой осцилляций (рис. 1) и сравнением результатов эксперимента Нейтрино-4 с результатами других экспериментов в графической форме (рис. 2).

На рисунке 2 область параметров стерильных нейтрино выделена синим цветом. Эта область определяется экспериментами Троицк, KATRIN, BEST, DANSS и результатом эксперимента “Нейтрино-4” и

находится в области параметров: $m_{14}^2 = (7.3 \pm 0.13_{\text{st}} + 1.16_{\text{sys}}) \text{эВ}^2$, $\sin^2 2\theta_{14} = 0.36 \pm 0.12_{\text{stat}}$. Красный эллипс соответствует уровню достоверности 95% в эксперименте Нейтрино-4 с учетом систематической ошибки. Важно отметить, что результат эксперимента KATRIN [11, 12] не исключает область параметров, полученную в эксперименте Нейтрино-4.

3. Матрица PMNS в модели нейтрино 3 + 1. В работе [10] полученные параметры осцилляций были использованы для получения PMNS матрицы в модели нейтрино 3 + 1. Для дальнейшего анализа роли стерильного нейтрино в космологии, мы будем использовать полученную матрицу и схему смешивания ароматов активных и стерильного нейтрино для прямой иерархии масс (рис. 3).

$$U_{\text{PMNS}}^{(3+1)} = \begin{pmatrix} 0.782^{+0.017}_{-0.016} & 0.524^{+0.017}_{-0.016} & 0.148^{+0.004}_{-0.004} & 0.301^{+0.035}_{-0.035} \\ 0.484^{+0.028}_{-0.034} & 0.473^{+0.027}_{-0.036} & 0.732^{+0.016}_{-0.025} & 0.074^{+0.021}_{-0.021} \\ 0.280 \div 0.330 & 0.678 \div 0.705 & 0.622 \div 0.657 & 0 \div 0.194 \\ 0.210 \div 0.273 & 0.060 \div 0.203 & 0.104 \div 0.236 & 0.931 \div 0.951 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Следует отметить важнейшие особенности этой схемы смешивания ароматов активных нейтрино и стерильного нейтрино, проиллюстрированные на рис. 3. Во-первых, массовые состояния m_1 , m_2 , m_3 представляют собой смесь электронных, мюонных и тау флейворов с малой долей стерильного состояния. Поэтому массовые состояния m_1 , m_2 , m_3 обладают слабым взаимодействием, в то время как массовое состояние m_4 в основном стерильное и обладает слабым взаимодействием только за счет малого вклада электронных, мюонных и тау флейворов. В результате стерильные нейтрино m_4 , возникающие в результате осцилляций активных нейтрино, будут достаточно долго распространяться в космической плазме до взаимодействия и обратного превращения в активные нейтрино. Это обстоятельство создает возможность накопления стерильных нейтрино и возможность их отделения от космической плазмы на более ранней стадии по сравнению с активными нейтрино.

4. Роль стерильного нейтрино в космологии. Как хорошо известно, процесс осцилляций нейтрино в веществе изменяется в результате взаимодействия нейтрино с веществом (эффект Михеева–Смирнова–Вольфенштейна). Особенно ярко этот процесс проявляется в космической плазме. Начнем изучение этого процесса со случая двух нейтрино. Здесь и в дальнейшем мы будем опираться

на известную обзорную публикации [13] и монографию [14].

В двухнейтринном случае эффективная матрица смешивания определяется одним углом:

$$\begin{pmatrix} |\nu_e\rangle \\ |\nu_s\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_m & \sin \theta_m \\ -\sin \theta_m & \cos \theta_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\nu_1\rangle \\ |\nu_4\rangle \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Естественной является нумерация состояний, в которой в вакууме эффективные состояния перейдут в соответствующие массовые состояния, т.е. $|\nu_1\rangle \rightarrow |\nu_{m1}\rangle$ и $|\nu_4\rangle \rightarrow |\nu_{m4}\rangle$. В массовом базисе гамильтониан нейтрино имеет вид:

$$H = H_m + U^+ V U, \quad (3)$$

где вклад H_m отвечает за разность энергий связанную с массами нейтрино, и в массовом базисе имеет вид:

$$H_m = \text{diag} \left(\frac{m_1^2}{E}, \frac{m_4^2}{E} \right). \quad (4)$$

V – матрица взаимодействия, диагональная во флейворном базисе, а U – матрица смешивания.

Для двухнейтринной схемы матрица взаимодействия имеет вид [14]:

$$\begin{aligned} V &= \text{diag}\{V_e, 0\}, \\ V_e &= -25 \cdot 3.5 \cdot G_f^2 \cdot T^4 \cdot E. \end{aligned} \quad (5)$$

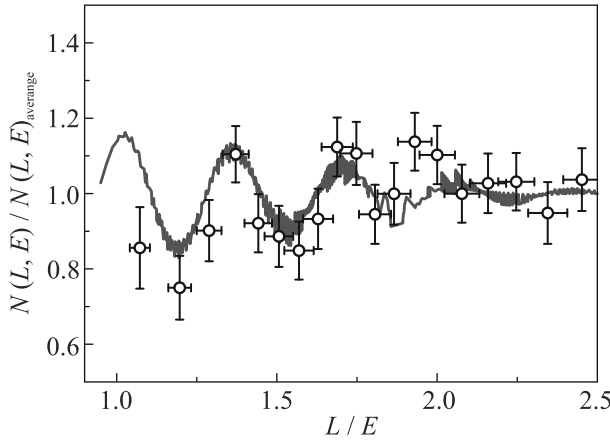


Рис. 1. (Цветной онлайн) Осцилляционная кривая нейтринного сигнала. Красная линия – ожидаемая зависимость при $\Delta m_{14}^2 = 7.3 \text{ эВ}^2$, $\sin^2 2\theta = 0.36$, разрешение 250 кэВ, $\chi^2/\text{DoF} = 20.61/17(1.21)$, $\text{GoF} = 0.24$ – для $m_{14}^2 = 7.3 \text{ эВ}^2$, $\sin^2 2\theta = 0.36$, $\chi^2/\text{DoF} = 31.90/19(1.68)$, $\text{GoF} = 0.03$ для отсутствия осцилляций

Здесь мы рассматриваем только вклад второго порядка в нейтринный потенциал, учитывая малую величину барионной асимметрии. Эффект MSW в Солнце появляется из-за вклада в потенциал, пропорционального первой степени константы Ферми G_f и имеет вид $V = \sqrt{2}G_f(n_e - n_{e^+})$ [13]. Но этот потенциал рассматривается в предположении отсутствия позитронов, что верно для Солнца, но не выполняется для первичной плазмы, в которой число электронов и позитронов почти одинаковое. Поэтому вклад первого порядка в потенциал сокращается и нужно рассматривать вклад второго порядка (3), вычисленный в работе [14]. Главная особенность вклада второго порядка состоит в том, что он имеет одинаковый отрицательный знак для нейтрино и для антинейтрино. В результате, углы смешивания обеих частиц подавлены на ранних стадиях эволюции Вселенной, когда вклад потенциальной энергии доминирует над кинетической частью. Это означает, что MSW резонанс не происходит в ранней Вселенной, угол смешивания стерильных нейтрино постепенно увеличиваются с течением времени и не превосходит своего вакуумного значения.

Параметры плазмы постепенно меняются, поэтому изменяются и эффективные уровни нейтрино. В каждый момент времени мы считаем, что энергия нейтрино равна $3.15T$, т.е. средней энергии для нейтрино в ультрарелятивистском случае. Эффективные уровни энергии являются собственными числами гамильтониана и соответствуют собственным состояниям в плазме в данный момент времени. Раз-

ность между уровнями определяет разность фаз между нейтринными состояниями, распространяющимися в плазме, и имеет вид:

$$E_2 - E_1 = \quad (6)$$

$$= \left(\left(\frac{\Delta m^2 \cos(2\theta)}{2E} - V \right)^2 + \left(\frac{\Delta m^2 \sin(2\theta)}{2E} \right)^2 \right)^{1/2},$$

где $\Delta m_{14}^2 = 7.3$, $\sin^2 2\theta_{14} = 0.36$, в соответствии с результатами эксперимента Нейтрино-4.

Получающаяся в соответствии с приведенным выражением разность уровней имеет минимум в области 0.0025 с.

Уровни энергии, представленные на рис. 4, не пересекаются, но значительно сближаются. Минимум разности энергии достигается, когда значение энергии E в формуле (6) уже достаточно мало, чтобы выполнялось соотношение $\frac{\Delta m^2 \cos(2\theta)}{2E} > V$. При дальнейшем развитии системы роль потенциала становится исчезающе мала и уровень определяется только энергией E , а угол асимптотически приближается к вакуумному значению. Именно в этот момент взаимодействия внутри плазмы перестают подавлять процесс осцилляций.

Удобной характеристикой угла смешивания является $\sin^2 2\theta_m$, так как вероятность осцилляций на временах больше периода осцилляций равна $\frac{1}{2} \sin^2 2\theta_m$. Для этого параметра можно написать формулу:

$$\sin^2 2\theta_m = \sin^2 2\theta \cdot \left(\left(\cos^2 2\theta - \frac{2 \cdot E \cdot V_e}{\Delta m^2} \right)^2 + \sin^2 2\theta \right)^{-1}. \quad (7)$$

Это выражение монотонно зависит от времени (рис. 5).

Для случая 4-х нейтрино мы учитываем следующие потенциалы из работ [14, 15]:

$$\begin{aligned} V_e &= -3.5 \times 25 \times G_f^2 \times T^4 \times E, \\ V_\mu &= -2 \times 25 \times G_f^2 \times T^4 \times E, \\ V_\tau &= -25 \times G_f^2 \times T^4 \times E, \\ V_s &= 0. \end{aligned} \quad (8)$$

Считается, что на смешивание нейтрино влияют только относительные потенциальные энергии. Поэтому можно сделать все вклады положительными, переопределив 0 на потенциал с наименьшим значе-

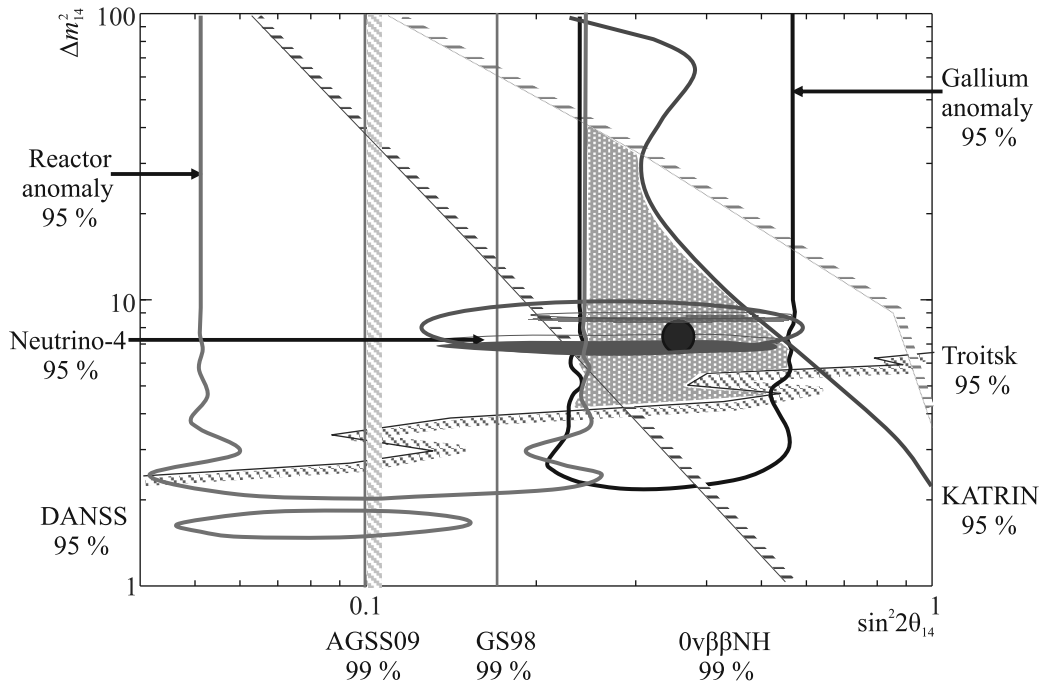


Рис. 2. (Цветной онлайн) Сравнение результатов эксперимента Нейтрино-4 с результатами других экспериментов

нием, т.е. потенциал V_e . Тогда потенциалы примут вид:

$$\begin{aligned} V_e &= 0, \\ V_\mu &= 1.5 \times 25 \times G_f^2 \times T^4 \times E, \\ V_\tau &= 2.5 \times 25 \times G_f^2 \times T^4 \times E, \\ V_s &= 3.5 \times 25 \times G_f^2 \times T^4 \times E. \end{aligned} \quad (9)$$

Это удобное приближение для расчетов, но в действительности, мюонный потенциал на рассматриваемом масштабе температур постепенно меняется. Множитель постепенно преобразуется от значения 1 до 3.5 с уменьшением числа мюонов в плазме.

Для проведения расчетов требуется ввести вакуумные углы смешивания и массы нейтрино. Для масс взяты значения $m_1 = 0.003$ эВ; $m_2 = 0.0091$ эВ; $m_3 = 0.0502$ эВ; $m_4 = 2.7$ эВ, так чтобы $m_2^2 - m_1^2 = 7.38 \cdot 10^{-5}$ эВ² и $m_3^2 - m_2^2 = 2.44 \cdot 10^{-3}$ эВ².

Вводя матрицу смешивания:

$$\begin{pmatrix} 0.784 & 0.525 & 0.1432 & 0.301 \\ -0.481 & 0.476 & 0.733 & 0.073 \\ 0.309 & -0.693 & 0.643 & 0.1 \\ -0.245 & -0.131 & -0.17 & 0.946 \end{pmatrix} \quad (10)$$

и учитывая ее изменение из-за взаимодействий в космической плазме, получаем уровни энергии нейтрино, приведенные на рис. 6. Значения элементов матриц указаны без погрешностей. Основной вклад

в ошибку результата будет вносить погрешность $\sin^2 2\theta_{14}$.

Взаимодействия нейтрино с космической плазмой радикально подавляют процесс осцилляций, особенно на ранних стадиях. Эффективная матрица смешивания постепенно меняется от диагональной матрицы при $t = 10^{-5}$ с

$$\begin{pmatrix} 1. & 0. & 0. & 0. \\ 0. & 1. & 0. & 0. \\ 0. & 0. & 1. & 0. \\ 0. & 0. & 0. & 1. \end{pmatrix} \quad (11)$$

до вида почти совпадающего с вакуумной матрицей смешивания при $t = 1$ с:

$$\begin{pmatrix} 0.784 & 0.525 & 0.1432 & 0.301 \\ 0.481 & 0.476 & 0.733 & 0.073 \\ 0.309 & 0.693 & 0.643 & 0.1 \\ 0.245 & 0.131 & 0.17 & 0.946 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Промежуточные значения:

$$U_{\text{ef}}(10^{-4} \text{ с}) = \begin{pmatrix} 1. & 0. & 0. & 0. \\ 0. & 1. & 0. & 0. \\ 0. & 0. & 1. & 0. \\ 0. & 0. & 0. & 1. \end{pmatrix}, \quad (13)$$

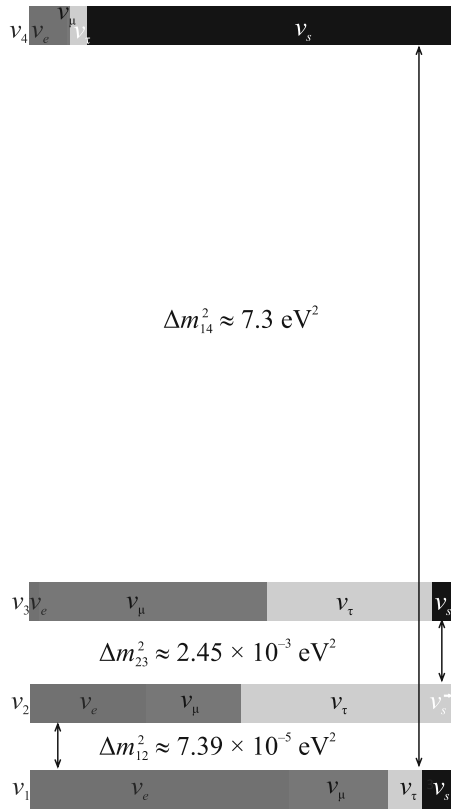


Рис. 3. (Цветной онлайн) Схема смешивания ароматов активных нейтрино и стерильного нейтрино для прямой иерархии масс

$$U_{ef}(10^{-3} \text{ c}) = \begin{pmatrix} 0.999 & 0.007 & 0.005 & 0.044 \\ 0.008 & 1. & 0.003 & 0.017 \\ 0.006 & 0.004 & 0.999 & 0.038 \\ 0.044 & 0.017 & 0.038 & 0.998 \end{pmatrix}, \tag{14}$$

$$U_{ef}(10^{-2} \text{ c}) = \begin{pmatrix} 0.953 & 0.048 & 0.024 & 0.299 \\ 0.075 & 0.988 & 0.11 & 0.073 \\ 0.05 & 0.121 & 0.986 & 0.1 \\ 0.29 & 0.079 & 0.12 & 0.946 \end{pmatrix}, \tag{15}$$

$$U_{ef}(10^{-1} \text{ c}) = \begin{pmatrix} 0.835 & 0.438 & 0.142 & 0.301 \\ 0.427 & 0.527 & 0.731 & 0.073 \\ 0.233 & 0.721 & 0.645 & 0.1 \\ 0.257 & 0.104 & 0.17 & 0.946 \end{pmatrix}. \tag{16}$$

Резкое изменение происходит в области $10^{-3} \div 10^{-1}$ с, в которой вклады потенциальных и кинетических членов становятся сравнимыми.

Теперь нас интересуют плотности стерильного, тау, мюонного и электронного нейтрино в разные моменты времени. Для их оценки нужно рассматривать

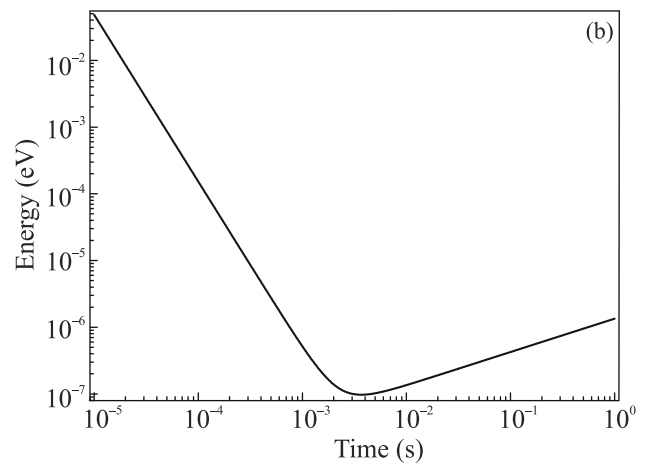
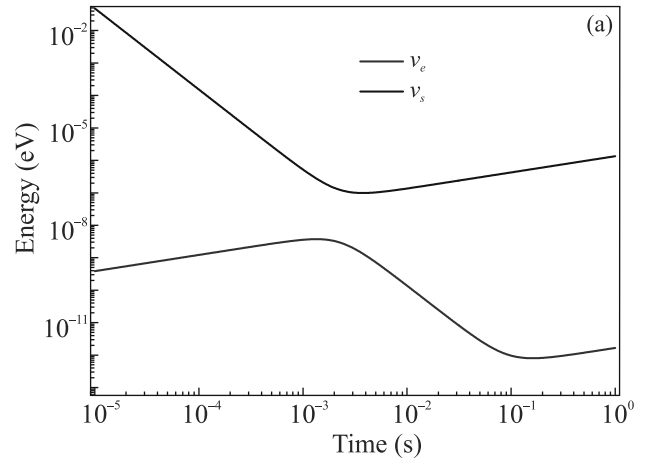


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Адиабатические уровни энергии в двух нейтринной системе. (б) – Разность энергии между уровнями

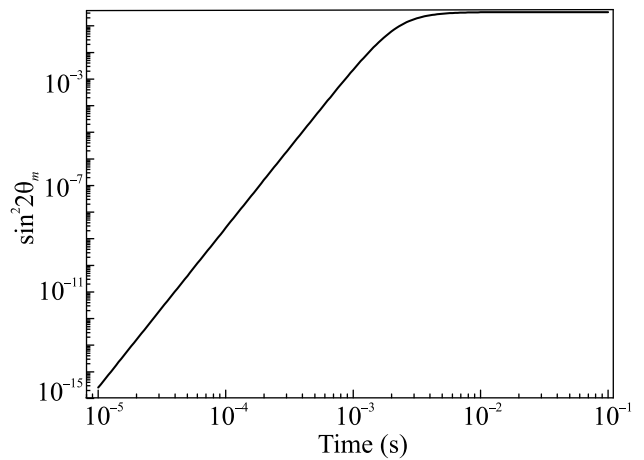


Рис. 5. Поведение амплитуды осцилляций электронного нейтрино в стерильное состояние в космической плазме в зависимости от времени

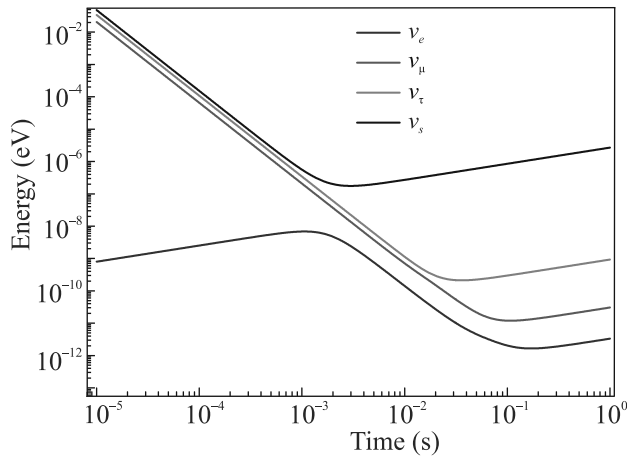


Рис. 6. (Цветной онлайн) Поведение адиабатических уровней энергии в системе 4-х нейтрино

динамику процессов рождения и уничтожения различных типов нейтрино, решая дифференциальное уравнение. Мы рассматриваем поведение нейтрино в эпоху после аннигиляции барионов и антибарионов (рис. 7). В эту эпоху вклад во взаимодействия нейтрино дают процессы рассеяния на электронах, позитронах, нейтрино и антинейтрино, а также процесс аннигиляции нейтрино и антинейтрино.

Средняя по времени вероятность появления нейтрино вследствие осцилляций $\sim \frac{1}{2} \sin^2 2\theta$. Вероятность генерации нейтрино при этом определяется частотой соударений $1/\tau$ или длиной свободного пробега, которая пропорциональна плотности среды и сечением взаимодействия $1/\tau = n_e \sigma$. Полная частота процессов электронного нейтрино, пренебрегая барионной асимметрией, может быть выражена как [14, 15]:

$$\frac{1}{\tau_{\nu_e}} = \Gamma_{\nu_e} = \frac{13}{9} \frac{7\pi}{24} G_f^2 T^4 E. \quad (17)$$

Для мюонного и тау нейтрино используются меньшие величины частоты взаимодействий:

$$\frac{1}{\tau_{\nu_\mu}} = \frac{1}{\tau_{\nu_\tau}} = \Gamma_{\nu_\mu} = \frac{7\pi}{24} G_f^2 T^4 E. \quad (18)$$

На динамику плотности стерильного нейтрино влияет три процесса: 1) расширение Вселенной, 2) переходы активного нейтрино в стерильное и 3) обратные переходы стерильного нейтрино в активное состояние.

Обратный переход стерильного нейтрино рассматривается как осцилляция стерильного состояния в активное с последующим взаимодействием активной компоненты.

Ниже представлено уравнение, учитывающее генерацию ν_s и их “сток”. В уравнение (19) входит эф-

фективное взаимодействие стерильного нейтрино с плазмой за счет осцилляций:

$$\begin{aligned} \frac{dn_{\nu_s}}{dt} + 3Hn_{\nu_s} = & \frac{1}{2} \left(\frac{\sin^2 2\theta_{m14} n_{\nu_e}}{\tau_{\nu_e}} + \right. \\ & \left. + \frac{\sin^2 2\theta_{m24} n_{\nu_\mu}}{\tau_{\nu_\mu}} + \frac{\sin^2 2\theta_{m34} n_{\nu_\tau}}{\tau_{\nu_\tau}} \right) - \\ & - \frac{1}{2} \left(\frac{\sin^2 2\theta_{m14}}{\tau_{\nu_e}} + \frac{\sin^2 2\theta_{m24}}{\tau_{\nu_\mu}} + \frac{\sin^2 2\theta_{m34}}{\tau_{\nu_\tau}} \right) n_{\nu_s}, \end{aligned} \quad (19)$$

где n_{ν_s} , n_{ν_e} , n_{ν_μ} и n_{ν_τ} – плотности стерильного, электронного, мюонного и тау нейтрино, соответствующих распределению Ферми–Дирака с нулевым химическим потенциалом [14]. Мы использовали для квадратов синусов двойного угла следующие значения: $\sin^2 2\theta_{14} = 0.36$, $\sin^2 2\theta_{24} = 0.024$ и $\sin^2 2\theta_{34} = 0.043$.

Уравнение (19) является упрощением, в котором не учитывается влияние переходов активных нейтрино в стерильные на плотность самих активных нейтрино, а рассматривается только переход в стерильные нейтрино с последующим переходом стерильных нейтрино в активные. В качестве начальных условий выбрано, что плотность стерильных нейтрино в начальный момент времени равна нулю.

Это уравнение можно применять вплоть до температуры закалки нейтрино, т.е. до температуры, при которой плотность уменьшается настолько, что взаимодействием нейтрино с веществом плазмы можно пренебречь. В этот момент взаимодействие нейтрино с веществом прекращается и на дальнейшую динамику плотности влияет только расширение пространства. Величина $\sin 2\theta_{m14}$ связана с вакуумным значением $\sin 2\theta_{014}$ формулой (7), где из-за отсутствия взаимодействия стерильного нейтрино с веществом V_e равен потенциалу взаимодействия электронного нейтрино с плазмой. В силу отрицательности величины V_e резонанс Михеева–Смирнова не наблюдается.

Скорость увеличения плотности стерильного нейтрино определяется разностью в вероятностях рождения и уничтожения стерильного нейтрино. Оба процесса пропорциональны амплитуде осцилляций электронного нейтрино в стерильное нейтрино (или наоборот) с фактором $1/2$. Процесс рождения стерильного нейтрино пропорционален плотности электронных нейтрино n_{ν_e} и частоте взаимодействия электронных нейтрино $\frac{1}{\tau_{\nu_e}}$. Процесс перехода стерильного нейтрино в электронное нейтрино пропорционален плотности стерильных нейтрино n_{ν_s} и частоте взаимодействия электронных нейтрино $\frac{1}{\tau_{\nu_e}}$. По-

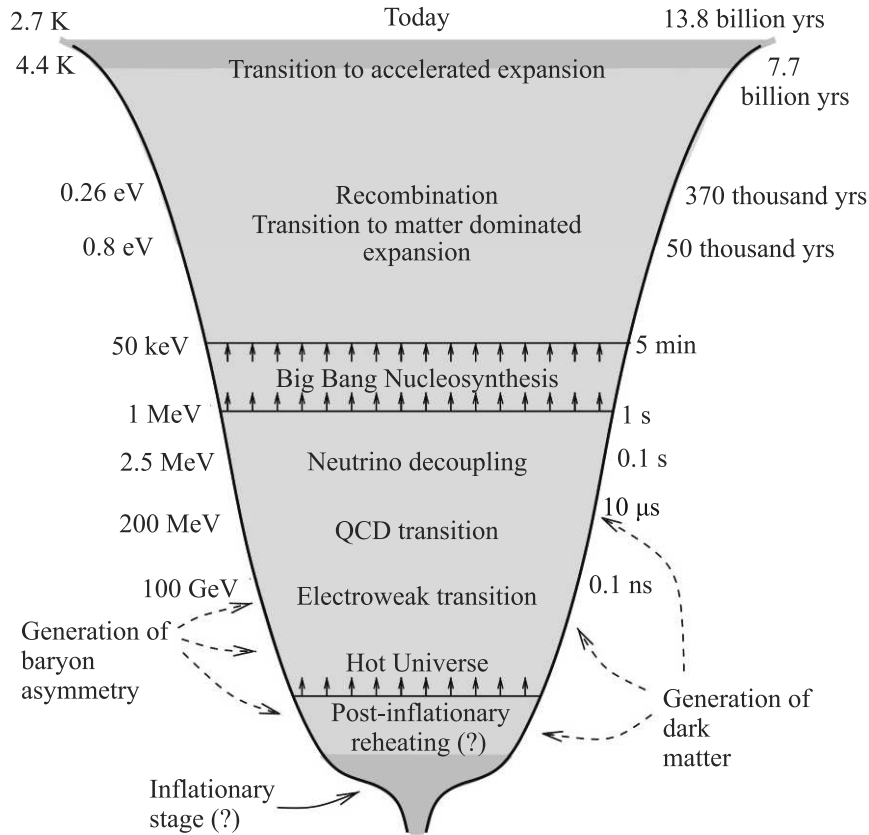


Рис. 7. (Цветной онлайн) Этапы развития Вселенной из [14]

этому множитель $\frac{1}{2} \frac{\sin^2 2\theta_m}{\tau_{\nu_e}}$ входит как в генерацию, так и в “сток” стерильных нейтрино.

Плотность электронных нейтрино зависит от температуры:

$$n_{\nu_e}(T) = \frac{3}{4} \frac{\zeta(3)}{\pi^2} T^3. \tag{20}$$

В уравнение (19) также входит параметр Хаббла H , который зависит от числа релятивистских степеней свободы. Мы используем значение $43/4$, приведенное в обзоре PDG для температуры меньше массы мюона. В ультрарелятивистском случае постоянная Хаббла связана с температурой следующим выражением [14]:

$$H(T) = \frac{T^2}{M_{Pl}^*}, \tag{21}$$

где M_{Pl}^* – приведенная планковская масса (формула (3.32) из [14]).

Величина времени осцилляций в плазме вычисляется по формуле:

$$\tau_{osc} = \tau_0 \frac{\sin 2\theta_m}{\sin 2\theta_0}, \tag{22}$$

где τ_0 – период осцилляций в вакууме $\tau_0 = 4\pi E/\Delta m^2$, Δm^2 – разность квадратов масс нейтрино, $\sin 2\theta_m$ – синус двойного угла смешивания двух нейтрино в плазме, $\sin 2\theta_0$ – синус двойного угла смешивания двух нейтрино в вакууме.

Рисунок 8 иллюстрирует соотношение между частотой осцилляций и частотой столкновений для нейтрино разных флейворов в зависимости от времени. В нижней части рис. 8 показана зависимость амплитуды осцилляций между разными флейворами от времени. Можно отметить наличие трех критических моментов – выход амплитуды осцилляций на уровень амплитуды осцилляций в вакууме. Эти критические моменты сопряжены также со стабилизацией частоты осцилляций на уровне частоты вакуумных осцилляций, которая увеличивается из-за уменьшения энергии нейтрино в связи с расширением пространства. Это и есть моменты отщепления нейтрино от плазмы – так называемые моменты “закалки” нейтрино.

Время и температуру закалки для разных нейтрино можно фиксировать по минимумам в поведении адиабатических уровней на рис.6 и по мини-

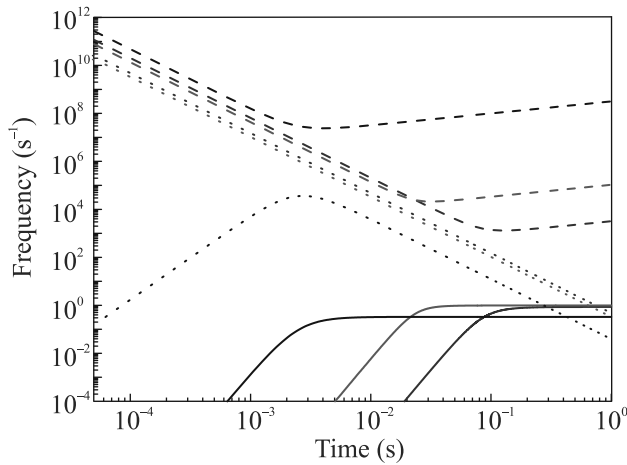


Рис. 8. (Цветной онлайн) Времена “закалки” нейтрино. Линии коротким пунктиром – частота взаимодействий: синяя – ν_e , красная – ν_μ , черная – частота “взаимодействий” ν_s . Пунктирные линии – частота осцилляций: синяя – $\nu_e\nu_\mu$, красная – $\nu_\mu\nu_\tau$, черная – $\nu_e\nu_s$. Сплошные линии: синяя – $\sin^2 2\theta_{21}$, красная – $\sin^2 2\theta_{32}$, черная – $\sin^2 2\theta_{14}$

мумам в поведении частоты осцилляций на рис. 8. Именно в этот момент частота и амплитуда осцилляций почти выходят на уровень вакуумных параметров.

Для стерильного нейтрино закалка происходит при $3 \cdot 10^{-3}$ с, и температуре плазмы $1.9 \cdot 10^{11}$ К. Для тау нейтрино закалка происходит при $3 \cdot 10^{-2}$ с, и температуре плазмы $6 \cdot 10^{10}$ К. Для мюонного нейтрино закалка происходит при $1 \cdot 10^{-1}$ с и температуре плазмы $3.3 \cdot 10^{10}$ К. Для электронного нейтрино закалка происходит при $2 \cdot 10^{-1}$ с и температуре плазмы $2.3 \cdot 10^{10}$ К.

Рисунок 9 иллюстрирует скорость рождения и уничтожения стерильных нейтрино при параметрах осцилляций, полученных в эксперименте Нейтрино-4. В определенный момент достигается баланс между рождением и уничтожением стерильных нейтрино и устанавливается равновесие.

Как уже отмечалось ранее, массовые состояния m_1, m_2, m_3 представляют собой смесь электронных, мюонных и тау флейворов с малой долей стерильного состояния. Поэтому массовые состояния m_1, m_2, m_3 обладают слабым взаимодействием, в то время как массовое состояние m_4 в основном стерильное и обладает слабым взаимодействием только за счет малого вклада электронных, мюонных и тау флейворов. Отношение плотности стерильного нейтрино к плотности электронного нейтрино в момент времени 1 с будет ~ 1 . Значение отношения рассчитано при параметрах осцилляций из [8].

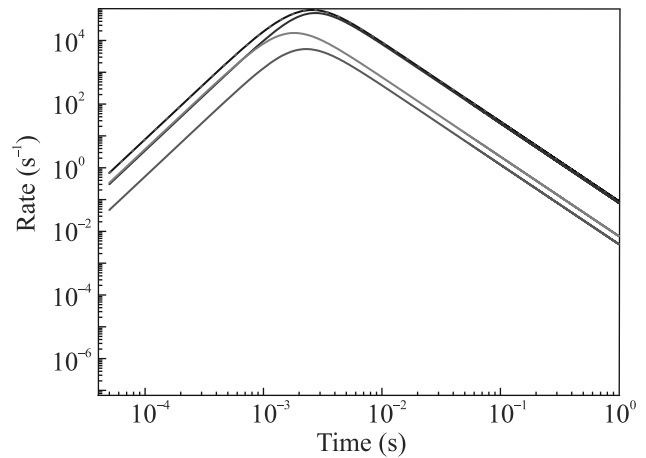


Рис. 9. (Цветной онлайн) Генерация и сток стерильных нейтрино. Черная линия – скорость рождения ν_s из ν_e, ν_μ, ν_τ . Синяя линия – скорость рождения ν_s из ν_e . Красная линия – скорость рождения ν_s из ν_μ . Желтая линия – скорость рождения ν_s из ν_τ . Короткий пунктир – полная скорость уничтожения ν_s

Следствием протекающих процессов является очень важный результат: к моменту закалки всех нейтрино плотность стерильных нейтрино оказывается приблизительно той же, что и плотность электронных нейтрино, так же, как и плотности тау и мюонных нейтрино оказываются одинаковыми. Эту ситуацию отражает рис. 10, где представлена динамика в отношении плотностей нейтрино различного типа.

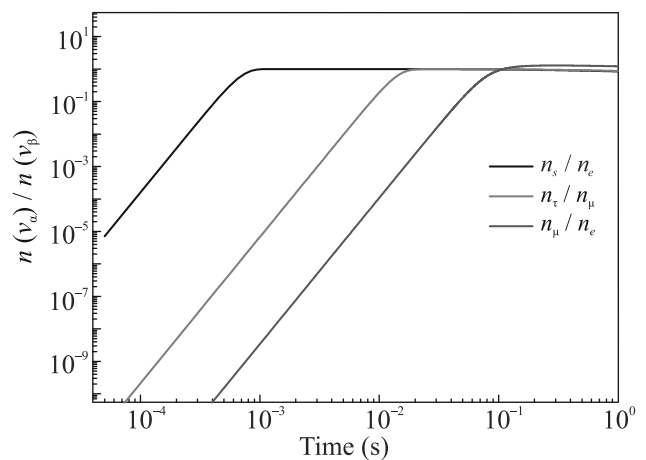


Рис. 10. (Цветной онлайн) Относительные плотности нейтрино

Теперь следует сделать оценку вклада активных и стерильных нейтрино в плотность энергии Вселенной. Достаточно очевидно, что вклад рассматриваемого стерильного нейтрино является определяющим,

плотность числа частиц стерильного нейтрино такая же, как и плотность активных нейтрино, а масса значительно больше $m_{\nu_4} = 2.7 \text{ эВ}$. Вклад активных нейтрино в плотность энергии Вселенной определяется соотношением [14]: $\Omega_{\nu_1\nu_2\nu_3} \approx (m_{\nu_1\nu_2\nu_3}/1 \text{ эВ}) \cdot 0.01h^{-2}$, где h – постоянная Хаббла.

Вклад стерильного нейтрино в плотность энергии Вселенной дается выражением:

$$\Omega_{\nu_4} \approx \left(\sum m_{\nu_i}/1 \text{ эВ} \right) 0.01h^{-2} \cdot n_{\nu_4} m_{\nu_4} / \sum (n_{\nu_i} m_{\nu_i}),$$

$$n_{\nu_i} = n_{\nu_e}, \quad \sum (n_{\nu_i} m_{\nu_i}) = n_{\nu_e} \sum m_{\nu_i}, \quad (23)$$

$$\Omega_{\nu_4} \approx (2.7 \text{ эВ}/1 \text{ эВ}) \cdot 0.01h^{-2} \cdot 5.1 = 0.053$$

и составляет 5.3 % плотности энергии во Вселенной.

Такие же вычисления можно провести и для нейтрино с другими параметрами. На рисунке 11 представлена зависимость Ω_{ν_4} от параметров смешивания стерильного нейтрино, рассчитанная на основе данных выражений.

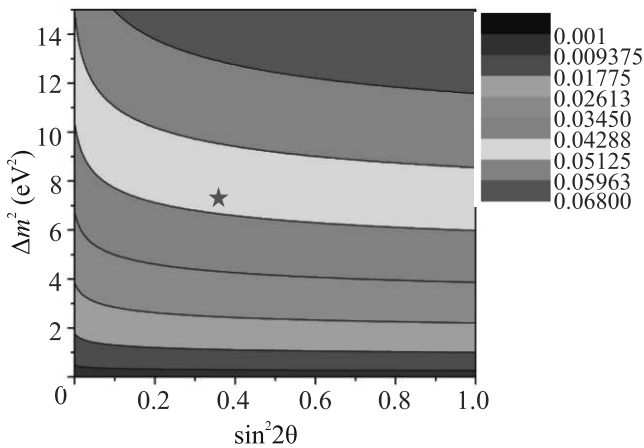


Рис. 11. (Цветной онлайн) Зависимость Ω_{ν_4} от Δm^2_{14} и $\sin^2 2\theta_{14}$. Звездой обозначена точка лучшего фита эксперимента Нейтрино-4.

В результате проведенных расчетов была получена оценка на вклад стерильного нейтрино с параметрами $\Delta m^2_{14} = 7.3 \text{ эВ}^2$ и $\sin^2 2\theta_{14} = 0.36$ в плотность энергии Вселенной. Итоговое значение $\sim 5\%$. При заданной массе эту величину стоит рассматривать как вклад в теплую темную материю. Также в рамках описанного подхода к рассмотрению динамики плотности стерильного нейтрино была получена зависимость этого вклада от параметров Δm^2_{14} и $\sin^2 2\theta_{14}$.

До этого нас интересовала оценка вклада в темную материю стерильного нейтрино с параметрами, близкими к полученным в рамках эксперимента

Нейтрино-4 [8]. Но проведенный анализ можно расширить в область больших значений массы стерильного нейтрино. Мы ограничимся вариантом уравнения (19), включающим только электронное и стерильное нейтрино. Из анализа уравнения следует, что вклад в темную материю при значениях $\sin^2 2\theta_{14} > 0.1$ зависит в основном от массы нейтрино, что наглядно показано на рис. 11. Но при малых значениях угла смешивания увеличивается его влияние на величину вклада в темную материю.

Нас интересует вопрос о том, какие углы смешивания для тяжелых нейтрино оставляют вклад стерильного нейтрино в темную материю ниже ограничения в 25 %. Результат расчетов продемонстрирован на рис. 12. Этот результат показывает, что тяжелые стерильные нейтрино должны иметь малые углы смешивания, чтобы не противоречить космологическим ограничениям на полный вклад темной материи в плотность энергии во Вселенной. Такому характеру зависимости угла от массы можно дать простое объяснение.

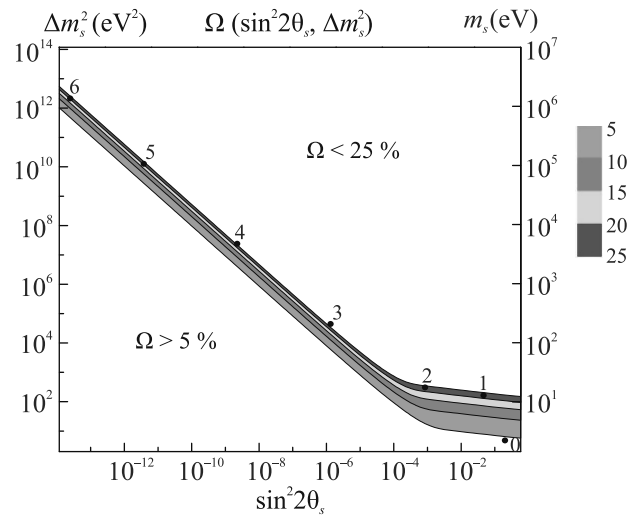


Рис. 12. (Цветной онлайн) Область Δm^2_{14} и $\sin^2 2\theta_{14}$ приводящих к допустимым значениям вклада в темную материю

На рисунке 10 показано, что легкие стерильные нейтрино при достаточно больших углах смешивания приходят в термодинамическое равновесие с плазмой и их плотность сравнивается с плотностью активных нейтрино. Но для больших масс термодинамическое равновесие недопустимо, так как приведет к превышению порога в 25 %. А значит, чтобы остаться в рамках ограничения, при увеличении массы нейтрино угол смешивания должен уменьшаться.

Уменьшение угла смешивания приводит к тому, что стерильное нейтрино не успевает прийти в равновесие с электронным нейтрино до момента отделения нейтрино от плазмы, т.е. отношение n_{ν_s}/n_{ν_e} остается меньше 1. На рисунке 12 выделены 7 точек на плоскости $(\sin^2 2\theta_{14}, \Delta m_{14}^2)$, для которых на рис. 13 построены кривые отношения числа стерильных нейтрино к числу электронных нейтрино. С уменьшением угла смешивания и увеличением массы это отношение уменьшается.

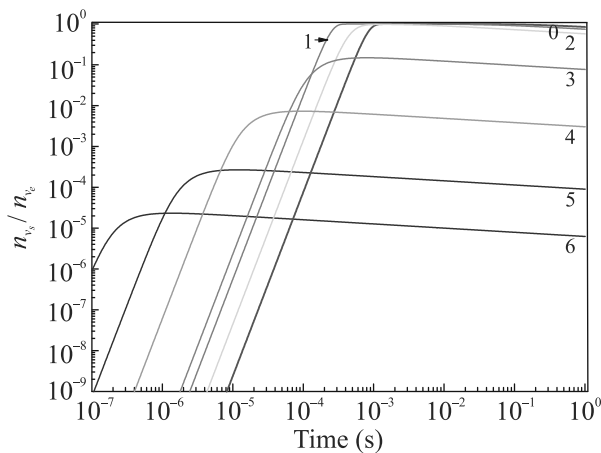


Рис. 13. (Цветной онлайн) Отношение числа стерильных нейтрино к числу электронных нейтрино для нескольких значений параметров на плоскости $(\sin^2 2\theta_{14}, \Delta m_{14}^2)$. Красная линия относится к точке “0” на рис. 12 и соответствует $\Delta m^2 = 7.3 \text{ эВ}^2$, $\sin^2 2\theta = 0.36$

Из приведенного анализа можно сделать вывод, что тяжелые дираковские нейтрино должны обладать малым углом смешивания из-за космологических ограничений. Это означает, что тяжелые стерильные нейтрино не вносят вклад в реакторные нейтринные эксперименты.

Из этого анализа также можно сделать следующие выводы.

1. Стерильное нейтрино с параметрами $\Delta m_{14}^2 = 7.3 \text{ эВ}^2$, $\sin^2 2\theta_{14} = 0.36$ дает вклад в темную материю приблизительно 5%, но является релятивистским и не объясняет структуру Вселенной.

2. Для объяснения структуры Вселенной нужны тяжелые стерильные нейтрино с очень малыми углами смешивания.

3. Расширение нейтринной модели введением еще двух тяжелых стерильных нейтрино позволит объяснить структуру Вселенной и довести вклад стерильных нейтрино в темную материю Вселенной до уровня 27%.

Выше мы обсуждали вклад стерильного нейтрино в темную материю и рассматривали ограничения, связанные с полной энергией темной материи. Мы пришли к выводу, что полученные в эксперименте параметры не противоречат ограничению на плотность энергии, и более того, остается пространство для введения и более тяжелых стерильных состояний.

Однако существуют другие ограничения, основанные на космологических моделях и наблюдениях. Можно выделить три типа наблюдений, которые накладывают ограничения на стерильное нейтрино: 1) первичный нуклеосинтез и распределение легких ядер [16, 17], 2) космический микроволновый фон [18], 3) кластеризация крупномасштабных космологических структур [19, 20].

Добавление в модель развития ранней Вселенной стерильного нейтрино массой порядка эВ изменяет число релятивистских степеней свободы в период нуклеосинтеза и влияет на характер расширения Вселенной в момент отделения фотонов от вещества. В итоге стерильное нейтрино смещает момент закалки нейтронов, а значит влияет на соотношения легких ядер во Вселенной. Анизотропия микроволнового фона также оказывается чувствительной к параметрам стерильного нейтрино. Влияние нейтрино принято выражать через эффективное число релятивистских степеней свободы N_{eff} . Модель с тремя активными нейтрино предсказывает значение $N_{\text{eff}}^3 = 3.046$. Современные ограничения на эффективное число степеней свободы полученные из фитирования данных по легким элементам во Вселенной $N_{\text{eff}} = 2.843 \pm 0.154$ [21], а наблюдения микроволнового фона приводят к величине $N_{\text{eff}} = 2.99 \pm 0.17$ [18]. Эти результаты хорошо согласуются с моделью 3-х активных нейтрино и оставляют открытой только ограниченную область параметров для стерильного нейтрино.

Приближенное значение ΔN_{eff} соответствующее параметрам стерильного нейтрино можно определить по формуле [16]:

$$\left(\frac{\Delta m_{e s}^2}{\text{эВ}^2}\right) \cdot \sin^4 2\theta_{\text{vac}}^{\nu_e \nu_s} = 3.16 \cdot 10^{-5} \left(\frac{g_*(T_{\text{prod}}^{\nu_s})}{10.75}\right)^3 \Delta N_{\nu}^2, \quad (24)$$

где $T_{\text{prod}}^{\nu_s}$ – температура, при которой генерация нейтрино имеет максимум.

Применяя это уравнение с $\Delta N_{\nu} = 1$, мы получаем ограничения на параметры стерильного нейтрино, представленные на рис. 14. Основной вклад эти ограничения дают в области малых масс и больших углов смешивания и, в том числе, закрывают стериль-

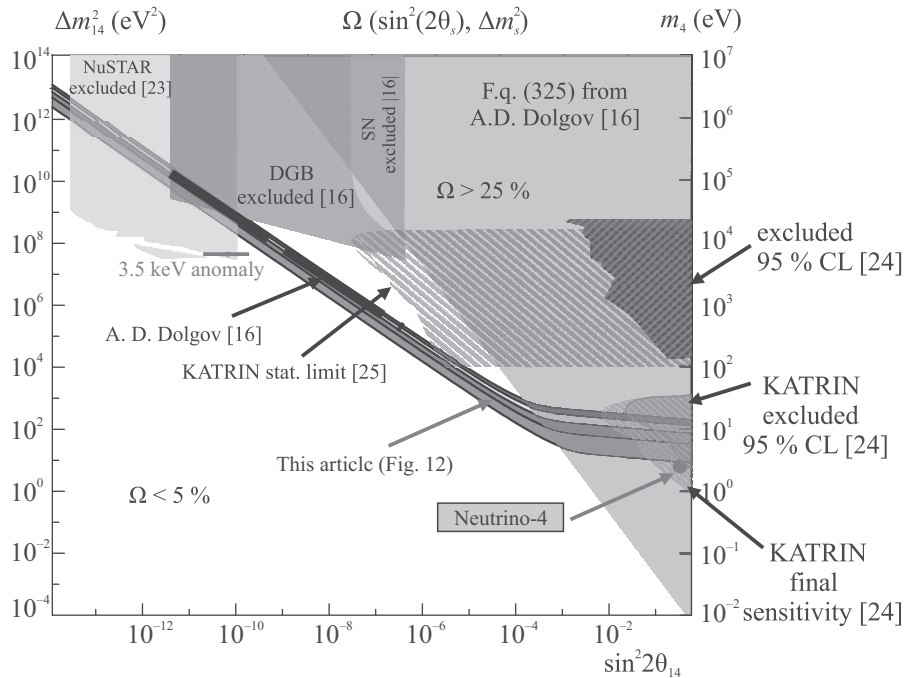


Рис. 14. (Цветной онлайн) Ограничения на параметры стерильного нейтрино. 1) Красная точка – результат эксперимента Нейтрино-4; 2) This article (Fig. 12) – область значений Ω_s в диапазоне 5–25%; 3) A. D. Dolgov [16] – результат из работы [16] для смешивания $\nu_e - \nu_s$ при $\Omega_s = 30\%$ (следует заметить, что результаты расчетов данной работы на основе уравнения (20) совпадают с результатами А. Д. Долгова в обзоре [16]); 4) Eq. (325) from A. D. Dolgov [16] – ограничения из уравнения (325) работы [16]; 5) DGB – экспериментальные ограничения по γ -фону; 6) экспериментальные ограничения из наблюдений за SN1987; 7) ограничения из эксперимента NuSTAR [23]; 8) KATRIN excluded 95% CL – ограничения из эксперимента KATRIN для стерильных нейтрино с массой ~ 1 эВ; 9) KATRIN final sensitivity – предел чувствительности KATRIN для стерильных нейтрино ~ 1 эВ; 10) excluded 95% CL – ограничения из экспериментов по измерению массы электронного нейтрино из работы [25]; 11) KATRIN stat. limit [25] – статистический предел эксперимента KATRIN для масс стерильного нейтрино ~ 1 кэВ

ное нейтрино с параметрами, полученными в нашем эксперименте. При этом остается возможность для тяжелых стерильных нейтрино, но с малым параметром, смешивания ограниченным вкладом нейтрино в темную материю.

В моделях с тяжелым нестабильным нейтрино, которое распадается в результате смешивания с активными нейтрино, появляются ограничения на массы и углы смешивания для тяжелых нейтрино. Распад тяжелого нейтрино на легкое нейтрино и гамма квант создает излучение определенной энергии, равной $m_s/2$. Угол смешивания определяет в этом случае интенсивность распада и концентрацию таких нейтрино в момент закалки нейтрино, а значит в итоге определяет интенсивность излучаемых гамма квантов. Наблюдения спектра гамма-излучения в диапазоне нескольких десятков кэВ накладывают ограничения на кэВные распадающиеся нейтрино [22]. Эти ограничения также показаны на рис. 14. Здесь же указан результат экспериментальных на-

блюдений, так называемая аномалия 3.5 кэВ, которая закрыта последующими экспериментами [23].

Для стерильных нейтрино с энергиями порядка нескольких кэВ существует способ лабораторного исследования. Существование такого стерильного нейтрино искажает спектр β -распада, и поэтому может проявляться в экспериментах по прямому измерению массы электронного нейтрино, основанных на детальном изучении β -спектра в распаде трития. На данный момент наилучший результат в экспериментах такого типа получен коллаборацией KATRIN [12]. Возможность установить экспериментальные ограничения на электровольтные и килоэлектровольтные стерильные нейтрино рассматривается в эксперименте KATRIN [24]. На рисунке 14 представлены уже исключенные (заштрихованные) области для электровольтных и килоэлектровольтных стерильных нейтрино, а также области предельной чувствительности эксперимента KATRIN. В области электровольтных стерильных нейтрино KATRIN име-

ет перспективы подтвердить или опровергнуть наш результат, однако в области килоэлектровольтных стерильных нейтрино чувствительности эксперимента KATRIN недостаточно, чтобы достигнуть области, где килоэлектровольтные стерильные нейтрино могли бы рассматриваться в качестве претендентов на частицы темной материи.

Современные ограничения на параметры килоэлектровольтных стерильного нейтрино, полученные в экспериментах по измерению массы нейтрино довольно слабые, и космологические ограничения оказываются значительно сильнее (рис. 14). Область параметров, которую планирует исследовать коллаборация KATRIN, достигает углов смешивания до $\sin^2 2\theta \sim 10^{-8}$ [24]. Эта область указана на рис. 14. Несмотря на то, что мы считаем, что прямые лабораторные эксперименты более предпочтительны, чем космологические наблюдения и модели, однако мы отмечаем, что область чувствительности эксперимента KATRIN для кэвных нейтрино закрыта ограничениями на полную плотность стерильного нейтрино во Вселенной.

Несмотря на это, мы считаем, что данные исследования необходимо продолжать. Как и в случае со стерильным нейтрино в области параметров эксперимента Нейтрино-4, при прямом наблюдении закрытого космологией сигнала в лабораторном эксперименте потребуется пересматривать космологические модели и их теоретические предпосылки.

Искажения в спектр β -распада вносят и стерильные нейтрино с массой $\sim \text{эВ}$. В этой области масс ограничения, полученные в эксперименте KATRIN на данный момент [24] (рис. 14), не противоречат результатам эксперимента Нейтрино-4. Используемый в эксперименте KATRIN метод измерений обладает максимальной чувствительностью в области 100–1000 эВ², и в области нескольких эВ реакторные эксперименты оказываются более эффективными.

Космологические ограничения вступают в противоречие с экспериментальными данными полученными на установке Нейтрино-4. Но мы хотим отметить, что любые выводы из космологических наблюдений являются модельно зависимыми. Расчеты первичного нуклеосинтеза и микроволнового фона требуют большого числа параметров, которые невозможно измерить напрямую, и проводятся с учетом некоторых гипотез относительно состава первичной плазмы. Например, предполагается, что величина лептонной асимметрии пренебрежимо мала – 10^{-9} , а величинами химических потенциалов можно пренебречь. Если эти условия не выполняются, то в потенциале нейтрино нужно учитывать вклад перво-

го порядка по константе G_f . Вклад первого порядка имеет вид [16]: $V_f = 0.95 \times G_f \eta T^3$, где η – величина зарядовой асимметрии. Для электронного нейтрино $\eta = 2\eta_{\nu_e} + \eta_{\nu_\mu} + \eta_{\nu_\tau} + \eta_e - \eta_n/2$, а отдельные асимметрии по каждому типу частиц определены как отношения разности плотности числа частиц и античастиц к плотности фотонов: $\eta_x = (n_x - n_{\bar{x}})/n_\gamma$. Этот дополнительный вклад не зависит от энергии нейтрино и зависит от температуры как T^3 . Вместе с малым значением асимметрии, при высоких температурах вклад второго порядка по G_f оказывается доминирующим, поэтому в расчетах для стандартной космологии вкладом первого порядка можно пренебречь.

Если рассматривать достаточно большую величину асимметрии, то адиабатические энергетические уровни активных и стерильных нейтрино могут пересекаться, что приведет к резонансным осцилляциям в стерильное состояние, по аналогии с резонансными осцилляциями между электронными и мюонными нейтрино в Солнце (MSW резонанс).

Рассматривая потенциалы вида:

$$V_e = 0.95 \times G_f \eta T^3 - 3.5 \times 25 \times G_f^2 \times T^4 \times E,$$

$$V_s = 0$$

для различных значений η мы получаем кривые зависимости отношения плотности числа стерильных и активных нейтрино. Мы рассмотрели несколько значений от 10^{-9} до 10^{-7} с. При стандартном для космологии значении $\eta = 10^{-9}$ вклад первого порядка не оказывает никакого влияния на динамику плотности нейтрино, что согласуется с гипотезой о том, что этим вкладом можно пренебречь. Оказалось, что даже при повышении величины асимметрии вплоть до $\eta = 10^{-7}$ вклад первого порядка по G_f не влияет на динамику термализации.

Однако для значений $\eta = 10^{-1}$ и $\eta = 1$ доля стерильных нейтрино по отношению к электронным нейтрино составляет 0.1 и 0.01 соответственно в интервале времен 1–100 с (рис. 15).

Поэтому в этих случаях стерильные нейтрино оказывают малое влияние на нуклеосинтез, а вклад стерильных нейтрино в темную материю составит 0.5% и 0.05% соответственно. Таким образом стерильное нейтрино с параметрами $\Delta m_{14}^2 \approx 7.3 \text{ эВ}^2$ и $\sin^2 2\theta_{14} \approx 0.36$ не противоречит наблюдаемому нуклеосинтезу, если столь большие значения лептонной асимметрии могут быть обоснованы. В связи с этим можно отметить, что в работе А. Д. Долгова “Осцилляции нейтрино в ранней Вселенной. Резонансный случай” [25] рассматривается подобная ситуа-

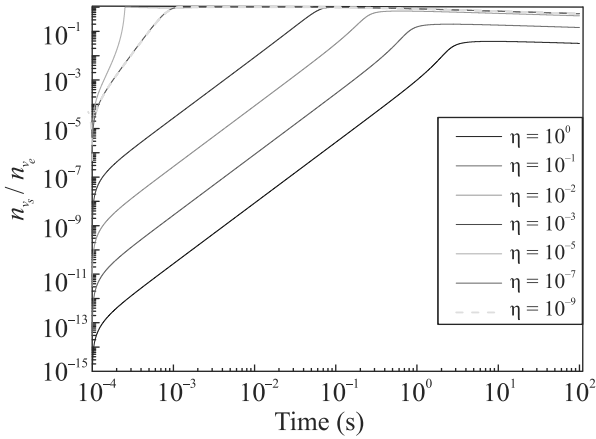


Рис. 15. (Цветной онлайн) Отношение числа стерильных нейтрино к числу электронных нейтрино для нескольких значений параметра η , $n_{\nu_s}(t = 0.0001) = 0.0$

ция. Идея этой работы состоит в том, что преобразование ν_α в ν_s может быть несколько более благоприятным, чем преобразование соответствующих антинейтрино. Эффект обратной связи положителен и приводит к дальнейшему увеличению асимметрии и делает преобразование $\nu_\alpha \rightarrow \nu_s$ все более и более эффективным по сравнению с $\bar{\nu}_\alpha \rightarrow \bar{\nu}_s$. Лептонная асимметрия, порожденная в ранней Вселенной нейтринными осцилляциями на стерильных партнерах, достигает асимптотических значений асимметрии на уровне 0.2–0.3 [25]. Конечно, требуется детальное рассмотрение такого сценария с экспериментальными параметрами осцилляций.

Другой вариант расширения теории – учет возможности распада легкого стерильного нейтрино. В работе [23] приводится формула для частоты распада стерильного нейтрино на активное нейтрино и фотон:

$$\begin{aligned} \Gamma_s &= \frac{9}{1024} \frac{\alpha}{\pi^4} G_F^2 m_s^5 \sin^2 2\theta = \\ &= 1.38 \times 10^{-22} \left(\frac{m_s}{1 \text{ кэВ}} \right)^5 \sin^2 2\theta \text{ с}^{-1}. \end{aligned}$$

Это очень малая величина, и распад с таким параметром не внесет заметных изменений в приведенные выше вычисления. Поэтому мы предлагаем рассмотреть гипотетическую возможность быстрого распада стерильного нейтрино без обсуждения механизмов и продуктов этого распада, так как нас интересует только влияние скорости распада на количество стерильного нейтрино в ранней Вселенной.

Естественным ограничением из эксперимента является тот факт, что нейтрино успевает оставить осцилляционный сигнал в нашей установке, т.е. не распадается на длине порядка 10 м. Из этого мы по-

лучаем нижний предел на период распада порядка $\tau_0 = 2 \times 10^{-14}$ с. Однако, если считать, что реакторная аномалия наблюдается вплоть до расстояний порядка 1 км, то нижний предел на период распада можно поднять до $\tau_0 = 2 \times 10^{-12}$ с. Наконец, оценку можно сделать, если предположить, что в эксперименте IceCube [26] эффект осцилляций также наблюдается, хотя ошибки этого эксперимента пока достаточно велики

$$\Delta m_{24}^2 = 6.7_{-2.5}^{+3.9} \text{ эВ}^2, \sin^2 2\theta_{24} = 0.33_{-0.17}^{+0.20},$$

то, учитывая расстояние (диаметр Земли) и энергию нейтрино (порядка 100 ГэВ), получаем $\tau_0 = 10^{-12}$ с.

Подставляя время распада в уравнение (20) как дополнительный канал потерь стерильного нейтрино, мы приходим к значению $n_s/n_e \ll 0.01$ к началу нуклеосинтеза при приблизительно 1 с. На рисунке 16 показано поведение отношений плотности стерильного нейтрино к электронному нейтрино для различных времен распада. Результат вычислений показывает, что в широком диапазоне возможных значений τ_0 можно добиться вклада стерильного нейтрино в темную материю на уровне, не противоречащем космологическим ограничениям. Например, при $\tau_0 = 10^{-7}$ с отношение $n_s/n_e \approx 0.1$. Значение $\tau_0 = 10^{-7}$ с можно рассматривать как верхний предел на время распада стерильного нейтрино, установленный из космологических ограничений по нуклеосинтезу. Этим простым рассуждением мы хотим показать, что существуют пути непротиворечиво включить стерильное нейтрино с полученными в эксперименте параметрами в космологию, но для этого понадобится значительно расширить теоретическую модель.

Если результат Нейтрино-4 подтвердится на уровне достоверности более 5σ на нашей новой установке втрое большей чувствительности, а также другими научными группами, то вышеперечисленные теоретические ограничения нужно будет пересматривать. Так как прямое наблюдение стерильного нейтрино в лабораторном эксперименте может стать определяющим критерием, то это потребует значительной переработки всей модели динамики ранней Вселенной.

Этой статьей мы хотим привлечь внимание к ситуации, возникающего противоречия между экспериментом и теорией, с целью поиска теоретических обоснований существования стерильного нейтрино в области $\Delta m_{14}^2 \sim 5\text{--}10 \text{ эВ}^2$ и $\sin^2 2\theta_{14} \sim 0.3\text{--}0.4$. В частности, хотелось бы отметить, что отщепление такого стерильного нейтрино от плазмы происходит раньше приблизительно на два порядка величины по

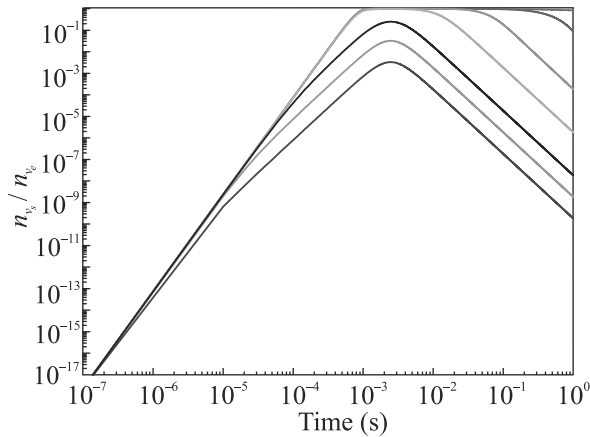


Рис. 16. (Цветной онлайн) Отношение числа стерильных и электронных нейтрино при учете распада стерильного нейтрино. Время жизни стерильного нейтрино в сопутствующей системе координат – τ_0 . Параметры смешивания $\sin 2\theta_{14} = 0.36$, $\Delta m_{14}^2 \times 7.3 \text{ эВ}^2$. Синяя линия – $\tau_0 = 2 \times 10^{-15}$ с; зеленая – $\tau_0 = 2 \times 10^{-14}$ с; черная – $\tau_0 = 2 \times 10^{-13}$ с; бирюзовая – $\tau_0 = 2 \times 10^{-11}$ с; оранжевая – $\tau_0 = 2 \times 10^{-9}$ с; пурпурная – $\tau_0 = 2 \times 10^{-7}$ с; красная линия – $\tau_0 = \infty$

отношению к активным нейтрино. Как можно видеть из рис. 6 и 8, момент отщепления стерильного нейтрино от плазмы приблизительно $2 \cdot 10^{-3}$ с, а для активного электронного нейтрино $2 \cdot 10^{-1}$ с. К моменту замораживания соотношения нейтронов и протонов и началу первичного нуклеосинтеза стерильное нейтрино уже практически не взаимодействует с плазмой и оказывают малое влияние на первичный нуклеосинтез. Остается неясным, как изменяются указанные выше ограничения при учете этого обстоятельства.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (Проект # 20-12-00079).

Авторы выражают благодарность В. А. Рубакову, А. Д. Долгову и З. Г. Бережани за советы и комментарии по теоретическим аспектам данной работы. Авторы признательны коллегам НИЦ КИ ПИЯФ и ИЯИ РАН за полезные обсуждения на семинарах.

1. A. Aguilar, L. B. Auerbach, R. L. Burman et al. (LSND collaboration), Phys. Rev. D **64**, 112007 (2001); hep-ex/0104049; <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.64.112007>.
2. A. A. Aguilar-Arevalo, B. C. Brown, L. Bugel et al. (MiniBooNE collaboration), Phys. Rev. Lett. **121**, 221801 (2018); 1805.12028; <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.221801>.
3. G. Mention, M. Fechner, T. Lasserre, T. Mueller, D. Lhuillier, M. Cribier, and A. Letourneau,

- Phys. Rev. D **83**, 073006 (2011); 1101.2755; <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.83.073006>.
4. C. Giunti and Th. Lasserre, Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. **69**, 163 (2019); arXiv: 1901.08330; <https://doi.org/10.1146/annurev-nucl-101918-023755>
5. W. Hampel, G. Heusser, J. Kiko et al. (GALLEX Collaboration), Phys. Lett. B **420**, 114 (1998); [https://doi.org/10.1016/S0370-2693\(97\)01562-1](https://doi.org/10.1016/S0370-2693(97)01562-1).
6. J. N. Abdurashitov, V. N. Gavrin, S. V. Girin et al. (SAGE Collaboration), Phys. Rev. C **59**, 2246 (1999); <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.59.2246>.
7. V. V. Barinov, B. T. Cleveland, S. N. Danshin et al. (BEST collaboration), Phys. Rev. C **105**, 065502 (2022); arXiv:2201.07364; <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.105.065502>.
8. A. Serebrov and R. Samoilo, JETP Lett. **112**, 199 (2020); <https://doi.org/10.1134/S0021364020160122>.
9. A. P. Serebrov, R. M. Samoilo, V. G. Ivochkin et al. (Neutrino-4 collaboration), Phys. Rev. D **104**, 032003 (2021); <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.104.032003>.
10. A. P. Serebrov, R. M. Samoilo, and M. E. Chaikovskii, arXiv:2112.14856.
11. M. Aker, K. Altenmueller, A. Beglarian et al. (KATRIN Collaboration), Phys. Rev. Lett. **126**, 091803 (2021); arXiv:2011.05087; <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.126.091803>.
12. M. Aker, A. Beglarian, J. Behrens et al. (The KATRIN Collaboration), Nat. Phys. **18**, 160 (2022); <https://doi.org/10.1038/s41567-021-01463-1>; arXiv:2105.08533.
13. S. S. Gershtein, E. P. Kuznetsov, and V. A. Ryabov, Phys.-Uspekhi **40**(8), 773 (1997); <https://doi.org/10.1070/PU1997v040n08ABEH000272>.
14. D. S. Gorbunov and V. A. Rubakov, *Introduction to the Theory of the Early Universe: Hot Big Bang Theory*, 2nd ed., World Scientific, New Jersey (2017); <https://doi.org/10.1142/7874>.
15. D. Notzold and G. Raffelt, Nucl. Phys. B **307**, 924 (1988); [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(88\)90113-7](https://doi.org/10.1016/0550-3213(88)90113-7).
16. A. D. Dolgov, Phys. Rept. **70**(4–5), 333 (2002); arXiv:hep-ph/0202122; [https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(02\)00139-4](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(02)00139-4).
17. R. Barbieri and A. D. Dolgov, Nucl. Phys. B **349**(3), 743 (1991); [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(91\)90396-F](https://doi.org/10.1016/0550-3213(91)90396-F).
18. N. Aghanim, Y. Akrami, M. Ashdown et al. (Planck Collaboration), Astronomy and Astrophysics **641**, A6 (2020); <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201833910>.
19. E. Giusarma, S. Vagnozzi, Sh. Ho, S. Ferraro, K. Freese, R. Kamen-Rubio, and K.-B. Luk, Phys. Rev. D **98**, 123526 (2018); arXiv:1802.08694; <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.98.123526>.
20. R. C. Nunes and A. Bonilla, Mon. Not. Roy. Astron. Soc. **473**, 4404 (2018); arXiv:1710.10264; <https://doi.org/10.1093/mnras/stx2661>.

21. B. D. Fields, K. A. Olive, T.-H. Yeh, and C. Young, *JCAP* **03**, 010 (2020); arXiv:1912.01132; <https://doi.org/10.1088/1475-7516/2020/03/010>; Erratum: *JCAP* **11**, E02 (2020).
22. V. V. Barinov, R. A. Burenin, D. S. Gorbunov, and R. A. Krivonos, *Phys. Rev. D* **103**, 063512 (2021); <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.103.063512>.
23. B. M. Roach, S. Rosslund, K. C. Y. Ng, K. Perez, J. F. Beacom, B. W. Grefenstette, Sh. Horiuchi, R. Krivonos, and D. R. Wik, arXiv:2207.04572v2.
24. M. Aker, M. Balzer, D. Batzler et al. (KATRIN Collaboration), arXiv:2203.08059v2.
25. A. D. Dolgov, *Nucl. Phys. B* **610**(1–2, 3), 411 (2001); arXiv: hep/0102125, [https://doi.org/10.1016/S0550-3213\(01\)00323-6](https://doi.org/10.1016/S0550-3213(01)00323-6).
26. R. Abbasi, M. Ackermann, J. Adams et al. (IceCube collaboration), arXiv:2204.00612.

Влияние длины и давления газовой струи на процесс генерации оптических гармоник фемтосекундным излучением лазерной системы на кристалле Fe:ZnSe с длиной волны 4.5 мкм

Б. В. Румянцев¹⁾, А. В. Пушкин, К. Е. Михеев, Ф. В. Потемкин,

Физический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 30 сентября 2022 г.

После переработки 12 октября 2022 г.

Принята к публикации 14 октября 2022 г.

В данной работе экспериментально исследовано влияние длины и давления газовой струи аргона на процесс генерации гармоник низкого порядка (5, 7, 9, 11) фемтосекундным излучением лазерной системы на кристалле Fe:ZnSe с длиной волны 4.5 мкм. Экспериментально установлено, что увеличение длины среды генерации вплоть до длины перетяжки позволяет более чем на порядок (в 12 раз) увеличить эффективность генерации. Кроме того, показано, что изменение длины газовой среды также приводит к изменению зависимости энергии генерируемого излучения от давления, что является следствием изменения условий фазового согласования, для корректного моделирования которых необходимо учитывать нелинейно-оптические эффекты распространения генерирующего излучения.

DOI: 10.31857/S1234567822220037, EDN: lyfggn

Введение. Генерация гармоник высокого [1] и низкого порядков [2] фемтосекундным лазерным излучением является одной из актуальных тем современных исследований, лежащей на стыке лазерной физики, нелинейной оптики и атомной физики. Основной интерес данной области исследований заключается в возможности использования когерентного излучения генерируемых гармоник для получения аттосекундных электромагнитных импульсов [3] и исследования зонной структуры конденсированных сред [4]. В силу высокого порядка нелинейности процесса генерации, увеличивающегося с ростом номера гармоники, и, как следствие, относительно малой эффективности преобразования генерация излучения гармоник с необходимым уровнем энергии требует оптимизации экспериментальных параметров. В настоящее время существуют различные способы генерации гармоник – в частности, с использованием в качестве мишени газовых сред [5, 6], твердых тел [7], плазмы [8]. Одним из наиболее гибких в плане изменения экспериментальных параметров методов генерации гармоник является генерация в газовых средах [9], поскольку газы позволяют управлять как микроскопическим откликом среды за счет подбора типа газа [10], так и макроскопическим откликом за счет подбора давления и объема газовой среды [11].

Существует несколько подходов по оптимизации выхода гармоник, если речь идет о газовой среде.

Первый подход основан на использовании многокомпонентных газовых сред, в которых один из газов отвечает за увеличение нелинейности среды, а второй – за фазовое согласование [2]. Особенно удобно это может быть реализовано вблизи молекулярных, атомарных и прочих резонансов таким образом, что частота волны накачки будет находиться вдали от резонанса (ниже первого возбужденного уровня), в то время как частота оптической гармоники будет близка к резонансной частоте перехода, немного превышая ее.

Второй способ оптимизации заключается в изменении давления газовой среды, что позволяет изменять количество атомов, участвующих в акте взаимодействия с лазерным излучением. Помимо этого, вследствие зависимости дисперсионных свойств среды от концентрации атомов, изменение давления также позволяет управлять условиями реализации фазового согласования между волной накачки и соответствующей оптической гармоникой.

Третий способ оптимизации состоит в изменении объема области газовой среды, участвующей в генерации, что может быть произведено за счет изменения длины среды. Изменение длины среды позволяет, равно как и давление, управлять количеством атомов среды, участвующих во взаимодействии, так и условиями реализации фазового согласования, что делает данный параметр аналогичным давлению с точки зрения влияния на процесс генерации гармоник.

¹⁾e-mail: rumjancev.bv15@physics.msu.ru

Оптимизация макроскопических параметров генерации особенно важна при использовании лазерного излучения среднего инфракрасного (ИК) диапазона, поскольку микроскопический отклик падает как $1/\lambda^5$ [12]. Помимо этого, сравнительно небольшая частота следования импульсов мощных лазерных систем, работающих в среднем ИК диапазоне [13], также ограничивает общий поток фотонов генерируемого излучения. Поэтому возможность оптимизации условий генерации путем подстройки давления и длины среды приобретает решающее значение для реализации эффективной генерации гармоник с использованием излучения среднего ИК диапазона.

Несмотря на основополагающую роль, проблема оптимизации энергетического выхода гармоник путем подстройки давления газовой струи обсуждается и в современных работах, посвященных генерации гармоник [14, 15]. При этом, поскольку наиболее распространенными и технологически разработанными являются лазерные системы ближнего ИК диапазона, то большинство работ, посвященных исследованию влияния давления газовой струи на эффективность генерации, оперирует именно с такими источниками, использование которых не требует высоких давлений на уровне 1–10 бар [16]. Так, в работе [17] при генерации гармоник излучением на длине волны 800 нм был достигнут оптимум энергетического выхода гармоник на уровне 0.2 бара для аргона Ar и 0.5 бар для молекулярного водорода H₂. В работе [18] при использовании того же излучения оптимальное давление молекулярного азота N₂ и воздуха составило 0.33 бара. Меньшее количество работ посвящено оптимизации процесса генерации гармоник излучением более длинноволнового диапазона – 1.24 мкм [19], 3.9 мкм [20], 4.5 мкм [21]. Проблема оптимизации длины генерирующей среды также обсуждается в современных работах, в особенности на фоне проблемы поглощения гармоник высокого порядка [22]. Основной список работ в данном направлении также касается применения источников ближнего и, частично, среднего ИК диапазона.

В данной работе проблема оптимизации энергетического выхода гармоник путем подстройки давления и длины газовой среды обсуждается в контексте генерации гармоник фемтосекундным излучением среднего ИК диапазона с длиной волны 4.5 мкм источника на кристалле Fe:ZnSe [23]. В частности, показана возможность оптимизации энергии генерируемого излучения посредством выбора длины среды генерации, совпадающей с длиной перетяжки лазерного пучка. Увеличение длины среды, помимо прямого увеличения количества атомов среды, задей-

ствованных в процессе генерации, также приводит к изменению зависимости энергии гармоник от давления газовой струи, что также является предметом исследования данной работы.

Экспериментальная установка. Схема экспериментальной установки представлена на рис. 1. Источником фемтосекундного излучения служит лазерная система на кристалле Fe:ZnSe [23] (длина волны 4.5 мкм, длительность импульса 160 фс по FWHM интенсивности). Лазерное излучение фокусируется на мишень, расположенную в откачиваемой камере генерации, линзой с фокусным расстоянием $f = 150$ мм. Радиус пучка на линзе составлял ≈ 6.5 мм по уровню $1/e^2$ интенсивности. Измеренный диаметр перетяжки после фокусировки данной линзой составил 70 ± 10 мкм, соответствующий конфокальный параметр пучка в перетяжке $b = 7.2 \pm 1$ мм. Мишень представляет собой ламинарную струю аргона (рис. 2).

Расположение перетяжки лазерного пучка совпадает с центром трубки. Диаметр трубки L фактически является длиной газовой среды, в которой происходит взаимодействие. Для исследования влияния длины среды взаимодействия на процесс генерации гармоник в эксперименте использовались две разные трубки: первая – с внутренним диаметром $L = 1$ мм, вторая – с внутренним диаметром $L = 7.1$ мм. При этом в случае $L = 1$ мм воздействие на среду происходит лишь в малой области рядом с центральной частью перетяжки ($L \ll b$), в то время как при $L = 7.1$ мм генерация происходит во всей области перетяжки ($L \approx b$).

Камера генерации непрерывно откачивается вакуумным насосом, что позволяет поддерживать вакуумные условия вне объема трубки при подаче аргона. Энергия лазерного импульса в камере генерации составляет 1.6 мДж. Излучение генерируемых в газовой мишени гармоник после камеры взаимодействия регистрируется спектрометром с диапазоном регистрации 200–1000 нм.

Расчетная модель. Интерпретация полученных экспериментальных результатов проводится на основе рассмотрения макроскопического отклика среды с учетом фазового согласования взаимодействующих волн. При фокусировке гауссова пучка в объем газовой струи зависимость энергии q -й гармоники от длины среды и давления газовой струи может быть выражена как [5, 24, 25]:

$$E_q \sim |p \cdot F_q(p, L)|^2, \quad (1)$$

где (рис. 1) p – давление газовой среды в мишени, L – длина газовой среды вдоль направления распростра-

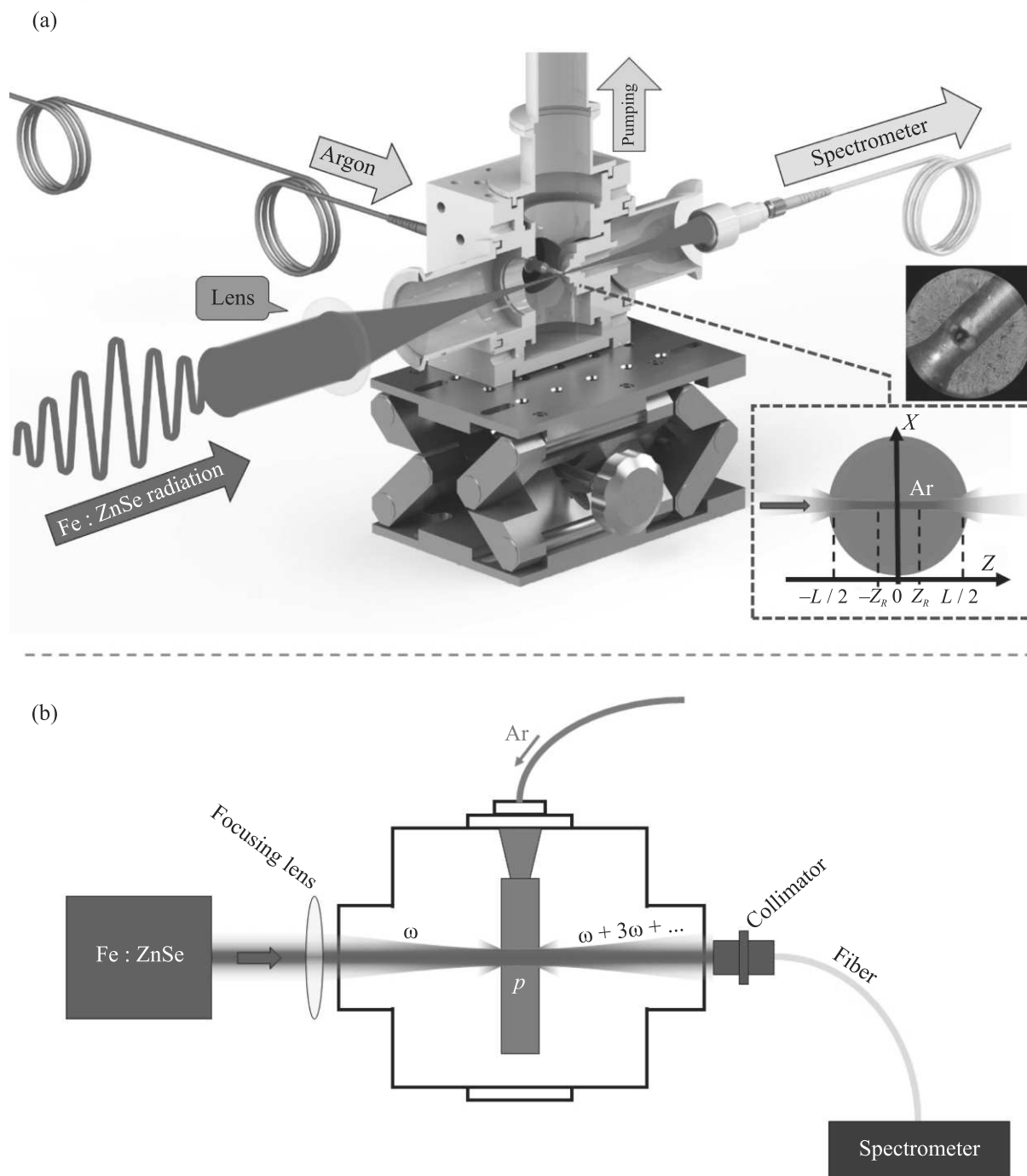


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Модель камеры генерации в разрезе. (б) – Схема экспериментальной установки

нения лазерного импульса, F_q – интеграл фазового согласования, выражение для которого имеет вид:

$$F_q(p, L) = \int_{-L/2}^{L/2} \frac{2}{b} \left(1 + i \frac{2z'}{b}\right)^{1-q} \cdot e^{-i\Delta k_q(p)z'} \cdot dz', \quad (2)$$

где $b = 2z_R$ – конфокальный параметр, z_R – длина Релея, $\Delta k_q(p) = k_q - qk_1$ – расстройка волновых векторов волны q -й гармоники и поляризации в параксиальном приближении. Необходимо отметить тот факт, что в выражении (2) вклад геометрической фазы (фазы Гюи [12]) гауссова пучка в расстрой-

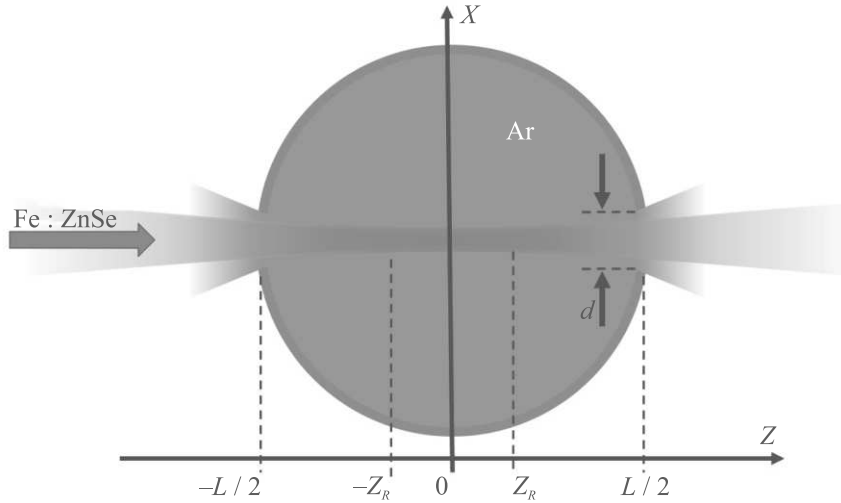


Рис. 2. (Цветной онлайн) Геометрия мишени и каустики лазерного пучка

ку волновых векторов не входит в выражение для $\Delta k_q(p)$, а учитывается посредством фазы комплексного множителя в скобках в выражении (2).

При генерации гармоник низкого порядка вклад в расстройку волновых векторов вносят материальная дисперсия среды и дисперсия генерируемой плазмы. С учетом линейной зависимости показателей преломления среды для волн накачки и гармоники от давления среды, а также линейной зависимости концентрации атомов среды от давления [11], зависимость расстройки волновых векторов от давления p может быть выражена как

$$\Delta k_q(p) = \Delta k_{q1 \text{ bar}} \cdot \frac{p}{p_0}, \tag{3}$$

где $\Delta k_{q1 \text{ bar}}$ – расстройка волновых векторов для q -й гармоники при давлении 1 бар, $p_0 = 1$ бар.

Поскольку в области низких гармоник, генерируемых излучением на длине волны 4.5 мкм в аргоне (как минимум для гармоник с длиной волны до 147 нм, 31-я гармоника), аргон обладает нормальной дисперсией [26, 27], то $\Delta k_{q1 \text{ bar}} > 0$ для данных гармоник. При этом вклады в расстройку волновых векторов $\Delta k_{q1 \text{ bar}}$ от материальной и плазменной дисперсий среды будут иметь один знак [11], совпадающий со знаком вклада геометрической фазы [5]. Данный фактор не позволяет подобрать давление, обеспечивающее выполнение условия фазового согласования $\Delta k_q^\Sigma = \Delta k_q + \Delta k_q^{\text{geom}} = \Delta k_q^{\text{disp}} + \Delta k_q^{\text{plasma}} + \Delta k_q^{\text{geom}} = 0$. Однако, несмотря на это, сохраняется возможность достичь локального экстремума зависимости энергии гармоник от давления (рис. 3). При этом каждый последующий максимум имеет большую амплитуду, что говорит о необходимости по-

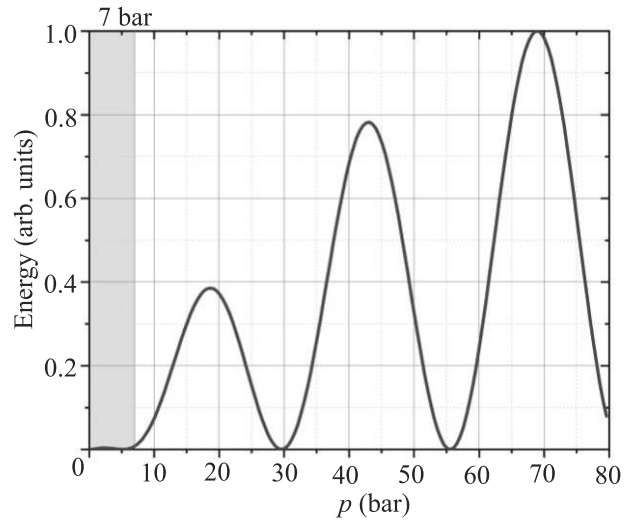


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость энергии 5-й гармоники от давления газовой струи, рассчитанная в соответствии с выражением (1). $L = 7.1$ мм, $\Delta k_{1 \text{ bar}} = 33 \text{ м}^{-1}$

вышения давления с целью увеличения эффективности генерации. На практике максимальная величина давления может быть ограничена нелинейными эффектами распространения, а также дисперсионным расплыванием генерирующего лазерного импульса. Так, в условиях проведенного эксперимента нелинейная длина L_{NL} [28] становится равной длине среды ($L = 7.1$ мм) при давлении $p = 7$ бар, что говорит о проявлении нелинейных эффектов распространения в области больших давлений, что может приводить, в частности, к отклонению рассчитанной от экспериментальной зависимости в данной работе. Умень-

шить влияние нелинейных эффектов можно за счет уменьшения длины области взаимодействия L .

Результаты и обсуждение. В данной работе исследовано влияние длины и давления газовой струи на энергию гармоник низкого порядка (5, 7, 9, 11), генерируемых при воздействии фемтосекундного лазерного излучения с длиной волны 4.5 мкм на ламинарную струю аргона. Для интерпретации экспериментальных результатов в рамках макроскопического отклика среды была использована модель, описанная выше. Длина струи, как было указано выше, задается посредством диаметра трубки L . В работе используются трубки с диаметрами $L = 1$ мм (данные из [21]) и $L = 7.1$ мм. Спектры излучения гармоник при давлении 10 бар представлены на рис. 4. Как свидетельствуют графики на рис. 4, а также табл. 1, увеличение длины газовой среды позволило более чем на порядок (≈ 12 раз для 5-й гармоники) увеличить эффективность генерации за счет совпадения длины среды генерации $L = 7.1$ мм и длины перетяжки $b = 7.2$ мм. Совмещение данных размеров привело к увеличению количества атомов среды, участвующих во взаимодействии, что позволило, в частности, зарегистрировать также и 11-ю гармонику (рис. 4b). Дальнейшее увеличение длины среды также будет приводить к увеличению количества задействованных в генерации атомов, что должно приводить к увеличению эффективности генерации. На практике, как и в случае с повышением давления, рассмотренным выше, максимальная величина давления будет ограничена либо дисперсионной, либо нелинейной длиной.

Увеличение количества атомов, участвующих в генерации, при увеличении длины среды происходит за счет увеличения объема области взаимодействия. Так, объем области взаимодействия представляет собой объем каустики пучка в диапазоне $z \in [-L/2; L/2]$ (рис. 2), который в приближении гауссова пучка может быть выражен как:

$$V = \int_{-L/2}^{L/2} \pi r^2(z') dz', \quad (4)$$

где

$$r(z) = r_0 \cdot \sqrt{1 + \left(\frac{z}{z_R}\right)^2} \quad (5)$$

– радиус гауссова пучка в точке z , r_0 – радиус гауссова пучка в перетяжке $z = 0$. Подставляя (5) в (4), можно получить выражение для объема области взаимодействия:

$$V = \pi r_0^2 \cdot \left(L + \frac{L^3}{12z_R^2} \right). \quad (6)$$

Используя экспериментальные величины $r_0 = 70$ мкм (по уровню $1/e^2$ по интенсивности), $z_R = 3.6$ мм, $L = 1$ мм, 7.1 мм, можно показать, что отношение объемов взаимодействия для обоих длин сред составляет величину $V_{7.1 \text{ мм}}/V_{1 \text{ мм}} \approx 10$, что близко к отношению эффективностей преобразования при данных длинах сред ($\eta_{7.1 \text{ мм}}/\eta_{1 \text{ мм}} \approx 12 - 5$ -я гармоника). Небольшое различие данных отношений может объясняться наличием четырех факторов. Во-первых, это может объясняться наличием атомов газа вне трубки генерации в виде разлетающейся из отверстий трубки струи, что фактически приводит к увеличению длины области взаимодействия L . Во-вторых, данное различие может быть обусловлено влиянием генерируемой плазмы на распространение пучка в области перетяжки. В-третьих, это может объясняться отклонением закона распространения пучка в эксперименте от закона распространения идеального гауссова пучка (т.е. $M^2 \neq 1$ в эксперименте). И в-четвертых, данное отклонение может быть следствием проявления нелинейных эффектов распространения. Таким образом, увеличение эффективности преобразования при увеличении длины среды генерации объясняется увеличением объема области взаимодействия.

Сравнение эффективности генерации гармоник при давлении 10 бар и длинах $L = 1$ мм и $L = 7.1$ мм (1-я и 2-я строки), а также максимальная эффективность генерации (3-я строка) при давлении 16 бар и $L = 7.1$ мм представлены в табл. 1.

Таблица 1. Эффективность генерации гармоник

Длина и давление среды ↓	Номер гармоники →			
	5	7	9	11
$L = 1$ мм $p = 10$ бар	$2 \cdot 10^{-7}$	$6 \cdot 10^{-9}$	$3 \cdot 10^{-10}$	
$L = 7.1$ мм $p = 10$ бар	$2.5 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-7}$	10^{-8}	$8 \cdot 10^{-10}$
$L = 7.1$ мм $p = 16$ бар	10^{-5}	$2 \cdot 10^{-6}$	$1.5 \cdot 10^{-7}$	$3 \cdot 10^{-9}$

Следует отметить, что в проведенном эксперименте максимальная эффективность преобразования для 5-й гармоники (10^{-5} , 16 бар) лишь в два раза меньше, чем эффективность преобразования в работе [2] при генерации в Хе (45 бар), что может объясняться большей нелинейностью Хе в сравнении с Ar [29] и существенно большим давлением газа. При этом использование смеси Хе и CO₂ позволяет достичь эффективности преобразования, большей на два порядка по сравнению с данной работой (50 бар),

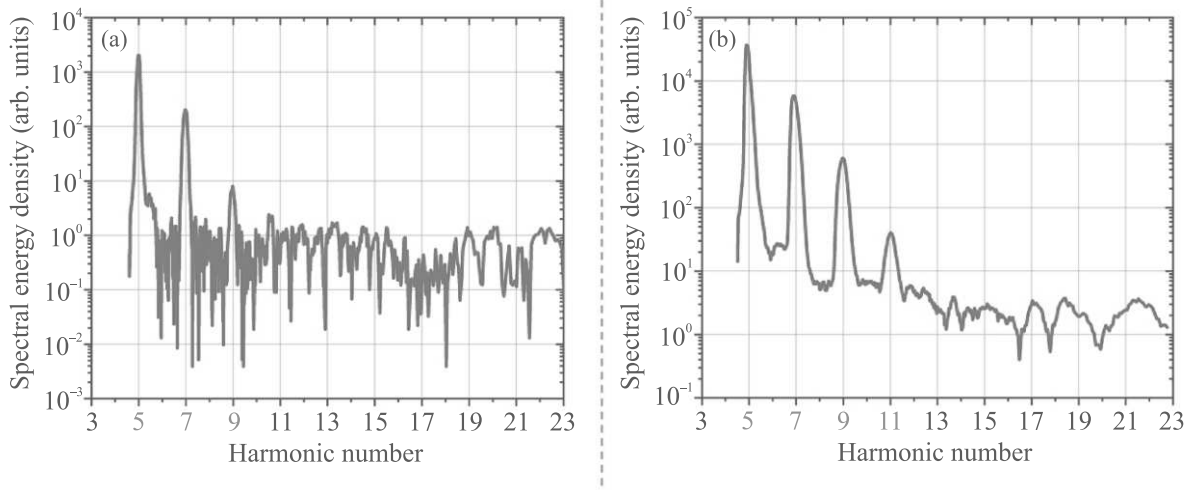


Рис. 4. (Цветной онлайн) Спектры излучения гармоник при давлении струи 10 бар, длина среды: (а) – $L = 1$ мм и (б) – $L = 7.1$ мм. Шумы спектрометра дают относительно малую погрешность в ± 10 отн. ед., не показанную на графиках

что может объясняться влиянием CO_2 резонанса в области длины волны 4.3 мкм и, опять же, значительно большим давлением газа.

Увеличение длины среды, помимо роста эффективности генерации, также приводит к изменению закона роста энергии гармоник от давления газовой струи на заданном масштабе давлений. Так, при длине среды 1 мм зависимость энергии 5-й гармоники от давления газовой струи имеет вид сигмоиды, в то время как при длине среды 7.1 мм вид той же зависимости имеет экспоненциальный характер (рис. 5). Данное изменение закона роста энергии 5-й гармоники объясняется влиянием условий фазового согласования, выражающихся математически посредством интеграла $F_5(p, L)$. С учетом вклада суммы материальной и плазменной расстройки волновых векторов $\Delta k_5^{1\text{bar}} = \Delta k_{5\text{disp}1\text{bar}} + \Delta k_{5\text{plasma}1\text{bar}}$ (см. выражение (3)), а также геометрической фазы, задаваемой конфокальным параметром пучка $b = 7.2$ мм, данная зависимость может быть вычислена для центральной части лазерного пучка $r = 0$ (см. выражение (1)). Результаты вычислений представлены на рис. 5. В рамках данных вычислений вклад материальной дисперсии был рассчитан напрямую ($\Delta k_{5\text{disp}1\text{bar}} = 12 \text{ м}^{-1}$) с учетом значения показателя преломления аргона для генерирующей волны, рассчитанного по формуле Селмейера из [27], а также значения показателя преломления на длине волны 5-й гармоники, взятое так же из работы [27]. Вклад плазменной дисперсии был использован в качестве аппроксимационного параметра, определявшегося исходя из наилучшего совпадения зависимостей на рис. 5 – его значение составило $\Delta k_{5\text{plasma}1\text{bar}} = 21 \text{ м}^{-1}$.

Отклонение от результатов эксперимента предположительно связано с влиянием нелинейных эффектов распространения, изменяющих пространственно-временную форму генерирующего импульса [21], которые не учитываются в рамках модели (1). Так, уже при давлении газовой струи 7 бар величина нелинейной длины L_{NL} становится равной длине среды $L = 7.1$ мм, дальнейшее повышение давления вплоть до 16 бар приводит к уменьшению нелинейной длины до 3 мм.

Таким образом, увеличение длины среды генерации L приводит как к увеличению эффективности генерации за счет увеличения количества задействованных в генерации атомов среды, так и к изменению закона роста энергии гармоник на фиксированном диапазоне давлений вследствие изменения условий фазового согласования. При этом корректное моделирование закона роста энергии гармоник от давления требует учета нелинейных эффектов распространения генерирующего излучения.

Закключение. В рамках данной работы исследовано влияние длины и давления газовой струи аргона на эффективность генерации гармоник низкого порядка высокоинтенсивным (до 10^{14} Вт/см^2) фемтосекундным лазерным излучением среднего ИК диапазона (длина волны 4.5 мкм). Показано, что увеличение длины среды генерации вплоть до длины перетяжки лазерного излучения позволяет более чем на порядок (≈ 12 раз) повысить эффективность генерации за счет увеличения количества атомов среды, участвующих во взаимодействии. Помимо этого, изменение длины среды генерации изменяет условия фазового согласования, что, в частности,

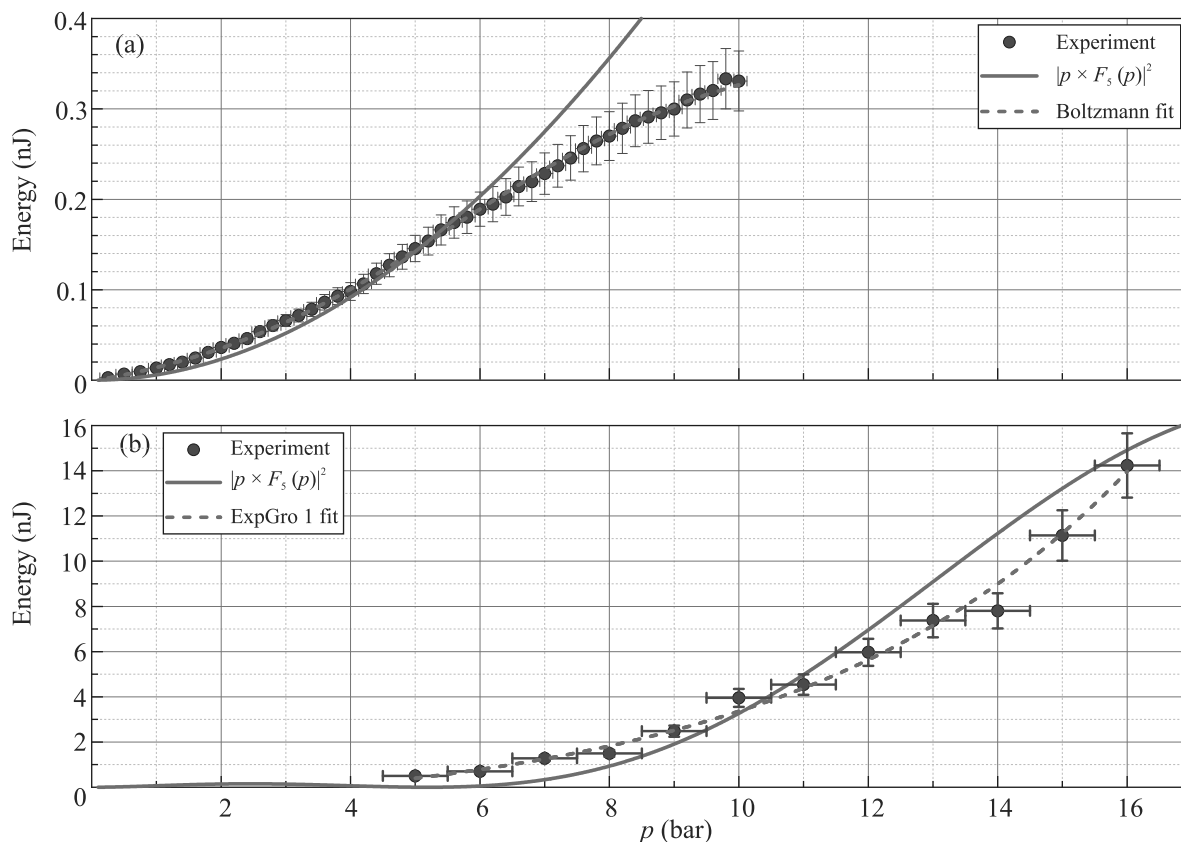


Рис. 5. (Цветной онлайн) (а) – Экспериментальная зависимость энергии 5-й гармоники и рассчитанная зависимость $E_5(p)$ (см. выражение (1)) от давления струи для среды длиной 1 мм. Расчетная зависимость соответствует значению $\Delta k_5^{1\text{bar}} = 33 \text{ м}^{-1}$. Пунктирная зависимость – аппроксимация экспериментальных данных сигма-функцией Больцмана $y(x) = A_2 + \frac{A_1 - A_2}{1 + \exp(\frac{x - x_0}{\Delta x})}$, $R^2 = 0.999$. (б) – Экспериментальная зависимость энергии 5-й гармоники и рассчитанная зависимость $E_5(p)$ (см. выражение (1)) от давления струи для среды длиной 7.1 мм. Расчетная зависимость соответствует значению $\Delta k_5^{1\text{bar}} = 33 \text{ м}^{-1}$. Пунктирная зависимость – аппроксимация экспериментальных данных экспоненциальной функцией $y(x) = A_1 \cdot \exp(x/t_1) + y_0$, $R^2 = 0.997$

приводит к изменению зависимости энергетического выхода гармоник от давления газовой струи. При этом для корректного описания данной зависимости необходимо учитывать нелинейные эффекты распространения лазерного излучения. Таким образом, полученные результаты демонстрируют возможность оптимизации эффективности генерации гармоник в газовой струе за счет подбора оптимальной длины области взаимодействия и свидетельствуют о необходимости учета нелинейно-оптических эффектов при количественной интерпретации экспериментальных результатов.

Работа поддержана грантом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации # 075-15-2021-1353. Б. В. Румянцев, А. В. Пушкин и К. Е. Михеев являются стипендиатами фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

1. T. Popmintchev, M.-Ch. Chen, D. Popmintchev et al. (Collaboration), *Science* **336**(6086), 1287 (2012).
2. E. A. Migal, S. Y. Stremoukhov, and F. V. Potemkin, *Phys. Rev. A* **101**(2), 021401 (2020).
3. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, А. В. Пахомов, М. О. Жукова, А. Н. Цыпкин, Н. Н. Розанов, *Письма в ЖЭТФ* **113**(4), 237 (2021).
4. А. А. Ланин, А. М. Желтиков, *Письма в ЖЭТФ* **104**(7), 475 (2016).
5. X. F. Li, A. l’Huillier, M. Ferray, L. A. Lompré, and G. Mainfray, *Phys. Rev. A* **39**(11), 5751 (1989).
6. Т. С. Саранцева, М. В. Фролов, Н. В. Введенский, *Письма в ЖЭТФ* **106**(3), 145 (2017).
7. А. В. Митрофанов, Д. А. Сидоров-Бирюков, М. В. Рожко, А. А. Воронин, П. Б. Глек, С. В. Рябчук, Е. Е. Серебрянников, А. Б. Федотов, А. М. Желтиков, *Письма в ЖЭТФ* **112**(1), 22 (2020).

8. В. А. Костин, Н. В. Введенский, Письма в ЖЭТФ **110**(7), 449 (2019).
9. R. A. Ganeev, G. S. Boltaev, S. Y. Stremoukhov, V. V. Kim, A. V. Andreev, and A. S. Alnaser, Eur. Phys. J. D **74**(10), 1 (2020).
10. Y. Liang, S. Augst, S. L. Chin, Y. Beaudoin, M. Chaker, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **27**(20), 5119 (1994).
11. T. Popmintchev, M.-Ch. Chen, A. Bahabad, M. Gerrity, P. Sidorenko, O. Cohen, I. P. Christov, M. M. Murnane, and H. C. Kapteyn, Proceedings of the National Academy of Sciences **106**(26), 10516 (2009).
12. В. В. Стрелков, В. Т. Платоненко, А. Ф. Стержантов, М. Ю. Рябикин, Успехи физических наук **186**(5), 449 (2016).
13. A. Pushkin, E. Migal, D. Suleimanova, E. Mareev, and F. Potemkin, Photonics **9**(2), 90 (2022).
14. M. Sayrac, A. A. Kolomenskii, and H. A. Schuessler, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **229**, 1 (2018).
15. Y. Niu, F. Liu, Y. Liu, H. Liang, Y. Yang, R. Ma, and D. Ding, Opt. Commun. **397**, 118 (2017).
16. C. M. Heyl, C. L. Arnold, A. Couairon, and A. L'huillier, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **50**(1), 013001 (2016).
17. M. Sayrac, A. A. Kolomenskii, S. Anumula, Y. Boran, N. A. Hart, N. I. Kaya, J. Strohaber, and H. A. Schuessler, Rev. Sci. Instrum. **86**(4), 043108 (2015).
18. M. Sayrac, A. A. Kolomenskii, and H. A. Schuessler, Optik **179**, 994 (2019).
19. E. A. Migal, F. V. Potemkin, and V. M. Gordienko, Laser Phys. Lett. **16**(4), 045401 (2019).
20. B. Shim, S. E. Schrauth, T. Popmintchev, M.-Ch. Chen, D. Popmintchev, S. Ališauskas, A. Pugzlys, A. Baltuška, M. Murnane, H. Kapteyn, and A. L. Gaeta, *Quantum Electronics and Laser Science Conference*, Optica Publishing Group (2012), p. QTu3H-4.
21. Б. В. Румянцев, К. Е. Михеев, А. В. Пушкин, Е. А. Мигаль, С. Ю. Стремоухов, Ф. В. Потемкин, Письма в ЖЭТФ **115**(7), 431 (2022).
22. J. Rothhardt, M. Krebs, S. Hädrich, S. Demmler, J. Limpert, and A. Tünnermann, New J. Phys. **16**(3), 033022 (2014).
23. E. Migal, A. Pushkin, B. Bravy, V. Gordienko, N. Minaev, A. Sirotkin, and F. Potemkin, Opt. Lett. **44**(10), 2550 (2019).
24. R. W. Boyd, *Nonlinear optics*, Academic press, N.Y. (2020).
25. J. Reintjes, *Nonlinear optical parametric processes in liquids and gases*, Elsevier, Amsterdam (2012).
26. A. Bideau-Mehu, Y. Guern, R. Abjean, and A. Johannin-Gilles, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **25**(5), 395 (1981).
27. E. R. Peck and D. J. Fisher, JOSA **54**(11), 1362 (1964).
28. С. А. Ахманов, В. А. Выслоух, А. С. Чиркин, *Оптика фемтосекундных лазерных импульсов*, Наука, М. (1988).
29. Á. Börzsönyi, Z. Heiner, A. P. Kovács, M. P. Kalashnikov, and K. Osvay, Opt. Express **18**(25), 25847 (2010).

Моды Шмидта и временная волновая функция широкополосного бифотонного поля

П. А. Прудковский¹⁾

Физический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 15 октября 2022 г.

После переработки 18 октября 2022 г.

Принята к публикации 18 октября 2022 г.

Теоретически исследована волновая функция широкополосного бифотонного поля, возникающего при параметрическом рассеянии в аperiodически поляризованном нелинейном кристалле с линейным чирпом под действием короткого импульса накачки. Найден вид мод Шмидта как в спектральном, так и во временном представлении. Найдена зависимость числа мод Шмидта от длительности импульса накачки и показано, что она имеет минимум при достаточно малой длительности импульса накачки порядка 100 фс. Найден вид волновой функции бифотонов во временном представлении и исследовано, как область максимума корреляции между моментами детектирования фотонов сигнального и холостого рассеянного излучения меняется при изменении длительности импульса накачки. Показано, что максимум временной корреляционной функции интенсивностей сигнального и холостого излучения имеет существенно асимметричную форму. Более резкая из его границ в случае достаточно длинных импульсов накачки имеет малую ширину, не превышающую 30 фс, и может использоваться для задач синхронизации событий даже без компенсации дисперсионного расплывания волновых пакетов бифотонного поля.

DOI: 10.31857/S1234567822220049, EDN: lyfxft

Параметрическое рассеяние (ПР) света – хорошо известный нелинейно-оптический процесс генерации сильно коррелированных бифотонных полей. Квантовые корреляции между сигнальными и холостыми рассеянными фотонами нашли свое применение во многих областях нелинейной и квантовой оптики, включая приготовление различных неклассических состояний света, проверку неравенств Белла, построение “фантомных” изображений, безэталонную фотометрию, методы нелинейной спектроскопии и многое другое [1–3]. Корреляция между парой фотонов, родившихся в результате распада одного фотона накачки, проявляется, в частности, в синхронности попадания этих двух фотонов на регистрирующие их детекторы. Под синхронностью в данном случае понимается совпадение моментов появления фотоимпульсов детекторов с точностью до времени корреляции этих фотонов, обратно пропорционального ширине спектра детектируемых фотонов. Поэтому один из возможных способов применения коррелированных фотонов – возможность синхронизации различных событий с высокой точностью при помощи широкополосных бифотонных полей [4].

Метод генерации бифотонных полей с широким спектром в аperiodически поляризованных нелиней-

ных кристаллах был предложен еще в 2003 г. [5]. В таких кристаллах условие коллинеарного квазисинхронизма между волновыми векторами сигнального и холостого рассеянного излучения выполняется на разных частотах в разных областях кристалла благодаря изменению вектора обратной решетки сегнетоэлектрических доменов. В работе Харриса [6], а также в ряде последующих работ [7–11] обсуждалась возможность приготовления предельно коротких бифотонных состояний, в которых оба фотона могут быть представлены как волновые пакеты, содержащие всего несколько периодов колебания поля, в кристаллах с линейным “чирпом”, т.е. линейной зависимостью вектора обратной решетки от координаты. Это требует не только получения коллинеарного ПР в аperiodически поляризованном нелинейном кристалле, но и компенсации дисперсионного расплывания бифотонных состояний в процессе генерации, из-за которого возникающий на выходе кристалла бифотон не является фурье-ограниченным – его время корреляции существенно превышает обратную ширину спектра [9]. Эксперимент с попыткой компенсации нелинейного фазового набег широкополосных бифотонных состояний описан в работе [10].

Однако компенсация фазового набег рассеянного излучения сразу в широкой полосе частот является нетривиальной задачей. В работе [12] бы-

¹⁾e-mail: vysogota@gmail.com

ло показано, что в случае кристаллов с линейным чирпом зависимость фазового набега, связанного с дисперсионным расплыванием бифотона, от частоты имеет сложный вид и не может быть полностью компенсирована при помощи пассивных оптических элементов. Поэтому в работе [12] был предложен квадратично-гиперболический закон изменения вектора обратной решетки в кристалле, для которого фазовый набег должен иметь более простую частотную зависимость. В работе [13] была показана экспериментальная возможность получения широкополосных бифотонных полей в кристалле с квадратично-гиперболическим чирпом, хотя и без фазовой компенсации. А в работе [14] было показано, как нетривиальная частотная зависимость фазового набега проявляется в схеме нелинейной интерференции типа Маха–Цандера с двумя нелинейными кристаллами.

В то же время во всех работах при описании широкополосного бифотонного поля использовалось приближение непрерывной накачки. Однако если длительность импульса накачки сравнима или даже меньше длины дисперсионного расплывания импульсов в кристалле, то спектр накачки может оказывать дополнительное влияние на структуру бифотонного поля [15]. В связи с этим в данной работе рассмотрено, как спектральная и временная структура широкополосного бифотонного поля зависит от длительности импульса накачки. Анализ структуры рассеянного излучения будет производиться на языке мод Шмидта, который является удобным инструментом для описания сильно перепутанных бифотонных полей [16–19]. В частности, в работе [18] было показано, как число мод Шмидта бифотонного поля зависит от длительности импульса накачки в случае ПР в однородном кристалле. Поэтому полученные в данной работе результаты для изменения числа мод Шмидта и временной волновой функции широкополосных бифотонов при уменьшении длительности импульса накачки будет полезно сравнивать именно с результатами работы [18].

Рассмотрим коллинеарное ПР в нелинейном кристалле под действием импульса накачки на центральной частоте ω_p :

$$E_p(t, z) = E_0 e^{-i\omega_p t} \int f(\nu) e^{ik(\omega_p + \nu)z - i\nu t} d\nu. \quad (1)$$

Будем считать, что импульс имеет гауссову форму, поэтому спектр накачки также гауссов: $f(\nu) = e^{-\nu^2 \tau^2 / 2}$, где τ – длительность импульса.

Оператор положительно-частотной части поля рассеянного излучения можно записать в виде

$$\hat{E}^{(+)}(t, z) = e^{-i\omega_0 t} \int_{-\omega_0}^{\omega_0} C_\Omega \hat{a}(\Omega) e^{i\{k(\omega_0 + \Omega)z - \Omega t\}} d\Omega, \quad (2)$$

где $\omega_0 = \omega_p / 2$ – половина частоты накачки, $\hat{a}(\Omega)$ – оператор уничтожения фотонов на частоте $\omega_0 + \Omega$, причем компоненты поля с $\Omega > 0$ соответствуют сигнальному, а с $\Omega < 0$ – холостому рассеянному излучению. Слабой частотной зависимостью коэффициентов разложения C_Ω в нашем случае можно пренебречь. Волновые вектора рассеянного излучения в выражении (2) сонаправлены с волновым вектором накачки. Приготовление широкополосного бифотонного поля в случае неколлинеарного синхронизма создает дополнительные сложности, связанные с необходимостью сбора рассеянных под разными углами сопряженных компонент сигнального и холостого излучения. Поэтому обычно при описании широкополосного бифотонного поля ограничиваются только коллинеарным синхронизмом и не задумываются о структуре поперечных пространственных мод.

Квадратичная восприимчивость в аперидически поляризованном кристалле также зависит от координаты. Учитывая только первую гармонику в ее разложении, можно записать ее в виде [12]

$$\chi^{(2)}(z) \approx \chi_0^{(2)} \exp\left(-i \int_0^z K(z') dz'\right), \quad (3)$$

где $K(z)$ – закон изменения обратного вектора доменной решетки в кристалле.

Оператор нелинейного взаимодействия накачки и рассеянного излучения в кристалле теперь можно представить в виде

$$\hat{G}_{nl}(z) = \hbar\gamma \int f(\Omega_s - \Omega_i) e^{i\Delta k(\Omega_s, \Omega_i)z - i \int_0^z K(z') dz'} \times \\ \times \hat{a}_s^+(\Omega_s) \hat{a}_i^+(\Omega_i) d\Omega_s d\Omega_i + \text{э.с.}, \quad (4)$$

где $\Delta k(\Omega_s, \Omega_i) = k(\omega_p + \Omega_s - \Omega_i) - k(\omega_0 + \Omega_s) - k(\omega_0 - \Omega_i)$ – расстройка фазового синхронизма, а γ – коэффициент параметрического взаимодействия, который пропорционален амплитуде поля накачки и величине квадратичной нелинейности.

Используя полученный оператор нелинейного взаимодействия, можно сразу записать состояние рассеянного излучения на выходе из кристалла в виде

$$|\Psi(L)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^L \hat{G}_{nl}(z) dz} |\text{vac}\rangle. \quad (5)$$

В общем случае вычисление оператора эволюции представляет собой сложную задачу, однако в случае спонтанного ПР при малых значениях коэффициента параметрического взаимодействия экспоненту можно разложить в ряд и получить для состояния бифотонного поля выражение

$$|\Psi\rangle = -i\gamma L \int F(\Omega_s, \Omega_i) \hat{a}_s^+ (\Omega_s) \hat{a}_i^+ (\Omega_i) d\Omega_s d\Omega_i |\text{vac}\rangle, \quad (6)$$

где функцию

$$F(\Omega_s, \Omega_i) = \frac{1}{L} f(\Omega_s - \Omega_i) \times \int_0^L \exp \left\{ i\Delta k(\Omega_s, \Omega_i)z - i \int_0^z K(z') dz' \right\} dz \quad (7)$$

называют волновой функцией бифотона – квадрат ее модуля определяет вероятность рождения пары фотонов: сигнального на частоте $\omega_0 + \Omega_s$ и холостого на частоте $\omega_0 - \Omega_i$.

Далее ограничимся рассмотрением кристалла с линейным законом изменения обратного вектора решетки $K(z) = K_0 - \xi z$. Для расчетов будем использовать те же параметры возможного эксперимента, что и в работе [12]: ПР в кристалле ниобата лития толщиной $L = 5$ мм под действием импульса накачки с длиной волны $\lambda_p = 532$ нм, параметры линейного чирпа $K_0 = 894 \text{ мм}^{-1}$, $\xi = 38.5 \text{ мм}^{-2}$ обеспечивают генерацию непрерывного спектра бифотонов в полосе от $\Omega_{s,i}/\omega_0 = 0.1$ до $\Omega_{s,i}/\omega_0 = 0.5$.

В случае линейной зависимости $K(z)$ в выражении (7) показатель экспоненты квадратично зависит от координаты z , поэтому внешний интеграл можно записать в виде

$$F(\Omega_s, \Omega_i) = \sqrt{\frac{2}{L^2 \xi}} e^{\frac{(\Omega_s - \Omega_i)^2 \tau^2}{2} - \frac{i(\Delta k - K_0)^2}{2\xi}} \times \left[E \left(\sqrt{\frac{\xi}{2}} L + \frac{\Delta k - K_0}{\sqrt{2\xi}} \right) - E \left(\frac{\Delta k - K_0}{\sqrt{2\xi}} \right) \right], \quad (8)$$

где функция $E(x) = \int_0^x e^{iy^2} dy = C(x) + iS(x)$ выражается через интегралы Френеля (также ее можно выразить через интеграл ошибок на комплексной плоскости [6, 8]).

Используя разложение Шмидта [16], всегда можно представить волновую функцию бифотона в виде

$$F(\Omega_s, \Omega_i) = \sum_j R_j U_j(\Omega_i) V_j(\Omega_s), \quad (9)$$

где функции $U_j(\Omega_i)$ и $V_j(\Omega_s)$ определяют спектр отдельных мод Шмидта холостого и сигнального рассеянного поля, а R_j – их собственные значения. Следует отметить, что так как функция $F(\Omega_s, \Omega_i)$ несимметрична относительно частот Ω_s и Ω_i , собственные значения R_j в общем случае комплексные.

Если волновую функцию бифотона можно представить в виде произведения двух функций линейных комбинаций частот Ω_s и Ω_i , которые имеют узкий максимум, эти функции можно приближенно заменить гауссианами и в этом приближении аналитически найти моды Шмидта [17, 18]. Однако в случае широкополосных бифотонов это совсем не так. Модуль выражения в квадратных скобках в формуле (8) имеет относительно узкий максимум только как функция разности частот $\Omega_s - \Omega_i$. А вот как функция суммы частот $\Omega_s + \Omega_i$ он остается практически постоянным в широкой полосе частот, что как раз и обеспечивает генерацию широкополосных бифотонов. Поэтому разложение Шмидта для функции (8) производилось численно. Используя найденные при этом собственные значения R_j , можно вычислить число Шмидта, определяющее эффективное число мод Шмидта рассеянного излучения:

$$K = \left(\sum_j |R_j|^2 \right)^2 / \sum_j |R_j|^4. \quad (10)$$

На рисунке 1 показана зависимость числа Шмидта широкополосного бифотонного поля от длительности импульса накачки τ

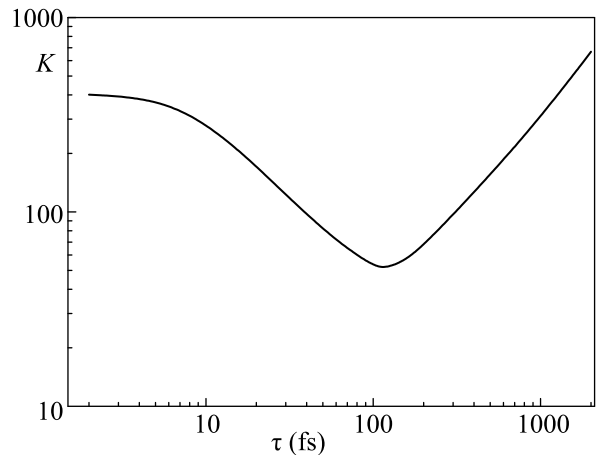


Рис. 1. Зависимость числа Шмидта K (10) от длительности импульса накачки τ

ности импульса накачки. С ее уменьшением эффективное число мод Шмидта уменьшается, пока не достигает минимума при длительности импульса накачки $\tau \approx 100 \div 120$ фс. Но даже в этом случае эф-

фективное число мод Шмидта достаточно велико – порядка 50. При дальнейшем уменьшении длительности импульса число Шмидта снова начинает расти. В работе [18] было показано, что в случае ПР в однородном кристалле зависимость числа Шмидта от длительности импульса накачки имеет схожий вид и тоже достигает минимального числа мод порядка 70, но при существенно большей длительности импульса – порядка 1 пс.

Используя разложение Шмидта, несложно получить интенсивность рассеяния холостого излучения на заданной частоте в виде суммы интенсивностей отдельных мод Шмидта на этой частоте:

$$\begin{aligned} \langle I(\Omega_i) \rangle &= \langle \Psi | \hat{a}_i^+ (\Omega_i) \hat{a}_i (\Omega_i) | \Psi \rangle = \\ &= \int |F(\Omega_s, \Omega_i)|^2 d\Omega_s = \sum_j |R_j U_j(\Omega_i)|^2. \end{aligned} \quad (11)$$

Аналогичное выражение получается и для интенсивности рассеяния сигнального излучения: $I(\Omega_s) = \sum_j |R_j V_j(\Omega_s)|^2$. При этом вклад отдельной моды пропорционален квадрату модуля ее собственного значения R_j . На рисунке 2 показан спектр отдель-

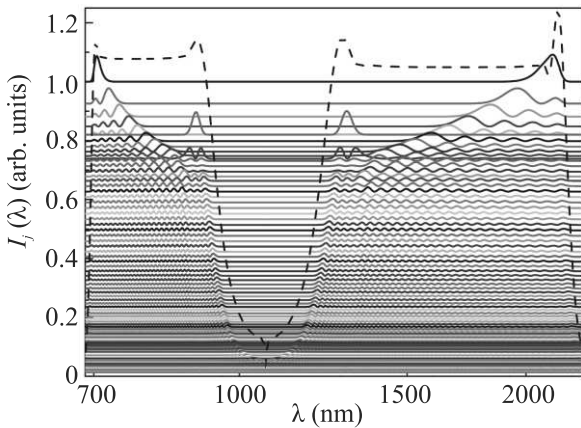


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектр отдельных мод Шмидта сигнального ($\lambda < 1064$ нм) и холостого ($\lambda > 1064$ нм) рассеянного излучения. Для удобства моды сдвинуты на величину их собственного значения: $I_j(\lambda) = |R_j|^2(1 + |U_j(\lambda)|^2)$. Пунктиром показан суммарный спектр широкополосного бифотонного излучения

ных мод Шмидта широкополосных бифотонов в случае длительности импульса накачки $\tau = 100$ фс. Для удобства график для каждой моды сдвинут на величину квадрата ее собственного значения. Видно, что структура мод имеет достаточно сложный вид. Моды накладываются друг на друга, и вряд ли возможно в эксперименте их разделить, так что поле находится в сильно перепутанном состоянии. Пунктиром на том

же графике изображен суммарный спектр холостого и сигнального излучения. Как и следовало ожидать, в результате сложения большого числа мод Шмидта формируется спектр с практически постоянной интенсивностью в заданной широкой полосе длин волн.

Теперь рассмотрим временные характеристики рассеянного бифотонного излучения. Вероятность обнаружить на выходе из кристалла фотон холостого излучения в момент времени t_i , а фотон сигнального излучения – в момент времени t_s определяется квадратом модуля волновой функции бифотона во временном представлении [4, 18]:

$$\begin{aligned} F(t_i, t_s) &= \iint F(\Omega_s, \Omega_i) \times \\ &\times e^{-ik(\omega_0 - \Omega_i)L - ik(\omega_0 + \Omega_s)L - i\Omega_i t_i + i\Omega_s t_s} d\Omega_s d\Omega_i. \end{aligned} \quad (12)$$

Используя разложение Шмидта, ее можно представить в виде

$$F(t_i, t_s) = \sum_j R_j U_j(t_i) V_j(t_s), \quad (13)$$

где $U_j(t_i)$ и $V_j(t_s)$ – моды Шмидта во временном представлении:

$$\begin{aligned} U_j(t_i) &= \int_0^{\omega_0} U_j(\Omega_i) e^{-ik(\omega_0 - \Omega_i)L - i\Omega_i t_i} d\Omega_i, \\ V_j(t_s) &= \int_0^{\omega_0} V_j(\Omega_s) e^{-ik(\omega_0 + \Omega_s)L + i\Omega_s t_s} d\Omega_s. \end{aligned} \quad (14)$$

Безусловно, для вычисления функции $F(t_i, t_s)$ разложение Шмидта не обязательно. Однако если моды Шмидта уже известны, то процедура вычисления волновой функции бифотона упрощается: вместо двукратного интегрирования по формуле (12) достаточно найти вид мод Шмидта во временном представлении (14) путем однократного интегрирования. При этом зависимость полной интенсивности сигнального и холостого рассеянного излучения от времени по-прежнему определяется суммой интенсивностей мод Шмидта:

$$\begin{aligned} \langle I_i(t) \rangle &= \langle \Psi | \hat{E}_i^-(t, L) \hat{E}_i^+(t, L) | \Psi \rangle = \sum_j |R_j U_j(t)|^2, \\ \langle I_s(t) \rangle &= \langle \Psi | \hat{E}_s^-(t, L) \hat{E}_s^+(t, L) | \Psi \rangle = \sum_j |R_j V_j(t)|^2. \end{aligned} \quad (15)$$

Корреляция между сигнальными и холостыми фотонами в различные моменты времени может

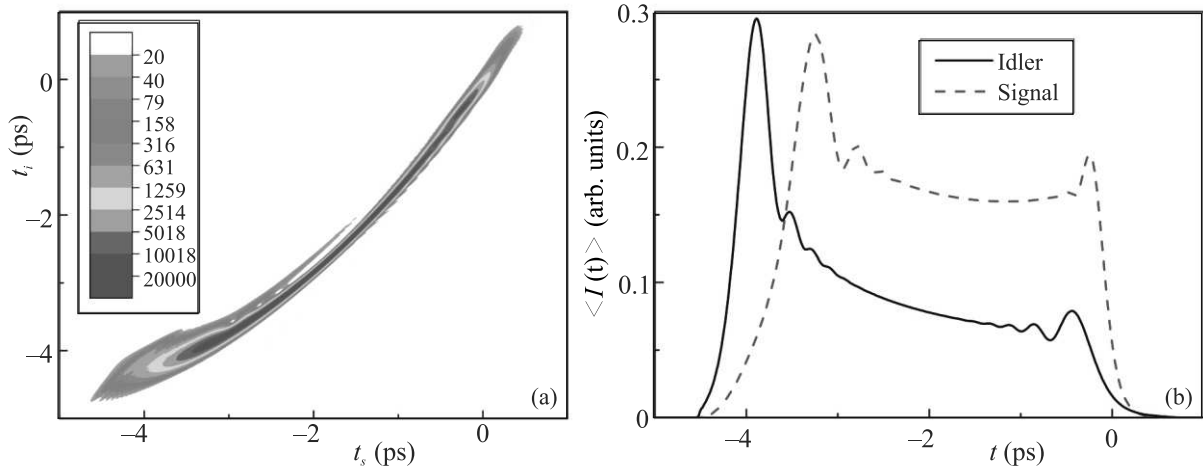


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Волновая функция бифотона во временном представлении $|F(t_i, t_s)|^2$ (12) и (б) – формы импульсов сигнального и холостого рассеянного излучения (15) на выходе из кристалла в случае импульса накачки длительностью $\tau = 100$ фс. Момент времени $t = 0$ соответствует положению середины импульса накачки

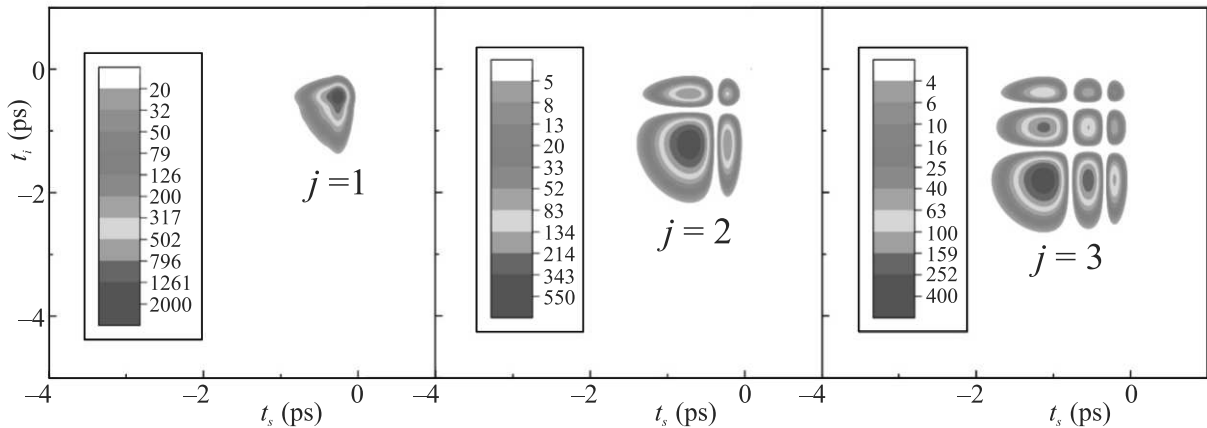


Рис. 4. (Цветной онлайн) “Частичные” волновые функции бифотона $|F_j(t_i, t_s)|^2$ (17) для первых трех $j = 1; 2; 3$ мод Шмидта в случае импульса накачки длительностью $\tau = 100$ фс

быть описана при помощи корреляционной функции интенсивностей рассеянного излучения. Избыточная корреляция, связанная с бифотонным характером рассеянного поля, выражается через ковариацию интенсивностей. Несложно показать, что она определяется квадратом модуля волновой функции бифотона:

$$\begin{aligned} \text{cov}(I_i(t_i)I_s(t_s)) &\equiv \\ &\equiv \langle I_i(t_i)I_s(t_s) \rangle - \langle I_i(t_i) \rangle \langle I_s(t_s) \rangle = |F(t_i, t_s)|^2. \end{aligned} \quad (16)$$

Рассмотрим, как меняется форма волновой функции бифотона при изменении длительности импульса накачки. На рисунке 3 показана функция $|F(t_i, t_s)|^2$ для случая минимального числа мод Шмидта при $\tau = 100$ фс, а также формы импульсов сигнального и холостого рассеянного излучения. Видно, что область максимальной корреляции между сигнальным

и холостым излучением представляет собой узкую полосу на всей длине импульсов сигнального и холостого излучения. Эта полоса не прямая, что связано с дисперсией различных частотных компонент накачки и рассеянного излучения в кристалле.

На рисунке 4 показаны “частичные” волновые функции бифотона

$$|F_j(t_i, t_s)|^2 = |R_j U_j(t_i) V_j(t_s)|^2 \quad (17)$$

отдельно для первых трех мод Шмидта. Видно, что для отдельных мод Шмидта “частичные” волновые функции имеют значительно большую ширину, чем для полной волновой функции бифотона на рис. 3а – узкий корреляционный максимум получается только в результате суперпозиции большого числа мод Шмидта.

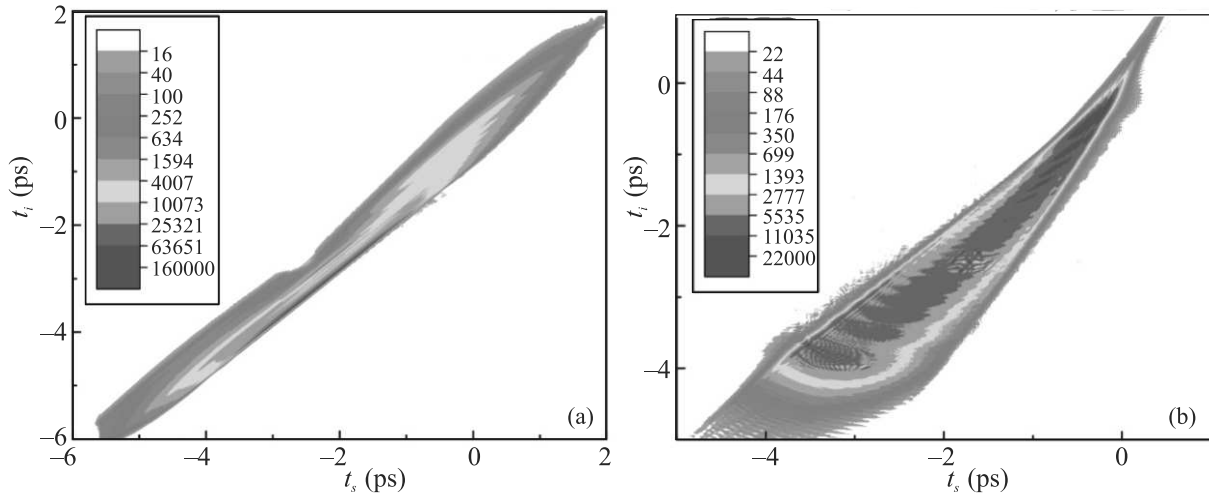


Рис. 5. (Цветной онлайн) Волновая функция бифотона во временном представлении $|F(t_i, t_s)|^2$ (12) для случаев длительности импульса накачки $\tau = 1$ пс (a) и $\tau = 10$ фс (b)

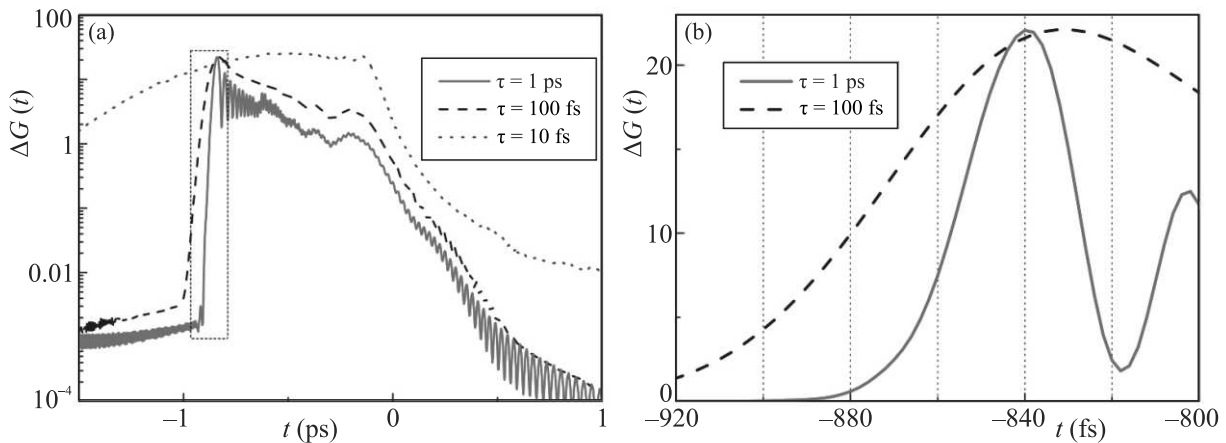


Рис. 6. (Цветной онлайн) (a) – Зависимость функции избыточной корреляции сигнального и холостого рассеянного излучения от временной задержки между ними $\Delta G(t)$ (18) для случаев длительностей импульсов накачки 1 пс, 100 и 10 фс. Пунктирным прямоугольником выделена область резкого возрастания функции. (b) – Область резкого возрастания корреляционной функции в крупном масштабе

На рисунке 5а показана волновая функция бифотона в случае достаточно длинного импульса накачки $\tau = 1$ пс. При этом область максимальной корреляции имеет форму узкой полосы, соответствующей максимумам импульсов сигнального и холостого излучения. По сравнению с волновой функцией бифотона для $\tau = 100$ фс на рис. 3а, здесь она практически прямая, но при этом заметно более короткая.

В случае короткого импульса накачки $\tau = 10$ фс (рис. 5b) область максимальной корреляции уже не выглядит узкой полосой. Она становится существенно более широкой и имеет приблизительно треугольную форму. Сходная треугольная форма волновой функции бифотонов с максимумом в остром углу

треугольника была получена и в работе [18] для случая ПР в однородном кристалле в случае предельно короткого импульса накачки.

Безусловно, в экспериментальных условиях невозможно измерить двумерную корреляционную функцию интенсивностей сигнального и холостого рассеянного излучения. Вместо этого обычно измеряют одномерную корреляционную функцию, зависящую от временного сдвига t между сигнальным и холостым излучением. Величина избыточной корреляции будет определяться интегралом от квадрата модуля волновой функции бифотона по всей длине импульсов рассеянного излучения вдоль прямой $t_i - t_s = t = \text{const}$:

$$\Delta G(t) = \int |F(t_s + t, t_s)|^2 dt_s. \quad (18)$$

Характерное время корреляции в случае широкополосных бифотонов крайне мало, и быстродействия современных детекторов недостаточно для его измерения. Поэтому в работах [10, 13] для регистрации узкого пика корреляции между сигнальной и холостой компонентами широкополосного бифотонного поля измерялась интенсивность генерации сигнала суммарной частоты, полученного в еще одном нелинейном кристалле.

На рисунке 6а показана корреляционная функция $\Delta G(t)$ для тех же трех длительностей импульсов накачки, что и на рис. 3 и 5. Видно, что из-за дисперсионного расплывания ширина корреляционного пика существенно больше обратной ширины спектра бифотонного поля $\Delta\omega^{-1} \approx 9$ фс. Однако в случае длинных импульсов накачки этот пик имеет резкую границу со стороны отрицательных значений t . На рисунке 6б видно, что ширина области резкого возрастания корреляционной функции в случае импульса накачки длительностью $\tau = 1$ пс составляет приблизительно 30 фс. Наличие столь резкой границы связано с существенной асимметрией волновой функции бифотона (рис. 5а) – область максимальной корреляции находится с краю и резко обрывается в сторону отрицательных $t = t_i - t_s$. С уменьшением длительности импульса накачки резкая граница корреляционного максимума постепенно расплывается.

Таким образом, форма волновой функции бифотона во временном представлении (рис. 5а), а также полученный из нее пик корреляционной функции интенсивностей (рис. 6) показывает, что даже без компенсации дисперсионного расплывания одна из границ корреляционного максимума имеет весьма малую ширину, которая может использоваться для синхронизации событий с помощью широкополосного бифотонного поля с точностью до нескольких десятков фемтосекунд. При этом уменьшение длительности импульса накачки приводит к расплыванию этой границы, т.е. предпочтительнее использовать импульсы длиннее 1 пс. Впрочем, длинная и узкая область корреляционного максимума в случае минимума числа мод Шмидта при $\tau = 100$ фс (рис. 3а) позволяет предположить, что компенсация дисперсионного расплывания могла бы позволить выпрямить эту область. Поэтому при наличии фазовой компенсации импульс накачки с длительностью, соответствующей минимуму числа мод Шмидта, вероятно, мог бы также обеспечить достаточно узкий корреляционный максимум.

Таким образом, в работе исследован вид волновой функции широкополосного бифотонного поля, возникающего при ПР в аперидически поляризованном нелинейном кристалле с линейным чирпом, как в спектральном, так и во временном представлении. Структура мод Шмидта для этой волновой функции имеет достаточно сложный вид даже в случае минимального числа мод Шмидта, которое в наших условиях составляет приблизительно 50 и достигается при длительности импульса накачки, равной $100 \div 120$ фс. Анализ волновой функции широкополосных бифотонов во временном представлении показал, что хотя максимум корреляционной функции интенсивностей сигнального и холостого рассеянного излучения имеет большую ширину из-за дисперсионного расплывания бифотонных волновых пакетов в кристалле, в случае достаточно длинных импульсов накачки одна из границ корреляционного максимума остается достаточно резкой и может использоваться для задач синхронизации.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований # 20-02-00621 А.

1. S. P. Walborn, C. H. Monken, S. Pádua, and P. H. Souto Ribeiro, *Phys. Rep.* **495**, 87 (2010).
2. S. V. Polyakov and A. L. Migdall, *Opt. Express* **15**, 1390 (2007).
3. A. V. Paterova and L. A. Krivitsky, *Light Sci. Appl.* **9**, 82 (2020).
4. К. Г. Катамадзе, А. В. Пащенко, А. В. Романова, С. П. Кулик, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 613 (2022).
5. K. L. Baker, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 3841 (2003).
6. S. E. Harris, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 063602 (2007).
7. M. Charbonneau-Lefort, B. Afeyan, and M. M. Fejer, *J. Opt. Soc. Am. B* **25**, 680 (2008).
8. M. B. Nasr, S. Carrasco, B. E. A. Saleh, A. V. Sergienko, M. C. Teich, J. P. Torres, L. Torner, D. S. Hum, and M. M. Fejer, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 183601 (2008).
9. Г. Х. Китаева, М. В. Чехова, О. А. Шумилкина, *Письма в ЖЭТФ* **90**, 190 (2009).
10. S. Sensarn, G. Y. Yin, and S. E. Harris, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 253602 (2010).
11. D. B. Horoshko and M. I. Kolobov, *Phys. Rev. A* **88**, 033806 (2013).
12. D. B. Horoshko and M. I. Kolobov, *Phys. Rev. A* **95**, 033837 (2017).
13. M. V. Chekhova, S. Germanskiy, D. B. Horoshko, G. Kh. Kitaeva, M. I. Kolobov, G. Leuchs, C. R. Phillips, and P. A. Prudkovskii, *Opt. Lett.* **43**, 375 (2018).
14. D. B. Horoshko, M. I. Kolobov, F. Gumpert, I. Shand, F. König, and M. V. Chekhova, *J. Mod. Opt.* **67**, 41 (2020).

15. П. А. Прудковский, Письма в ЖЭТФ **111**, 529 (2020).
16. A. Ekert and P. L. Knight, Am. J. Phys. **63**, 415 (1995).
17. M. V. Fedorov, M. A. Efremov, P. A. Volkov, E. V. Moreva, S. S. Straupe, and S. P. Kulik, Phys. Rev. A **77**, 032336 (2008).
18. Yu. M. Mikhailova, P. A. Volkov, and M. V. Fedorov, Phys. Rev. A **78**, 062327 (2008).
19. F. M. Miatto, T. Brougham, and A. M. Yao, Eur. Phys. J. D **66**, 183 (2012).

Автоколебания крутящего момента при деформации кручением под высоким давлением сплава NdFeB

А. А. Мазилкин^{+*}, С. Г. Протасова⁺, Б. Б. Страумал^{+*×1)}, А. В. Дружинин^{+×}

⁺ Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черногловка, Россия

^{*} Научный центр РАН в Черногловке, 142432 Черногловка, Россия

[×] Национальный исследовательский технологический университет “МИСиС”, 119049 Москва, Россия

Поступила в редакцию 5 сентября 2022 г.

После переработки 27 сентября 2022 г.

Принята к публикации 28 сентября 2022 г.

В работе изучено поведение многокомпонентного сплава на основе системы NdFeB при кручении под высоким давлением (КВД). При КВД происходит частичная аморфизация сплава, причем доли аморфной и кристаллической фаз изменяются в процессе деформации. Крутящий момент плавно возрастает с увеличением угла поворота наковален, а с определенной деформации ($\sim 1000^\circ$) возникают автоколебания крутящего момента. Крутящий момент изменяется в интервале от 500 до 600 Н·м с периодом около полутора секунд. Деформация сплава в режиме автоколебаний сопровождается интенсивной акустической эмиссией с частотой звукового сигнала ~ 1 –2 с. Это явление можно объяснить периодической сменой механизма деформации при КВД от дислокационного (характерного для кристаллической фазы) к бездислокационному (типичному для аморфного состояния).

DOI: 10.31857/S1234567822220050, EDN: lykklk

Начиная с середины 1980-х гг., сплавы на основе системы NdFeB продолжают оставаться лучшими материалами для создания постоянных магнитов [1]. Соединение Nd₂Fe₁₄B (Т-фаза [2, 3]) было практически одновременно синтезировано в лабораториях General Motors Research Laboratories и Sumitomo Special Metals [4]. Оно демонстрирует рекордные значения намагниченности насыщения ($J_S > 1.2$ Тл) и коэффициента магнито-кристаллической анизотропии ($K_1 > 10^6$ Дж/м³) при достаточно высокой температуре Кюри ($T_C > 250$ °С). Эти свойства обеспечивают высокое значение запасенной магнитной энергии $BH_{\max} > 450$ кДж/м³ [5]. Высокая коэрцитивная сила сплавов на основе NdFeB достигается за счет того, что зерна ферромагнитной Т-фазы изолированы друг от друга тонкими слоями немагнитной фазы [6].

Важной задачей для материаловедения остается улучшение свойств материалов, в том числе и постоянных магнитов на основе Т-фазы. Для изготовления таких магнитов в основном используется метод жидкофазного спекания магнитно-ориентированных порошков [7], либо метод кристаллизации из расплава, который позволяет получать нанокристаллы Nd₂Fe₁₄B в окружении аморфной фазы [8].

Один из сравнительно новых методов синтеза материалов – это интенсивная пластическая деформация (ИПД) [9]. Сдвиговая деформация в условиях высокого приложенного давления позволяет достигать значительного измельчения структуры образцов, и поэтому используется для синтеза нанокристаллических материалов. Применение ИПД может также приводить к фазовым превращениям [10–14]. К настоящему времени разработано большое разнообразие схем ИПД, как, например, кручение при высоком давлении (КВД), равноканальное угловое пресование (РКУП), винтовая экструзия и др. [15]. В наших предыдущих работах по изучению структурных изменений в тройных сплавах NdFeB при ИПД мы наблюдали, что КВД может привести к их частичной [16] или к полной [17] аморфизации, в зависимости от состава. Целью данной работы было изучение структурных изменений в зависимости от величины деформации при КВД многокомпонентного сплава на основе системы NdFeB, используемого для изготовления постоянных магнитов.

Для исследования был взят многокомпонентный сплав на основе системы NdFeB, близкий по составу к сплаву, изученному нами ранее в работе [16]. Состав исследуемого промышленного сплава: Fe–10.2 Nd–7.6–3.6 Dy–5.5 B–1.2 Co (ат. %) был определен с помощью атомно-эмиссионной спектроско-

¹⁾e-mail: straumal@issp.ac.ru

пии с индуктивно-связанной плазмой. Для деформации методом КВД вырезались диски диаметром 10 мм и толщиной 0.6 мм. Диски подвергали КВД в установке Бриджмена (W. Klement GmbH, Lang, Austria). Установка имела компьютерное управление и позволяла измерять и регистрировать крутящий момент во время деформации. Деформация образцов проводилась при комнатной температуре, давлении $P = 5$ ГПа и скорости вращения наковален 1 об/мин. Образцы для структурных исследований вырезались из деформированных дисков на расстоянии 2–3 мм от центра образца. Исследования с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) проводились на микроскопе Titan 80–300 (FEI) при ускоряющем напряжении 300 кВ. Исследования методом растровой электронной микроскопии (РЭМ), а также изготовление образцов для ПЭМ методом фокусированного ионного пучка проводились на микроскопе Versa 3D HighVac (FEI). Рентгеноструктурный анализ проводился на дифрактометре SmartLab (Rigaku), излучение $\text{Cu K}\alpha$.

На рисунке 1 приведены данные о структуре и фазовом составе материала в исходном состоянии до КВД. Данные рентгенофазового анализа (рис. 1а) показывают присутствие в исследуемых образцах текстурированной Т-фазы (PDF 2, Entry # 00-080-0870), а также металлического неодима с кубической структурой (PDF 2, Entry # 00-089-5330). На РЭМ-микрофотографии структуры с использованием детектора обратно-рассеянных электронов (рис. 1b) хорошо видны богатые неодимом включения в тройных стыках зерен фазы $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$. Распределение по размеру частиц неодима (синяя диаграмма на врезке) демонстрирует два максимума с размерами зерен ~ 1.2 и 5.2 мкм соответственно. Средний размер зерен $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ составляет ~ 6 мкм; диаграмма красного цвета на вставке показывает соответствующее распределение зерен по размеру. На микрофотографии, полученной с помощью ПЭМ (рис. 1c) также можно видеть присутствие области богатой неодимом фазы в виде отдельных включений, а также в области тройных стыков зерен Т-фазы.

На рисунке 2а приведена зависимость крутящего момента от угла поворота плунжеров в течение всего процесса деформации. Из графика видно, что крутящий момент плавно возрастает с увеличением угла поворота, а после ~ 160 с с начала деформации (что соответствует углу поворота около 1000°) система переходит в режим автоколебаний. Крутящий момент изменяется квази-периодически в интервале от 500 до 600 Н·м). При этом деформация сплава сопровождается интенсивной акустической эмиссией –

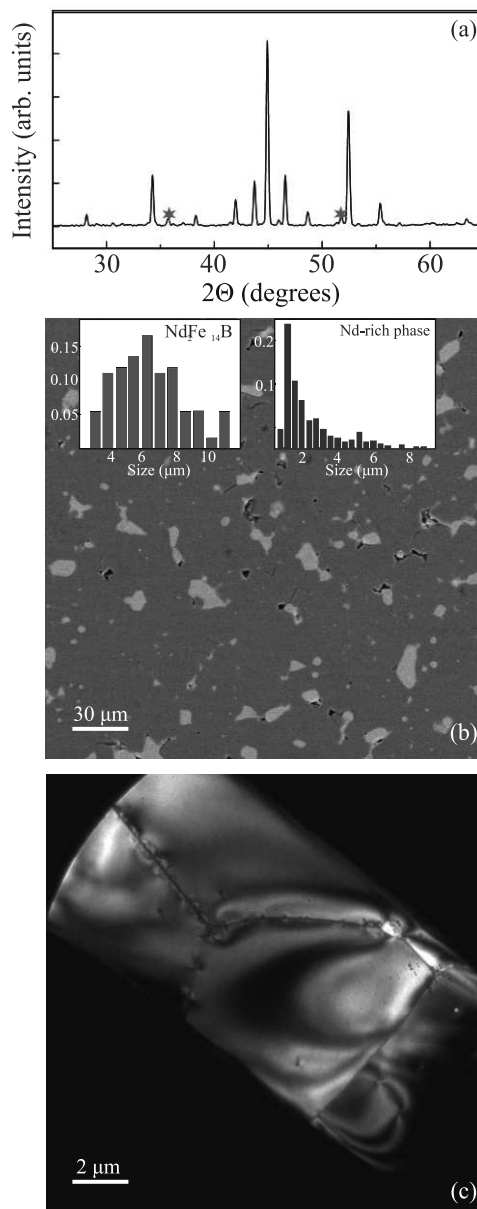


Рис. 1. (Цветной онлайн) Структура и фазовый состав исходного образца постоянного магнита сплава NdFeB. (а) – Рентгеновский спектр с пиками текстурированной Т-фазы (# 00-080-0870), а также металлического неодима (# 00-089-5330); большинство пиков неодима перекрывается с пиками Т-фазы, отдельно видны отражения при $2\theta = 35.68^\circ$ и 51.34° (помечены красной звездочкой). (б) – РЭМ-микрофотография в обратно-рассеянных электронах; серая фаза – $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, белая – неодим; на вставках приведены распределения по размерам зерен соответствующих фаз: синяя для неодима и красная – для $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$. (в) – ПЭМ-микрофотография; зерна Т-фазы с зернограницными прослойками и частицами неодима в тройных стыках

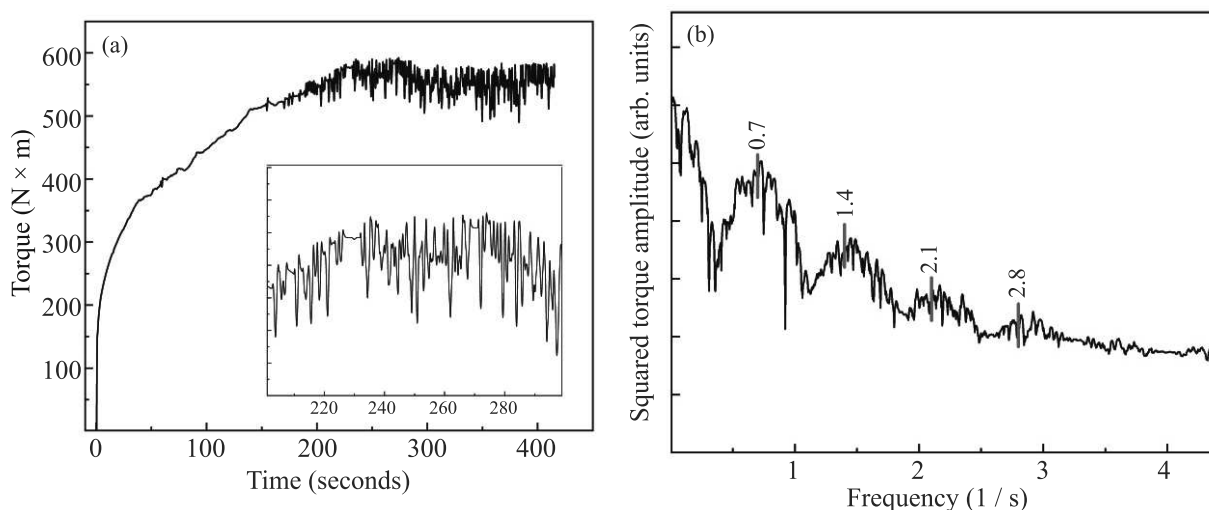


Рис. 2. (Цветной онлайн) (a) – Зависимость крутящего момента для многокомпонентного сплава на основе NdFeB, скорость вращения наковален 1 об/мин; на вставке показана масштабированная горизонтальная часть зависимости. (b) – Амплитудно-частотный спектр крутящего момента; штрихами и числами обозначено положение максимумов

громкими щелчками с частотой звукового сигнала 1–2 с. Такое поведение при КВД отличается от типичного, в том числе, для тройного сплава NdFeB [17], когда рост крутящего момента заканчивается переходом системы в стационарное состояние. Стационарное состояние при КВД наблюдалось во многих материалах, как например, в сплавах меди, алюминия, железа, титана [18].

Для количественного описания автоколебаний крутящего момента мы применили Фурье-анализ; соответствующий амплитудно-частотный спектр приведен на рис. 2b. На спектре присутствует несколько максимумов, равноотстоящих друг от друга. Наблюдаемая частота колебаний крутящего момента соответствует периоду ~ 1.5 с, т.е. практически совпадает с частотой щелчков акустической эмиссии.

Спектры рентгеновской дифракции, приведенные на рис. 3, показывают, что в области автоколебаний в рентгеновском спектре исследуемого образца имеется лишь нескольких довольно широких пиков. Возможное присутствие в структуре аморфной фазы может маскироваться наложением на пики от кристаллических фаз. Для оценки степени кристалличности мы измерили полуширину основного пика в спектре ($2\theta \approx 51^\circ$) сплава после разной степени деформации (числа оборотов наковален), см. табл. 1. Видно, что полуширина пика существенно колеблется в зависимости от степени деформации и меняется немонотонно.

Исследования, проведенные методом ПЭМ, показывают, что в результате деформации происходит из-

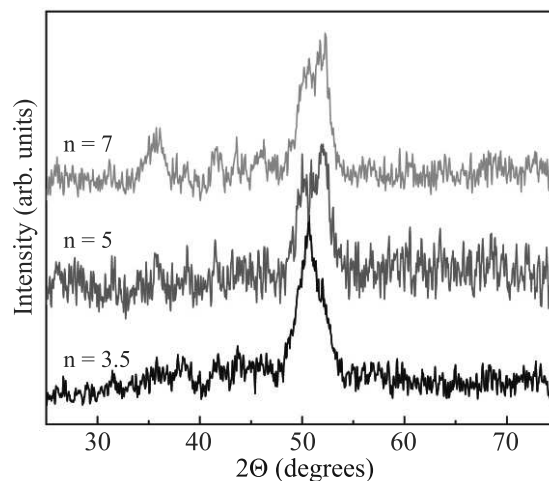


Рис. 3. (Цветной онлайн) Спектры рентгеновской дифракции образца сплава NdFeB, деформированного на $n = 3.5, 5$ и 7 оборотов наковальни при скорости вращения 1 об/мин

Таблица 1. Полуширина пика на спектре рентгеновской дифракции (см. рис. 3)

Число оборотов наковален, n	Ширина пика на середине высоты, градусы ($2\theta \approx 51^\circ$)
3.5	2.7
5	3.4
7	3.1

мельчение структуры. На ПЭМ-микрофотографиях (рис. 4a, b) в структуре видны кристаллиты Т-фазы размером от 5 до 15 нм. Наряду с кристаллической

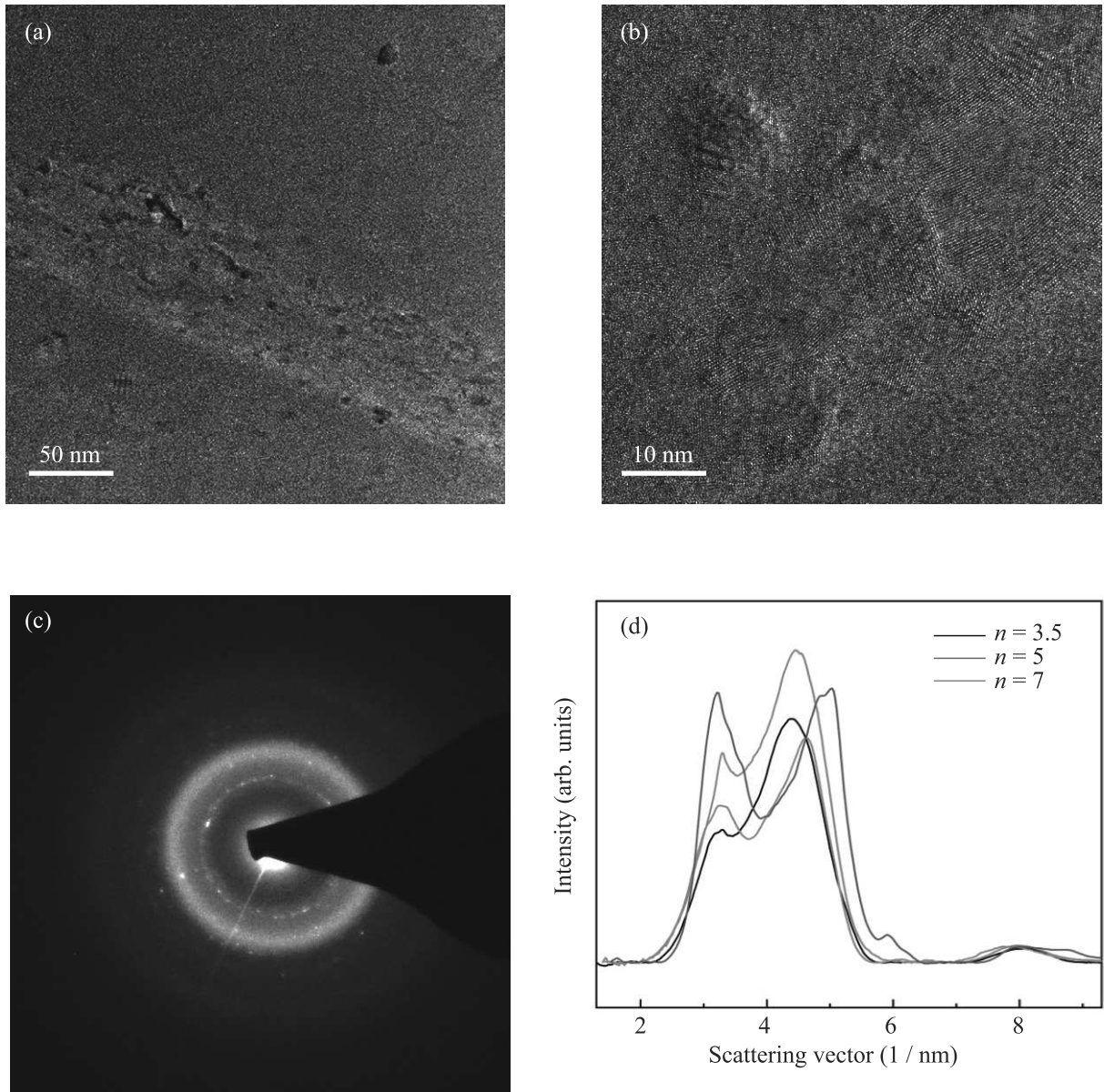


Рис. 4. (Цветной онлайн) Результаты исследования сплава NdFeV методом ПЭМ. Микрофотографии структуры в режиме: (а) – светлого поля и (б) – высокого разрешения; (с) – картина электронной дифракции ($n = 3.5$) и (d) – соответствующее радиальное распределение интенсивности для $n = 3.5, 5$ и 7 оборотов наковальни

фазой, в структуре также наблюдаются области с контрастом, характерным для аморфного материала (рис. 4б). Присутствие аморфной фазы также подтверждается данными электронной дифракции. Диффузное гало можно видеть на картине дифракции для образца с $n = 3.5$ (рис. 4с). На соответствующих профилях для $n = 3.5, 5$ и 7 гало видно в виде широких линий с наложенными пиками от кристаллической части структуры (рис. 4д).

Таким образом, деформация многокомпонентного сплава NdFeV существенно отличается от обычно-

го поведения материалов в схожих условиях. Она характеризуется автоколебаниями крутящего момента на средней и поздней стадиях деформации, а также сопровождается интенсивной акустической эмиссией. В чем может быть причина такого поведения?

Известно, что источником акустической эмиссии при деформации кристаллических материалов является резкая релаксация внутренних напряжений, связанная с динамикой дислокационных скоплений. Однако в случае исследуемого сплава, структура представляет смесь кристаллической и аморфной

фаз. Механизмы деформации в кристаллических и аморфных материалах существенно различаются. В кристаллических материалах деформация происходит путем скольжения или переползания дислокаций, а также проскальзывания по границам зерен. Вклад зернограничного проскальзывания возрастает по мере уменьшения размера зерен [19]. В свою очередь, уменьшение размера зерен затрудняет деформации решетки путем скольжения дислокаций, поскольку по механизму Холла–Петча границы зерен препятствуют скольжению дислокаций из одного зерна в другое. В то же время, в аморфных материалах нет кристаллической решетки с дальним порядком, а значит, в них не существует и дислокаций. Нет в них и границ зерен, поскольку нет областей с поразному ориентированными участками кристаллической решетки. Поэтому деформация аморфных материалов происходит иначе, путем образования полос скольжения и движения их границ [20].

Если при интенсивной пластической деформации происходит аморфизация исходного кристаллического материала, то это означает, что в процессе ИПД будет наблюдаться и переключение механизмов деформации. На начальном этапе, когда материал еще полностью кристаллический, деформация будет идти путем перемещения дислокаций в объеме зерен и проскальзывания по их границам. В дальнейшем, по мере аморфизации, начнется и деформация аморфного материала по механизму образования и роста полос скольжения. Если произойдет полная аморфизация всего материала, то первый механизм практически исчезнет.

Мы можем предположить, что в исследуемом сплаве при деформации происходит обратимый переход аморфной фазы в кристаллическую и обратно. При этом резко меняется механизм деформации и, соответственно, скорость и геометрия распространения полос скольжения в аморфной фазе. Это явление может служить причиной квазипериодических колебаний крутящего момента и соответственно акустической эмиссии. Предположение о том, что при интенсивной пластической деформации с участием аморфной и кристаллической фаз может происходить периодически переход из аморфной фазы в кристаллическую и обратно, высказывались и ранее. В частности, такое обратимое превращение наблюдалось для аморфно-кристаллического композита Ti_2NiCu [21]. В частности, для композитных аморфно-кристаллических образцов авторы показали, что изменение структуры в зависимости от степени деформации происходит в режиме затухающей цикличности, когда соотношение аморфной и кри-

сталлической составляющих непрерывно меняется. Авторы объясняют такое поведение особенностями деформирования КВД, когда величина сдвиговой деформации непрерывно меняется по радиусу образца при постоянном приложении высокого давления. Важную роль в такого рода трансформации аморфной и кристаллической фаз авторы работы [21] отводят структуре межфазной границы.

Интересно отметить, что при изучении КВД трехкомпонентного сплава NdFeB [17], когда происходит полная аморфизация образца, мы не наблюдали акустической эмиссии. Иными словами, если на стационарной стадии деформации присутствует только аморфная фаза, то режим автоколебаний не наступает. Это может быть дополнительным доводом в пользу нашей гипотезы об обратимой аморфизации исследуемого сплава при деформации КВД.

Таким образом, нами обнаружено, что при КВД многокомпонентного коммерческого сплава NdFeB формируется смешанная аморфно-кристаллическая структура, в которой доля компонентов периодически меняется в ходе деформации. Изменение фазового состава при КВД сопровождается интенсивной акустической эмиссией, связанной с изменением механизма деформации материала.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант РНФ # 22-23-00613).

Экспериментальные исследования выполнены на оборудовании Центра коллективного пользования ИФТТ РАН. Авторы выражают благодарность А. Кильмамбетову (INT, Карлсруэ) за помощь в использовании установки КВД, а также центру коллективного пользования (INT, Карлсруэ) за возможность работы на микроскопе Titan 80-300.

1. T. Schrefl, J. Fidler, and H. Kronmüller, *Phys. Rev. B* **49**, 6100 (1994).
2. K. H. J. Buschow, *Mater. Sci. Reports* **1**, 1 (1986).
3. M. Sagawa, S. Fujimura, N. Togawa, H. Yamamoto, and Y. Matsuura, *J. Appl. Phys.* **55**, 2083 (1984).
4. J. Lucas, P. Lucas, T. Le Mercier, A. Rollat, and W. Davenport, *Rare Earths: Science, Technology, Production and Use*, Elsevier, Amsterdam (2015).
5. W. Rodewald, *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials, Rare-earth Transition-metal Magnets*, John Wiley & Sons Ltd, Chichester, UK (2007).
6. D. Goll and H. Kronmüller, *Naturwissenschaften* **87**, 423 (2000).
7. J. F. Herbst, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 819 (1991).

8. A. Manaf, R. A. Buckley, and H. A. Davies, *J. Magn. Mater.* **128**, 302 (1993).
9. K. Edalati, A. Bachmaier, V. Beloshenko et al. (Collaboration), *Mater. Res. Lett.* **10**, 163 (2022).
10. Y. Ivanisenko, X. Sauvage, A. Mazilkin, A. Kilmametov, J. A. Beach, and B. Straumal, *Adv. Eng. Mater.* **20**, 1800443 (2018).
11. B. B. Straumal, X. Sauvage, B. Baretzky, A. Mazilkin, and R. Valiev, *Scr. Mater.* **70**, 59 (2014).
12. Y. Ivanisenko, A. Mazilkin, I. Gallino, S. Riegler, S. Doyle, A. Kilmametov, O. Fabrichnaya, and M. Heilmaier, *J. Alloys Compd.* **905**, 164201 (2022).
13. B. B. Straumal, A. R. Kilmametov, A. A. Mazilkin, A. S. Gornakova, O. B. Fabrichnaya, M. J. Kriegel, D. Rafaja, M. F. Bulatov, A. N. Nekrasov, and B. Baretzky, *JETP Lett.* **111**, 568 (2020).
14. B. B. Straumal, A. A. Mazilkin, S. G. Protasova, A. R. Kilmametov, A. V. Druzhinin, and B. Baretzky, *JETP Lett.* **112**, 37 (2020).
15. R. Z. Valiev, B. Straumal, and T. G. Langdon, *Annu. Rev. Mat. Sci.* **52**, 357 (2022).
16. B. B. Straumal, A. Kilmametov, A. Mazilkin, S. G. Protasova, K. I. Kolesnikova, P. B. Straumal, and B. Baretzky, *Mater. Lett.* **145**, 63 (2015).
17. B. B. Straumal, A. A. Mazilkin, S. G. Protasova, D. V. Gunderov, G. A. López, and B. Baretzky, *Mater. Lett.* **161**, 735 (2015).
18. B. B. Straumal, A. Kilmametov, Y. Ivanisenko, A. Mazilkin, O. Kogtenkova, L. Kurmanaeva, A. Korneva, P. Zięba, and B. Baretzky, *Int. J. Mater. Res.* **106**, 657 (2015).
19. S. N. Naik and S. M. Walley, *J. Mater. Sci.* **55**, 2661 (2020).
20. A. L. Greer, Y. Q. Cheng, and E. Ma, *Mater. Sci. Eng. R* **74**, 71 (2013).
21. R. V. Sundeev, A. V. Shalimova, N. N. Sitnikov, O. P. Chernogorova, A. M. Glezer, Yu. Presnyakov, A. Karateev, A. Pechina, and A. V. Shelyakov, *J. Alloys Compd.* **845**, 156273 (2020).

Двумерная система Юкавы: поведение дефектов вблизи области плавления

Б. А. Клумов¹⁾

Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

Поступила в редакцию 14 сентября 2022 г.

После переработки 28 сентября 2022 г.

Принята к публикации 5 октября 2022 г.

Рассматривается поведение дефектов и кластеров из дефектов вблизи области плавления двумерной системы Юкавы в широком диапазоне значений параметра экранировки κ . Такие характеристики, как концентрация дефектов, их спектр по размерам и ряд других метрик оказываются квазиуниверсальными и не зависят от величины κ . Предлагаются простые индикаторы плавления плотноупакованных двумерных систем.

DOI: 10.31857/S1234567822220062, EDN: lykhhd

Поведение двумерных систем вблизи области их плавления – одна из важнейших проблем физики конденсированного состояния. Двумерные и квазидвумерные системы интенсивно исследуются, начиная с пионерских теоретических работ [1–7], когда было обнаружено, что физика двумерного плавления гораздо богаче, чем трехмерного, в частности, из-за наличия промежуточной гексатической фазы, в которой разрушен трансляционный порядок, но существует квазидальний ориентационный порядок (например, [8]). Дополнительно, интерес к двумерным материалам значительно вырос после открытия графена [9, 10] и наблюдения двумерного плавления в системе квазичастиц – скирмионов [11]. При этом, при изучении топологических дефектов в двумерных системах, основное внимание уделялось свойствам дислокаций и дислокационных пар, а изучение свойств кластеров из дефектов и их влияние на переход “кристалл–жидкость” только начинается [12, 13]). Целью настоящей работы является изучение свойств дефектов и кластеров из дефектов вблизи области плавления плотноупакованных двумерных систем (т.е. систем, имеющих в твердотельном состоянии треугольную (гексагональную) решетку), используя в качестве примера, модельную систему с отталкивательным потенциалом Юкавы (Дебая–Хюккеля). Отметим, что класс плотноупакованных двумерных систем очень широк. К ним, в частности, относятся кулоновские системы, системы мягких сфер, Леннард–Джона и др., а результаты, полученные для системы Юкавы, могут быть распространены на весь класс систем с плотной упаков-

кой атомов. Парное взаимодействие частиц в системе Юкавы описывается потенциалом:

$$U(r) = (Q/r) \exp(-r/\lambda), \quad (1)$$

где Q – заряд частицы (заряд и масса всех микрочастиц считаются одинаковыми), а λ – длина экранирования. Известно, что фазовое состояние такой системы описывается двумя параметрами – параметром неидеальности $\Gamma = Q^2 \times \exp(-\kappa)/(TD)$ и параметром экранировки $\kappa = D/\lambda$, где D – среднее межчастичное расстояние в системе, а T – температура частиц. Система Юкава часто используется для описания экспериментов в пылевой (комплексной) плазме и в коллоидных системах (см., например, [14, 15]). В настоящей работе основным инструментом получения конфигураций частиц является метод классической молекулярной динамики, реализованный для канонического ансамбля (NVT) с термостатом Нозе–Хувера (Nose–Hoover) и периодическими граничными условиями [16]. Типичное число микрочастиц в исследуемой двумерной системе порядка $N \sim 10^5$, это связано с необходимостью изучения дефектов в кристаллической фазе, где их концентрация мала; такие значения N являются рекордными на сегодняшний день.

При нулевой температуре двумерная система Юкавы при всех значениях параметра экранировки κ представляет из себя кристалл с треугольной (гексагональной решеткой) и 6-ю ближайшими соседями у каждого атома, которые расположены в вершинах правильного шестиугольника. При конечной температуре в такой системе появляются топологические дефекты, в которых число ближайших соседей отличается от шести. Как правило, при низких

¹⁾e-mail: klumov@ihed.ras.ru

температурах доминируют дислокации (пары из дефектов (5-7)) (в такой паре у одной частицы пять ближайших соседей, а у другой – семь) и/или результат их объединения – дислокационная пара, состоящая из четырех дефектов различной формы. С повышением температуры в системе появляются кластеры из дефектов, которые возникают в результате их объединения и распределение дефектов и кластеров из дефектов становится значительно более сложным. Ближайшие соседи для плотноупакованных двумерных систем легко определяются с помощью метода Вороного [17], при этом двумерное пространство, занятое частицами, разбивается на многогранники, а каждой частице системы соответствует выпуклый многоугольник, число сторон которого равно числу ближайших соседей n_{nb} . Здесь все частицы с числом $n_{nb} \neq 6$ считаются дефектными, а их относительная концентрация $n_d = N_d/N$ (где N_d и N – число дефектных частиц и полное число частиц, соответственно) является важной характеристикой двумерной системы [18, 19].

На рисунке 1 показано, как относительные концентрации n_d зависят от приведенной температуры системы $T^* = T/T_m$, где T_m – температура плавления. Представлены зависимости для двух значений параметра экранировки: $\kappa = 2$ (синяя кривая) и $\kappa = 4$ (красная кривая). Хорошо видно, что данные кривые практически совпадают. Это означает, что концентрация дефектов n_d практически не зависит вблизи области плавления от значения параметра κ , т.е. является универсальной характеристикой системы, которая зависит только от параметра T^* . Этот важный результат позволяет, в частности, определить фазовое состояние системы и величину параметра T^* в эксперименте, зная лишь концентрацию дефектов, которая достаточно легко определяется по пространственному расположению частиц. Для жидкостной фазы подобный результат был получен недавно в [19]. Резкий рост n_d , который наблюдается в узком интервале приведенных температур T^* , соответствует плавлению системы, с характерной величиной $n_d \simeq 0.2$ у расплава. На вставках к рис. 1 показаны фрагменты трех фаз: кристаллической (а) ($n_d \simeq 0.05$), гексатической [20] (б) ($n_d \simeq 0.15$) и жидкостной (с) ($n_d \simeq 0.2$). Цвет частиц определяется числом ближайших соседей и меняется от синего к красному при его увеличении: дефектным частицам соответствуют синие и красные частицы (с 5-ю и 7-ю ближайшими соседями соответственно), а зеленым цветом выделены кристаллические частицы с 6-ю ближайшими соседями. Видно значительное отличие гексатической и жидкост-

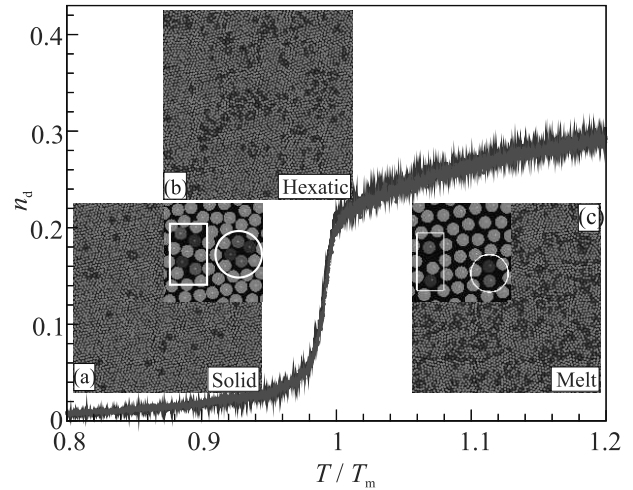


Рис. 1. (Цветной онлайн) Двумерная система Юкавы вблизи области плавления. Представлены относительные концентрации n_d дефектных частиц (т.е. частиц с числом ближайших соседей $N_{nb} \neq 6$) в зависимости от приведенной температуры $T^* = T/T_m$, где T_m – температура плавления для двух значений параметра экранировки: $\kappa = 2$ (синяя кривая) и $\kappa = 4$ (красная кривая). Видно, что данные кривые практически совпадают, что означает квазиуниверсальность зависимости $n_d(T^*)$ в рассмотренном диапазоне значений T^* . Резкий рост n_d , который наблюдается в узком интервале температур, соответствует переходу “кристалл–жидкость”, с характерной величиной $n_d \simeq 0.2$ у расплава. На вставках показаны фрагменты трех фаз: кристаллической (а) ($n_d \simeq 0.05$), гексатической (б) ($n_d \simeq 0.15$) и жидкостной (с) ($n_d \simeq 0.2$). Цвет частиц соответствует числу ближайших соседей, меняясь от синего к красному при его увеличении: дефектным частицам соответствуют синие частицы, у которых пять ближайших соседей и красные – у которых их семь, зеленым цветом выделены кристаллические частицы с 6-ю ближайшими соседями. Дополнительно, на вставках (а) и (с) показаны дислокации и дислокационные пары (а) и дисклинации с 5-ю и 7-ю ближайшими соседями в реальном кристалле рядом с парной дислокацией (с). Видно, что параметр n_d заметно отличается для всех указанных фаз, что позволяет использовать его для их идентификации; зная n_d , легко определяется приведенная температура системы T^*

ной фаз от кристаллической по виду и концентрации дефектов и кластеров из дефектов, что сильно упрощает их идентификацию в экспериментах с комплексной и коллоидной плазмой. На вставках (а, с) также показано, как выглядят дислокации и дислокационные пары (на вставке (а)) и точечные дефекты (дисклинации) с 5-ю и 7-ю ближайшими соседями (на вставке (с)) в реальном плазменном кристалле.

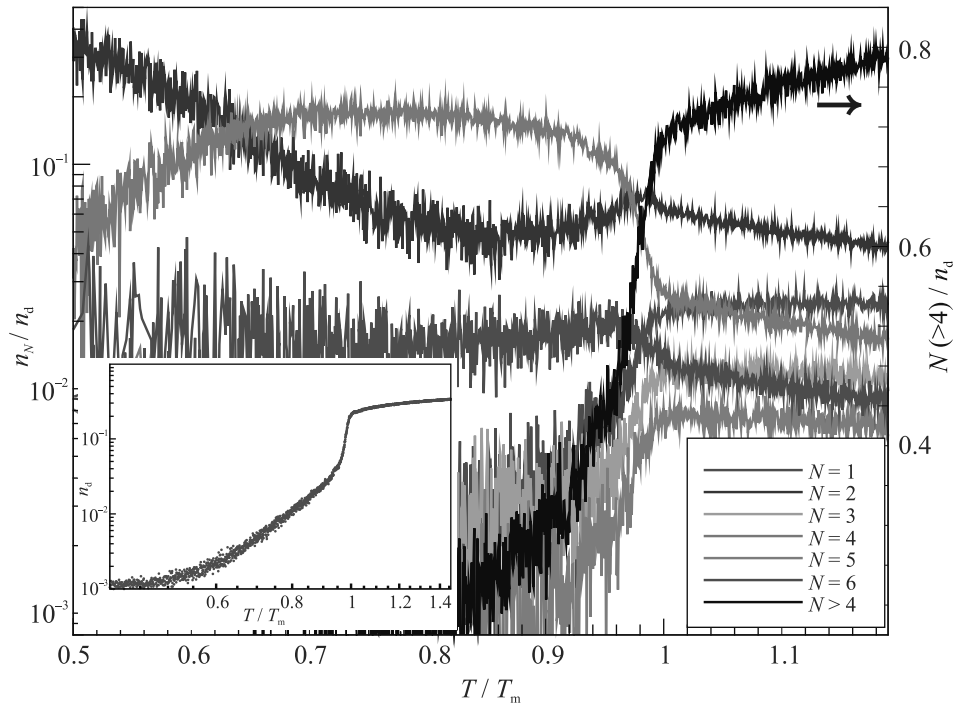


Рис. 2. (Цветной онлайн) Двумерная система Юкавы вблизи области плавления. Показаны относительные концентрации n_N/n_d кластеров, состоящих из N дефектов в зависимости от приведенной температуры $T^* = T/T_m$. Здесь n_d – концентрация всех дефектных частиц в системе (зависимость $n_d(T^*)$ является квазиуниверсальной и представлена на вставке в двойном логарифмическом масштабе для иллюстрации степенного роста n_d в диапазоне $T^* \simeq 0.6 \div 0.95$). Разным цветом показаны относительные концентрации дефектов: дисклинаций ($N = 1$, лиловый), дислокаций ($N = 2$, синий) и дислокационных пар ($N = 4$, зеленый), а также кластеров из дефектов с $N = 3$ (бирюзовый), $N = 5$ (оранжевый) и $N = 6$ (красный) соответственно. Кумулятивная доля всех дефектных частиц, входящих в кластеры с $N > 4$, показана черным цветом. Видно, что в кристаллической фазе доминируют дефекты – дислокации и дислокационные пары, хотя вклад остальных кластеров довольно значительный ($\simeq 30\%$ в кристалле вблизи области плавления). При температурах $T^* \leq 0.6$ в системе преобладают дислокации ($N = 2$), в дальнейшем с ростом температуры начинают доминировать дислокационные пары ($N = 4$), концентрация которых резко уменьшается при переходе “кристалл–жидкость” в результате их диссоциации на пару дислокаций. Хорошо видно, что при плавлении резко увеличивается доля относительно крупных кластеров (с $N > 4$), которая в расплаве составляет $\simeq 70\%$

Кроме величины n_d , важную роль в двумерных системах могут играть кластеры из дефектов различного размера. Это иллюстрирует рис. 2, где показана их концентрация вблизи области плавления для двумерной системы Юкавы с параметром $\kappa = 3$. На нем показаны относительные концентрации (доли) n_N/n_d кластеров, состоящих из N дефектных частиц для разных температур T^* . Представлены зависимости для дисклинаций ($N = 1$), дислокаций ($N = 2$) и дислокационных пар ($N = 4$), а также для наиболее распространенных кластеров из дефектов с $N = 3$, $N = 5$ и $N = 6$. Дополнительно приводится кумулятивная доля всех дефектных частиц, входящих в кластеры с $N > 4$, которая показана черным цветом. Видно, что в кристаллической фазе доминируют дефекты – дислокации и дислокационные пары, хотя вклад остальных кластеров довольно значи-

тельный (например, для кристалла вблизи области плавления доля таких кластеров составляет $\simeq 0.3$, что может оказывать заметное влияние на плавление такой системы. При температурах $T^* \leq 0.6$ в системе преобладают дислокации (с $N = 2$), в дальнейшем с ростом температуры начинают доминировать дислокационные пары ($N = 4$) (их доли сравниваются: $n_2 \approx n_4$ при $T^* \simeq 0.6$), концентрация которых резко уменьшается при переходе “кристалл–жидкость” в результате диссоциации дислокационных пар на две дислокации, что, по-видимому, говорит в пользу КТНУ сценария перехода (например, [8]). Хорошо видно, что и в жидкой фазе и в расплаве доля относительно крупных кластеров (с $N > 4$) значительно выше, чем в кристалле, что в значительной степени определяет свойства указанных фаз. На вставке к рис. 2 показана зави-

симось n_d от T^* в двойном логарифмическом масштабе для иллюстрации почти степенного роста n_d в диапазоне $T^* \simeq 0.6 \div 0.95$ с показателем степени $\alpha \sim 5$ ($n_d \propto (T^*)^\alpha$).

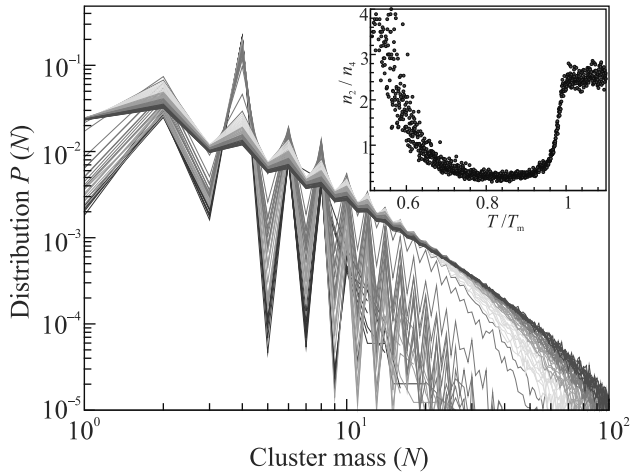


Рис. 3. (Цветной онлайн) Двумерная система Юкавы вблизи области плавления. Распределение кластеров из дефектов $P(N)$ по числу N дефектов, входящих в кластер, вычисленное для разных приведенных температур T^* . Цвет кривых определяется величиной T^* и меняется от синего к красному при ее увеличении. Кривые охватывают диапазон $T^* \simeq 0.8 \div 1.1$ и построены так, что соседним кривым отвечает малое изменение температуры $\delta T^* \sim 10^{-3}$. Резкое увеличение расстояния между ними соответствует плавлению системы. Видно, что в кристаллической фазе распределение $P(N)$ быстро затухает с ростом N , в случае жидкостной фазы ситуация обратная – в зависимости $P(N)$ появляются степенные хвосты. Кроме того, при плавлении сильно меняется форма $P(N)$: доминирование дислокаций и дислокационных пар ($N = 2, 4$) в кристаллической фазе сменяется сложным спектром кластеров, в котором преобладают дислокации ($N = 2$). Это, в частности, позволяет легко различать указанные фазы. На вставке показано, как меняется при нагреве системы безразмерный параметр $n_{2/4} = n_2/n_4$, определяемый как отношение концентрации дислокаций к концентрации дислокационных пар. В кристаллической фазе вблизи области плавления $n_{2/4}^{\text{cr}} \simeq 0.5$ (при $T^* \approx 0.9$), для расплава $n_{2/4}^{\text{melt}} \simeq 2.5$ и эта величина не зависит от параметра экранировки κ , т.е. является универсальной характеристикой двумерного расплава системы Юкавы

Концентрации дефектов и кластеров из дефектов n_N дают важную характеристику двумерной системы – спектр дефектов по их “массе” $P(N)$. Такое распределение кластеров из дефектов $P(N)$ по числу N дефектов, входящих в кластер, показано на рис. 3 для разных температур T^* . Цвет кривых определяется величиной T^* и меняется от синего к крас-

ному при ее увеличении. Кривые охватывают диапазон $T^* \simeq 0.8 \div 1.1$ и построены так, что соседним кривым отвечает малое изменение температуры $\delta T^* \sim 10^{-3}$. Резкое увеличение расстояния между соседними кривыми соответствует плавлению системы. Видно, что в кристаллической фазе распределение $P(N)$ быстро затухает с ростом N , в случае жидкостной фазы ситуация обратная – в зависимости $P(N)$ появляются степенные хвосты. Кроме того, при плавлении сильно меняется форма $P(N)$: доминирование дислокаций и дислокационных пар ($N = 2, 4$) в кристаллической фазе сменяется сложным спектром кластеров, в котором преобладают дислокации ($N = 2$). Можно показать [21], что в гексатической фазе $P(2) \sim P(4)$. Это, в частности, позволяет различать указанные фазы в экспериментах с коллоидной и комплексной плазмой. На вставке к рис. 3 показано, как меняется при нагреве системы безразмерный параметр $n_{2/4} = n_2/n_4$, определяемый как отношение концентрации дислокаций к концентрации дислокационных пар. В кристаллической фазе вблизи области плавления $n_{2/4}^{\text{cr}} \simeq 0.5$ (при $T^* \approx 0.9$), для расплава $n_{2/4}^{\text{melt}} \simeq 2.5$ и эта величина не зависит от параметра экранировки κ , т.е. является универсальной характеристикой двумерного расплава системы Юкавы. В заключение отметим, что все полученные выше результаты относятся к однородным системам, например, они могут быть применены к описанию коллоидной плазмы, плавлению скирмионных решеток и др. В комплексной (пылевой) плазме эксперименты, как правило, проводятся с микрочастицами, находящимися в газоразрядной плазме. В такой плазме очень важную роль играет внешнее удерживающее электрическое поле (конфайнмент), которое, в частности, приводит к тому, что у квазидвумерных систем микрочастиц плотность максимальна в центре системы и монотонно спадает к периферии [22, 23, 24], что делает плавление таких систем более сложным [24], хотя все основные результаты статьи могут быть применены и в этом случае.

В настоящей работе впервые рассмотрена кинетика дефектов и кластеров из дефектов вблизи области перехода “кристалл-жидкость” для двумерной системы Юкавы. Показано, что относительная концентрация дефектов n_d зависит только от приведенной температуры T^* и не зависит от параметра экранировки κ в широком диапазоне величин T^* , т.е. является универсальной характеристикой системы. Такими же универсальными характеристиками двумерной системы Юкавы являются распределения дефектов по размерам $P(N)$ и их кумулятивные метрики. Отношение концентраций дислокаций и дислокаци-

онных пар n_2/n_4 также зависит только от параметра T^* , а величину $n_2/n_4 \approx 2.5$ предлагается использовать как удобный индикатор расплава у всех двумерных плотноупакованных систем.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН # 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

1. V. L. Berezinskii, Sov. Phys. JETP **32**, 493 (1971).
2. V. L. Berezinskii, Sov. Phys. JETP **34**, 610 (1972).
3. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys. **6**, 1181 (1973).
4. B. I. Halperin and D. R. Nelson, Phys. Rev. Lett. **41**, 121 (1978).
5. D. R. Nelson and B. I. Halperin, Phys. Rev. B **19**, 2457 (1979).
6. A. P. Young, Phys. Rev. B **19**, 1855 (1979).
7. S. T. Chui, Phys. Rev. B **28**, 178 (1983).
8. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, УФН **187**, 921 (2017).
9. K. V. Zakharchenko, M. I. Katsnelson, and A. Fasolino, Phys. Rev. Lett. **102**, 046808 (2009).
10. J. H. Los, Phys. Rev. B **91**, 045415 (2015).
11. P. Huang, T. Schoonenberger, M. Cantoni, L. Heinen, A. Magrez, A. Rosch, F. Carbone, and H. M. Ronnow, Nat. Nanotechnol. **15**, 761 (2020).
12. M. Mazars and R. Salazar, EPL **126**, 56002 (2019).
13. P. Digregorio, D. Levis, L. F. Cugliandolo, G. Gonnella, and I. Pagonabarraga, Soft Matter **18**, 566 (2022).
14. V. Fortov and G. Morfill, *Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space*, CRC Press, Boca Raton, FL (2009).
15. C. N. Likos, Phys. Rep. **348**(4-5), 267 (2001).
16. S. Plimpton, J. Comput. Phys. **117**(1), 1 (1995).
17. G. Voronoi, J. Reine Angew. Math. **134**, 198 (1908).
18. B. A. Klumov, Phys.-Uspekhi **53**(10), 1053 (2010).
19. B. A. Klumov, JETP Lett. **115**(2), 108 (2022).
20. B. J. Lin and L. J. Chen, J. Chem. Phys. **126**, 34706 (2007).
21. Б. А. Клу́мов, УФН (2022); 10.3367/UFNe.2022.09.039237.
22. H. Totsuji, C. Totsuji, and K. Tsuruta, Phys Rev. E **64**, 066402 (2001).
23. D. H. E. Dubin, Phys. Rev. E **55**(4), 4017 (1997).
24. B. A. Klumov, JETP Lett. **110**, 715 (2019).

Определение сверхпроводящего параметра порядка слабо недодопированных пниктидов $\text{BaFe}_{1.92}\text{Ni}_{0.08}\text{As}_2$ двумя взаимодополняющими методами¹⁾

А. В. Садаков⁺, А. В. Муратов⁺, С. А. Кузьмичев^{*,+}, О. А. Соболевский⁺, Б. И. Массалимов⁺,
А. Р. Прищепа⁺, В. М. Михайлов⁺, К. С. Перваков⁺, В. А. Власенко⁺, Т. Е. Кузьмичева^{+,2)}

⁺ Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

^{*} Физический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 29 июля 2022 г.
После переработки 28 сентября 2022 г.
Принята к публикации 28 сентября 2022 г.

В работе определена структура сверхпроводящего параметра порядка пниктидов $\text{BaFe}_{1.92}\text{Ni}_{0.08}\text{As}_2$ слабо недодопированного состава с $T_c \approx 18.2$ К. С помощью спектроскопии эффекта некогерентных многократных андреевских отражений напрямую определены величины двух микроскопических сверхпроводящих параметров порядка – малой сверхпроводящей щели $\Delta_S(0)$ и, предположительно, экстремумов большой щели с анизотропией в ab -плоскости $\Delta_L^{\text{out}}(0)$ и $\Delta_L^{\text{in}}(0)$ при $T \ll T_c$, а также их температурные зависимости. Показано, что полученная температурная зависимость первого критического поля $H_{c1}(T)$ может быть описана в рамках двухзонного приближения как так называемой альфа-моделью (с использованием экспериментальных величин $\Delta_S(0)$, $\Delta_L^{\text{out}}(0)$ и $\Delta_L^{\text{in}}(0)$), так и с учетом полученных методом многократных андреевских отражений спектроскопии температурных зависимостей $\Delta_S(T)$, $\Delta_L^{\text{out},\text{in}}(T)$ в предположении достаточно сильной анизотропии малой сверхпроводящей щели, где экспериментальная величина $\Delta_S(0)$ взята в качестве максимального значения ее углового распределения.

DOI: 10.31857/S123456782220074, EDN: lynkzl

1. Введение. Сверхпроводящие пниктиды BaFe_2As_2 семейства Ва-122 имеют слоистую кристаллическую структуру и при частичном замещении $\text{Fe}_{2-x}\text{Ni}_x$ демонстрируют умеренные критические температуры до $T_c \approx 21$ К в области оптимального допирования при $x = 0.1$ [1]. На поверхности Ферми с помощью фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) обнаружены вложенные дырочные цилиндры вокруг Γ -точки зоны Бриллюэна и электронные цилиндры вокруг M -точки, гофрированные вдоль k_z -направления [2].

Хотя исследования пниктидов $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ (BFNA) в сверхпроводящем состоянии с помощью ARPES не проводились, можно сказать, что характерной особенностью пниктидов семейства Ва-122 в целом является анизотропия сверхпроводящих щелей в импульсном пространстве, наблюдаемая в ARPES-экспериментах [3, 4] и рассматриваемая теоретически [5, 6]. Расчеты щелевой структуры для семейства Ва-122 [5, 6] показали существование анизотропных сверхпроводящих щелей как в рамках

спин-флуктуационного (s^\pm), так и орбитально-флуктуационного (s^{++}) подхода, причем комбинация этих типов взаимодействий [6] дает возможность получить большое разнообразие щелевых структур, в том числе с “нодальным” параметром порядка (имеющим точки нулей в k -пространстве). Новый комплексный метод, предложенный в данной работе, позволил нам получить надежные экспериментальные данные об анизотропии сверхпроводящих щелей в BFNA.

Экспериментальные исследования щелевой структуры BFNA (с частичным замещением никелем) многочисленны и проведены, в основном, на монокристаллах оптимально допированного состава $x = 0.1$. Данные о количестве и величинах сверхпроводящих параметров порядка, полученные локальными, объемными и поверхностными методами [7–13], плохо согласуются: например, характеристическое отношение для большой сверхпроводящей щели $2\Delta_L(0)/k_B T_c \approx 3.7 - 13$, т.е. варьируется в 3.5 раза. Противоречивость имеющихся данных [7–13] также ставит вопрос применимости отдельных экспериментальных методов к исследованию свойств неклассических многозонных сверхпроводников с анизотропными параметрами порядка.

¹⁾ См. дополнительный материал к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ac.ru

²⁾ e-mail: kuzmichevate@lebedev.ru

В недодопированной области фазовой диаграммы можно ожидать изменение щелевой структуры (по сравнению с остальными областями) из-за влияния антиферромагнитной и нематической фаз. Однако исследования сверхпроводящих параметров порядка в BFNA недодопированных составов с $x < 0.09$ до сих пор не были проведены. В данной работе предложен комплексный многосонный подход методами спектроскопии эффекта некогерентных многократных андреевских отражений (МАО) и измерения первого критического поля $H_{c1}(T)$, позволяющий получить более надежные данные о щелевой структуре анизотропных сверхпроводников. В рамках этого подхода впервые определена структура сверхпроводящего параметра порядка пниктидов $\text{BaFe}_{1.92}\text{Ni}_{0.08}\text{As}_2$ слабо недодопированного состава: величины, температурные зависимости и характеристические отношения двух сверхпроводящих щелей, оценена умеренная анизотропия $A_L \approx 30\%$ большой сверхпроводящей щели, сделан вывод о сильной анизотропии малой щели $A_S \gtrsim 50\text{--}100\%$. Обсуждаются сходства и различия щелевой структуры пниктидов BFNA с разной степенью допирования.

2. Детали эксперимента. Крупные монокристаллы $\text{BaFe}_{1.92}\text{Ni}_{0.08}\text{As}_2$ размером до 1 см были выращены методом “раствор в расплаве”. Характеризация методами рентгеновской дифракции, элементного анализа, электронной микроскопии, резистивных и магнитных измерений показали наличие единственной сверхпроводящей фазы с $T_c \approx 18.5\text{ K}$ и высокую степень однородности кристаллов. Детали процесса синтеза и характеристики приведены в [14–16], а также в разделе II Дополнительных материалов.

Планарные механически регулируемые наноконтакты типа сверхпроводник – тонкий нормальный металл – сверхпроводник (SnS) с направлением протекания тока вдоль оси c создавались в монокристаллах BFNA с помощью техники “break-junction” [17]. Типичные вольтамперные характеристики (ВАХ) таких контактов приведены на рис. 1а, температурная зависимость сопротивления вблизи T_c для выколотой из монокристалла пластинки с размерами $4 \times 2 \times 0.2\text{ мм}$ приведена на рис. 2 (серые кружки, правая ось). Ширина резистивного перехода составляет примерно 1.1 К. Конструкция измерительного столика и детали эксперимента с образцами слоистых соединений, преимущества и недостатки метода подробно описаны в обзоре [18]. Физическая модель контакта схематически приведена на рис. 1 в [19]. Кратко отметим, что регулируемым в эксперименте параметром туннельного контакта в технике

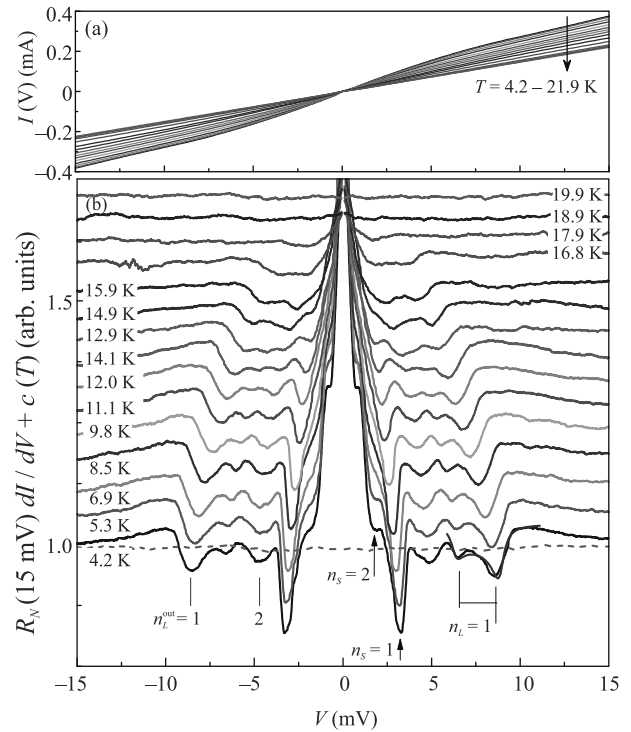


Рис. 1. (Цветной онлайн) Эволюция ВАХ (а) и $dI(V)/dV$ -спектров (б) SnS-контакта с $T_c \approx 18.2\text{ K}$ с температурой. Нормальная проводимость контакта $G_N(T, eV > 2\Delta) \approx \text{const}$; для удобства кривые (кроме черной сплошной и штриховой линии) сдвинуты по вертикали на величину $c(T)$, штриховая линия – $dI(V)/dV$ при 19.9 К. Вертикальными линиями при 4.2 К отмечен фундаментальный минимум (дублет, $n_L = 1$) от большой сверхпроводящей щели $\Delta_L \approx 3.2\text{--}4.5\text{ мэВ}$ (значения соответствуют величине предположительной анизотропии), синими штрихами отдельно показаны первая и вторая субгармоники $n_L^{\text{out}} = 1, 2$ от верхнего экстремума Δ_L^{out} . Аппроксимация формы дублета $n_L = 1$ в рамках подхода [25] приведена фиолетовой сплошной линией. Стрелками показаны андреевские минимумы ($n_S = 1, 2$) от малой щели $\Delta_S \approx 1.6\text{ мэВ}$

планарного break-junction является площадь (в ab -плоскости) и, соответственно, нормальное сопротивление R_N , а не толщина и прозрачность области слабой связи (зазора; см. рис. 12, 16 в [18], а также раздел II Дополнительных материалов).

Ниже T_c в SnS-контакте реализуется эффект многократных андреевских отражений (МАО). При высокой прозрачности NS-граней (барьерный параметр $Z \lesssim 0.3$) некогерентный андреевский транспорт вызывает на ВАХ SnS-контакта избыточный ток (относительно нормальной ВАХ выше T_c) во всем диапазоне смещений eV . На спектре при $eV \rightarrow 0$ динамическая проводимость повышена в разы относительно

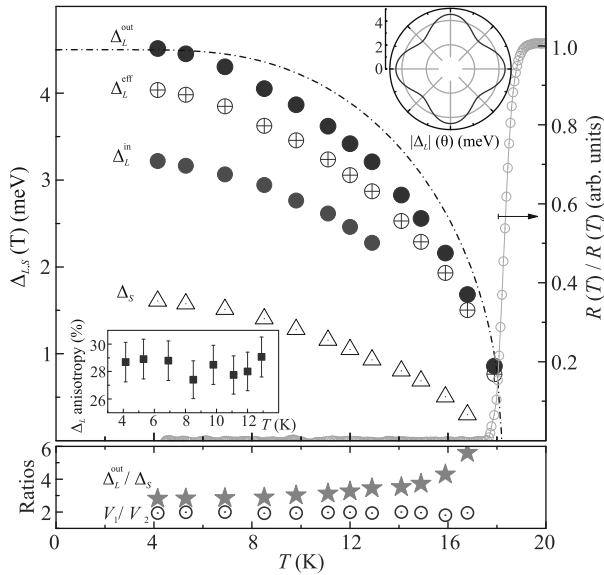


Рис. 2. (Цветной онлайн) Температурные зависимости экстремумов большой сверхпроводящей щели $\Delta_L^{\text{in,out}}(T)$ (кружки), ее эффективной величины (открытые кружки) и максимального значения в угловом распределении малой щели $\Delta_S(T)$ (треугольники) по данным рис. 1. Штрихпунктирная линия – однозонная БКШ-образная функция, серыми кружками показан резистивный сверхпроводящий переход объемного монокристалла $\text{BaFe}_{1.92}\text{Ni}_{0.08}\text{As}_2$. На вставках приведены температурная зависимость предположительной анизотропии большой щели $A(T) \equiv 100\% \cdot [1 - \Delta_L^{\text{in}}/\Delta_L^{\text{out}}]$ (квадраты) и предполагаемое схематическое угловое распределение $\Delta_L(\theta)$ в $k_x k_y$ -плоскости. На нижней панели показано отношение большой и малой сверхпроводящих щелей $\Delta_L^{\text{out}}(T)/\Delta_S(T)$ (звезды) и положений первой и второй субгармоник V_1/V_2 от Δ_L^{out} (открытые кружки), показанных на рис. 1b синими штрихами и метками $n_L^{\text{out}} = 1, 2$

проводимости G_N SnS-контакта в нормальном состоянии (так называемый пьедестал), при этом сверхтоковая ветвь отсутствует [20, 21]. Также возникает серия минимумов субгармонической щелевой структуры (СГС), положение которых V_n напрямую определяется величиной сверхпроводящей щели Δ при любых температурах вплоть до T_c [20–24]:

$$|eV_n(T)| = 2\Delta(T)/n, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1)$$

В планарном SnS-контакте число n^* наблюдаемых минимумов СГС зависит от отношения размера контакта d_c и характерной длины неупругого рассеяния l_c в c -направлении [19, 21]: $n^* \approx l_c/d_c$. Для многощелевого сверхпроводника на $dI(V)/dV$ -спектре будут присутствовать СГС от каждой щели.

Влияние углового распределения $\Delta(\theta)$ в k -пространстве на форму андреевских минимумов

в рамках подхода [25] показано на рис. 4 в [18]. Гипотетически, если для изотропной щели на $dI(V)/dV$ ожидаются резкие интенсивные минимумы СГС, то подавление амплитуды СГС происходит в случае параметра порядка, имеющего точки нулей (“ноды”). Для щели с расширенной s -волновой симметрией в ab -плоскости без узлов ожидаются дублетные минимумы СГС, ширина которых определяется максимальной Δ^{out} и минимальной Δ^{in} энергиями связи куперовских пар в k -пространстве. Степень анизотропии далее определена как $A \equiv 100\% \cdot [1 - \Delta^{\text{in}}/\Delta^{\text{out}}]$. Эффективное значение анизотропной щели при $T \ll T_c$ оценим в рамках формализма [25], исходя из формы дублета как $\Delta^{\text{eff}} \equiv \frac{\sum_{\theta=0}^{\pi/2} \Delta(\theta) \cdot H(2\Delta(\theta))}{\sum_{\theta=0}^{\pi/2} H(2\Delta(\theta))}$, где θ – угол в $k_x k_y$ -плоскости, $H(\text{eV}) = G(\text{eV}, 4.2 \text{ K}) - G_N(\text{eV}, T_c)$ – амплитуда деталей протяженной андреевской особенности $n = 1$.

В планарном SnS-контакте x - и y -компоненты импульса носителей заряда могут сохраняться в случае баллистического транспорта в ab -плоскости, т.е. если длина свободного пробега $l_{\text{ab}}^{\text{el}}$ превышает d_{ab} . В то же время, k_z -компонента может не сохраняться из-за “перемешивания” носителей вдоль направления тока. Оценка шарвиновского сопротивления $R_N = \sqrt{8\rho_{\text{ab}} l_{\text{ab}}}/(3\pi d_{\text{ab}})$ [26] аналогично [7, 8] позволяет для представленного ниже SnS-контакта с нормальным сопротивлением $R_N \approx 65 \text{ Ом}$ получить $d_{\text{ab}} \approx 33 \text{ нм}$ и $l_{\text{ab}}^{\text{el}}/d_{\text{ab}} \approx 2.6$. Таким образом, особенностью исследованных планарных контактов является баллистический транспорт по ab -компонентам импульса, в то время как по c -направлению имеет место неупругое рассеяние. Это дает возможность получать информацию об анизотропии сверхпроводящей щели в $k_x k_y$ -плоскости.

Суммируя кратко возможности техники механически регулируемых планарных контактов на микротрещине “break-junction”, можно заключить, что метод позволяет локально (в пределах контактной области размером порядка десятков нм) и напрямую определять величины, температурные зависимости и характеристические отношения сверхпроводящих параметров порядка в высоком разрешении, а также оценивать их анизотропию в $k_x k_y$ -плоскости [18].

Одним из надежных способов исследования особенностей макроскопического параметра порядка в сверхпроводниках является анализ температурной зависимости плотности сверхпроводящих носителей: $\rho_{\text{sc}}(T) \sim 1/\lambda^2(T)$, где λ – лондоновская глубина проникновения. Эта методика позволяет косвенно определить количество сверхпроводящих щелей, их ве-

личины и дать оценку их угловой структуры в импульсном пространстве. Температурная зависимость ρ_{sc} может быть получена из зависимости первого критического поля в соответствии с формулой для сверхпроводников II рода

$$H_{c1}(T) = \phi_0 [\ln(\kappa(T)) + 0.5] / [4\mu_0 \pi \lambda^2(T)] \quad (2)$$

в соответствии с предсказаниями теории Гинзбурга–Ландау. Величина первого критического поля определяется из кривых намагниченности. Как известно, до достижения внешним полем величины H_{c1} кривая намагниченности сверхпроводящего образца линейна и ее наклон равен $-\frac{1}{4}\pi$. При достижении внешним полем значения H_{c1} в сверхпроводнике второго рода формируются вихри Абрикосова, которые входят в кристалл, при этом эффективно уменьшают объем сверхпроводящей фазы и приводят к отклонению кривой намагниченности от линейного хода. Существует много способов определения величины H_{c1} из кривых намагничивания. В данной работе кривые намагничивания были измерены с помощью микродатчика Холла [27]. В этой методике на датчик Холла размером 50×50 мкм кладется образец цилиндрической формы и размером $1 \times 1 \times 0.2$ мм параллельно ab -плоскости и измеряется сигнал датчика в зависимости от приложенного по оси c внешнего постоянного магнитного поля. В результате измерений интегрально входит анизотропия лондоновской глубины и, соответственно, концентрации куперовских пар в ab -плоскости. Это позволяет двум методам дополнять друг друга, поскольку спектроскопия MAO детектирует анизотропию щели также в ab -плоскости. Отметим, что влияние краевых дефектов при измерении кривых $M(H)$ изменяет только абсолютную величину $H_{c1}(T)$, в то время как определяемые параметры сверхпроводящего состояния зависят только от формы кривой $H_{c1}(T)/H_{c1}(0)$. Выбор критерия определения H_{c1} из кривых намагничивания также влияет лишь на амплитуду H_{c1} : получаемые нормированные температурные зависимости $H_{c1}(T)/H_{c1}(0)$ подобны друг другу с погрешностью $< 2\%$.

Для описания экспериментальных результатов измерения первого критического поля традиционно применяется так называемая альфа-модель расчета макроскопического параметра порядка изотропного сверхпроводника [28], которая легко расширяется для двухщелевого сверхпроводника [29]:

$$\rho_{sc}(T) = \varphi \rho_{sc1}(T) + (1 - \varphi) \rho_{sc2}(T). \quad (3)$$

Данная модель описывает нормированную плотность куперовских пар двух *невозмущающих*

сверхпроводящих конденсатов с соответствующими весами (температурная зависимость энергии каждой из щелей предполагается БКШ-образной). В свою очередь, нормированная сверхпроводящая плотность связана с критическим полем как

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{sc}(T) \equiv \rho_{sc}(T)/\rho_{sc}(0) &= H_{c1}(T)/H_{c1}(0) = \\ &= \lambda^2(0)/\lambda^2(T). \end{aligned} \quad (4)$$

В общем виде, с учетом возможной анизотропии обеих щелей данная модель имеет 7 свободных параметров: критическое поле при нулевой температуре $H_{c1}(0)$, критическая температура T_c (единая для обоих конденсатов), величины характеристических отношений сверхпроводящих щелей $2\Delta_L^{\text{out}}(0)/k_B T_c$ и $2\Delta_S^{\text{out}}(0)/k_B T_c$ при $T \ll T_c$, степени их анизотропии A_L, A_S (для расчетов взято угловое распределение в импульсном пространстве $\Delta(\theta) = \Delta^{\text{out}} \cdot [1 - \frac{A}{2}(1 - \cos(4\theta))]$, где θ – угол в $k_x k_y$ -плоскости) и весовой вклад одной из эффективных зон φ , что приводит к возможному существованию нескольких решений. При использовании величин $\Delta_L^{\text{in}}(0)$, $\Delta_L^{\text{out}}(0)$ и Δ_S , определенных напрямую методом андреевской спектроскопии, а также критической температуры количество свободных параметров может быть уменьшено до трех: $H_{c1}(0)$, весовой вклад зон с малой щелью φ и степень ее анизотропии A_S .

Также в качестве оценки нормированного макроскопического параметра порядка для изотропного сверхпроводника в “грязном” пределе можно взять выражение [30]

$$\tilde{\rho}_{sc}(T) = \delta(T) \cdot \tanh\left(\frac{\Delta(T)}{2k_B T}\right), \quad (5)$$

где $\delta(T) \equiv \Delta(T)/\Delta(0)$. В случае анизотропного в k -пространстве микроскопического параметра порядка $\Delta(\theta)$ необходимо интегрировать выражение 5 по углу θ . Таким образом, температурные зависимости сверхпроводящих щелей $\Delta_{L,S}(T)$, полученные методом андреевской спектроскопии, могут быть использованы для сравнения с нормированной зависимостью $H_{c1}(T)/H_{c1}(0)$. Такой подход, в отличие от альфа-модели, позволяет *учесть межзонное взаимодействие*, которое влияет на форму $\Delta_{L,S}(T)$. С учетом углового распределения микроскопических параметров порядка $\Delta_{L,S}(\theta)$ и их интегрального значения Δ^{eff} , определенного выше, в двухзонном приближении получим

$$\tilde{\rho}_{sc}(T) = \varphi \tilde{\rho}_S^{\text{eff}}(T) + (1 - \varphi) \tilde{\rho}_L^{\text{eff}}(T). \quad (6)$$

3. Экспериментальные данные и обсуждение. На рисунке 1 приведены ВАХ и $dI(V)/dV$ -спектры SnS-контакта, измеренные ниже и выше

T_c . $I(V)$ симметричны относительно $eV = 0$, не имеют гистерезиса и сверхтоковой ветви, что исключает джозефсоновскую природу наблюдаемых на $dI(V)/dV$ особенностей. Напротив, при $T < T_c$ на ВАХ наблюдается избыточный ток (относительно нормальной $I(V)$ при $T > T_c$) во всем диапазоне смещений eV . В то же время, в сверхпроводящем состоянии на $dI(V)/dV$ -спектрах хорошо виден “пьедастал” при $eV \rightarrow 0$ и серия андреевских минимумов. Данные особенности ВАХ и $dI(V)/dV$ соответствуют реализации некогерентного режима MAO и достаточно высокой прозрачности SnS-контакта согласно всем имеющимся теоретическим моделям MAO [20, 21, 23, 24].

При 4.2 К на смещениях $|eV| \approx 8.9$ мэВ и $|eV| \approx 6.4$ мэВ наблюдается дублет. Положения минимумов, образующих дублет, не соответствуют формуле (1) и не могут быть интерпретированы как андреевские субгармоники порядка $n = 1, 2$ или $n = 2, 3$ от изотропной сверхпроводящей щели. Особенности $dI(V)/dV$ при больших смещениях отсутствуют, т.е. линейный участок спектра соответствует области энергий вне щели, где мощные пики плотности электронных состояний отсутствуют. Таким образом, оба минимума дублета являются фундаментальными $n = 1$ андреевскими особенностями, а их положения напрямую определяют два энергетических параметра $\Delta_L^{\text{out}} \approx 4.5$ мэВ и $\Delta_L^{\text{in}} \approx 3.2$ мэВ. Минимум при $|eV| \approx 4.5$ мэВ соответствует второй субгармонике от Δ_L^{out} .

При меньших смещениях $|eV| \approx 3.2$ и 1.6 мэВ присутствуют минимумы ($n_S = 1, 2$ на рис. 1b), которые, по всей вероятности, являются первой и второй андреевскими особенностями СГС от малой щели $\Delta_S \approx 1.6$ мэВ. Положение второй субгармоники от Δ_L^{in} , ожидаемое при $|eV| \approx 3.2$ мэВ, совпадает с положением фундаментального минимума от Δ_S .

Используя данные ARPES [3], полученные на монокристаллах семейства Ва-122, можно предположить, что (анизотропная) большая сверхпроводящая щель открывается на внутреннем дырочном цилиндре в Γ -точке и в электронных зонах, а малая щель – на внешнем Γ -цилиндре.

Характеристические отношения энергетических параметров составляют $2\Delta_L^{\text{out}}(0)/k_B T_c \approx 5.5$, $2\Delta_L^{\text{in}}(0)/k_B T_c \approx 4.1$ и $2\Delta_S(0)/k_B T_c \approx 2 < 3.53$ (что характерно для “слабого” конденсата в многощелевом сверхпроводнике).

Подобные дублеты воспроизводимо наблюдаются нами на $dI(V)/dV$ -спектрах других SnS-контактов, полученных в $\text{BaFe}_{1.92}\text{Ni}_{0.08}\text{As}_2$ из той же закладки, а также в BFNA пере- и оптимально допированного составов [7, 8] и могут быть вызваны анизотропией

большой щели Δ_L в $k_x k_y$ -плоскости (при этом Δ_L^{out} и Δ_L^{in} соответствуют максимальной и минимальной энергии связи куперовских пар в зависимости от направления импульса). В пользу этого предположения, форма дублета может быть аппроксимирована в рамках подхода [25]: результат численного расчета при 4.2 К приведен на рис. 1 сплошной фиолетовой линией, соответствующее угловое распределение $\Delta_L(\theta)$ показано на верхней вставке к рис. 2. С другой стороны, нельзя исключать реализацию двух различных изотропных сверхпроводящих щелей Δ_L^{in} и Δ_L^{out} (открывающихся ниже T_c на различных листах поверхности Ферми). Для малой щели четкие дублеты на $dI(V)/dV$ -спектрах нами воспроизводимо не наблюдаются, что может быть следствием либо изотропности Δ_S , либо степени анизотропии более 50 %, а также наличия нулей в $k_x k_y$ -плоскости. Небольшая амплитуда ($\sim 0.2G_N$) андреевских минимумов от Δ_S также может указывать на сильную анизотропию Δ_S вдоль k_z -направления. Для того чтобы различить вышеуказанные случаи и достоверно определить тип симметрии Δ_L и Δ_S , необходимо расширение имеющихся теоретических моделей MAO [20, 21, 23, 24] для случая анизотропной сверхпроводящей щели и более детальные исследования формы дублетов на $dI(V)/dV$ -спектрах.

С увеличением температуры амплитуда всех андреевских минимумов уменьшается, а их положение смещается в сторону нуля, отражая вариацию параметра порядка $\Delta(T)$ в соответствии с формулой (1). Вместе с этим, уменьшается избыточный ток при $|eV| > 2\Delta_L$ (рис. 1a) и проводимость при нулевом смещении (рис. 1b). Напротив, нормальная проводимость контакта при $|eV| > 2\Delta_L$ остается примерно постоянной (сравните черную сплошную кривую при $T = 4.2$ К и штриховую линию при $T > T_c$ внизу на рис. 1b при максимальных eV). Для удобства остальные $dI(V)/dV$ -спектры вручную сдвинуты по вертикали в порядке увеличения температуры), что однозначно говорит о баллистическом характере транспорта через этот контакт. При $T \approx 18.9$ К $> T_c$ на ВАХ и $dI(V)/dV$ -спектре (штриховая линия на рис. 1b) отсутствуют особенности, вызванные андреевским транспортом, что соответствует переходу контактной области в нормальное состояние.

Для удобства рассмотрения андреевских структур, на всех $dI(V)/dV$ -спектрах на рис. 1b была подавлена нормальная динамическая проводимость, являющаяся в SnS-контактах на базе BFNA воспроизводимо нелинейной и имеющая вид, сходный с представленным на рис. 1 в работе [8]. Данная

нелинейность не связана с перегревом контакта (в этом случае в нормальном состоянии наблюдался бы максимум $dI(V)/dV$ при малых eV [31]) и может быть интерпретирована как проявление особенностей электронной плотности состояний вблизи уровня Ферми (подробнее см. раздел III(a) в [8]).

Температурные зависимости трех наблюдаемых энергетических щелевых параметров $\Delta_L^{\text{out}}(T)$, $\Delta_L^{\text{in}}(T)$ (кружки) и $\Delta_S(T)$ (треугольники) на рис. 2, полученные напрямую по данным рис. 1b, типичны для случая умеренного межзонного взаимодействия. Для большой щели степень предположительной анизотропии составляет $A(T) \approx 29\% \approx \text{const}(T)$ (квадраты, нижняя вставка к рис. 2). Хотя эта оценка анизотропии является косвенной, можно уверенно констатировать отсутствие точек нулей Δ_L в k -пространстве. Вблизи T_c малая щель закрывается быстрее (звезды, нижняя панель рис. 2). Поскольку отношение $\Delta_L(T)/\Delta_S(T) \neq \text{const}$ и увеличивается при $T \rightarrow T_c$, андреевские минимумы, обозначенные на рис. 1b как $n_S = 1, 2$, не могут быть интерпретированы как субгармоники высоких порядков от Δ_L , а малая щель Δ_S является отдельным сверхпроводящим параметром порядка. Минимум, обозначенный на рис. 1b синей вертикальной линией и меткой $n_L^{\text{out}} = 2$, является второй субгармоникой от Δ_L^{out} , поскольку имеет смещение, соответствующее ожидаемому $V_2 = v_1/2$, а также совпадающую с $n_L^{\text{out}} = 1$ температурную зависимость (синие кружки на нижней панели к рис. 2; см. также раздел II Дополнительные материалы).

Кривые намагниченности монокристалла $\text{BaFe}_{1.92}\text{Ni}_{0.08}\text{As}_2$ приведены на рис. 3. Критерий определения величины H_{c1} (без учета размагничивающего фактора) по зависимости $\sqrt{\Delta M(H)}$ (вставка на рис. 3) типичен для измерений с помощью датчика Холла [32]. Теоретически [33], начальный горизонтальный участок на этой зависимости соответствует мейснеровскому состоянию, а линейный участок – смешанному состоянию. В эксперименте на кривых $\sqrt{\Delta M(H)}$ могут присутствовать шумы и нелинейности, возникающие, на наш взгляд, из-за мелких вкраплений неоднородностей сверхпроводящей фазы, которые могут находиться рядом с чувствительной зоной датчика Холла. Нам удалось достичь чрезвычайно низкого уровня шумов $0.02 - 0.03 \text{ Э}$ (при чувствительности датчика 0.5 мкВ/Э), примерно в 20 раз меньшего, чем в работе [32]. Критерием определения H_{c1} (горизонтальная линия на вставке к рис. 3) был выбран уровень сигнала датчика Холла, превышающий

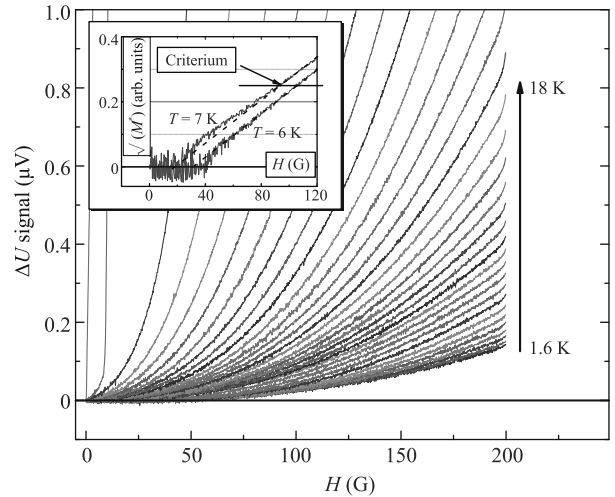


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость сигнала датчика Холла от внешнего магнитного поля при различных температурах. На вставке для примера приведены две кривые в координатах $\sqrt{\Delta U(H)}$ для температур 7 К (голубая кривая) и 6 К (коричневая кривая). В этих координатах мейснеровский участок соответствует горизонтальной прямой $y = 0$, а участок смешанного состояния – линейному ходу, который аппроксимирован штриховыми линиями. Критерием определения H_{c1} был выбран уровень сигнала, обозначенный горизонтальной линией, который стоит, во-первых, выше уровня шумов, а во-вторых, выше уровня нелинейных паразитных вкладов (как видно на голубой кривой)

уровень шумов и нелинейных паразитных вкладов на зависимостях $\sqrt{\Delta M(H)}$.

Полученная по данным рис. 3 зависимость $H_{c1}(T)$ и результаты ее обработки двухзонной альфа-моделью для двух случаев представлены на рис. 4 красными и синими кривыми. В обоих случаях взята $\Delta_L = 3.2 - 4.5 \text{ мэВ}$ со степенью анизотропии $A_L = 29\%$ и характерная величина малой щели $\Delta_S = 1.6 \text{ мэВ}$, полученные по данным МАО-спектроскопии. В первом случае (красные кривые на рис. 4) Δ_S предполагается изотропной ($A_S = 0$). Видно, что при $T < 10 \text{ К}$ наблюдается значительное различие между экспериментальными данными и расчетом по модели. В этом варианте лучшая аппроксимация достигается при весовом вкладе зон с малой щелью 82%. Во втором случае (синие кривые на рис. 4) была взята *анизотропная* малая щель, что позволяет получить лучшее согласование между экспериментальным результатом и расчетом при величине анизотропии $A_S = 58\%$ и весовом вкладе зон с малой щелью 62%. При вариации критериев определения H_{c1} из кривых намагничивания наилучшая аппроксимация $H_{c1}(T)$ допускает разброс значений весового вклада зон с

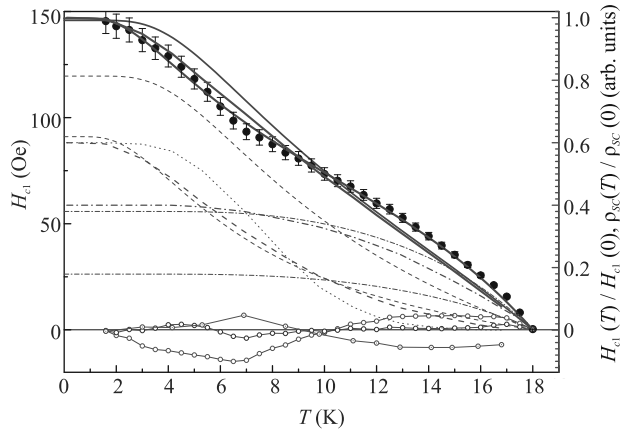


Рис. 4. (Цветной онлайн) Экспериментальная температурная зависимость первого критического поля $H_{c1}(T)$ (черные кружки) и ее аппроксимации: 1. α -модель, изотропная Δ_S , весовой коэффициент $\varphi = 0.28$ (красные кривые); 2. α -модель, 58 %-анізотропія Δ_S , $\varphi = 0.38$ (линии синего цвета); 3. выражениями (5), (6) (правая ось, кривые зеленого цвета), 100 %-анізотропія Δ_S , $\varphi = 0.6$ (мелкий зеленый пунктир – парциальный вклад зон с изотропной малой щелью $\Delta_S \approx 1.6$ мэВ). Внизу соответствующими цветами показаны отклонения аппроксимаций от экспериментальных данных. Штриховые линии – парциальные вклады зон с малой щелью, штрихпунктирные – зон с большой щелью (анізотропія $A_L = 29\%$), сплошные линии – суммарная концентрация куперовских пар ρ_{sc}

Δ_S в пределах $\pm 5\%$ и разброс значений анизотропии Δ_S в пределах $\pm 12\%$ от среднего $A_S = 55\%$. Аппроксимации кривых $H_{c1}(T)$ с другими критериями приведены в Дополнительном материале.

Таблица 1. Результаты аппроксимации $H_{c1}(T)$: степень анизотропии малой сверхпроводящей щели A_S , характеристическое отношение для ее эффективной величины $2\Delta_S^{\text{eff}}(0)/k_B T_c$ и весовой вклад зон с Δ_S . Диапазоны величин получены при различных критериях выбора значения H_{c1} . Для всех случаев взята анизотропная большая щель с пороговыми амплитудами $\Delta_L^{\text{in}} = 3.2$ мэВ и $\Delta_L^{\text{out}} = 4.5$ мэВ ($A_L = 29\%$)

Модель	A_S , %	$\frac{2\Delta_S^{\text{eff}}(0)}{k_B T_c}$	Вклад зон с Δ_S
α -модель	0	2.03	0.81–0.83
α -модель	47–63	1.47	0.60–0.66
формула (6)	100	1.01	0.6

Аппроксимация нормированной температурной зависимости $H_{c1}(T)/H_{c1}(0)$ данными микроскопических параметров порядка $\Delta_L^{\text{eff}}(T)$ и $\Delta_S(T)$, полученными методом андреевской спектроскопии, приведена на рис. 4 кривыми зеленого цвета (правая ось). Заметим, что объемная T_c кристалла по данным намагниченности совпадает с T_c андреевского контакта по данным MAO-спектроскопии.

Для случая изотропной малой щели $\Delta_S \approx 1.6$ мэВ парциальный вклад соответствующих зон в сверхпроводящую плотность (мелкий пунктир на рис. 4) начинает резко убывать при довольно высоких температурах $T \approx 6$ К, что не позволяет аппроксимировать низкотемпературную часть $H_{c1}(T)/H_{c1}(0)$. При интегрировании выражения (6) по углу можно в целом описать экспериментальные данные с весовым коэффициентом $\varphi \approx 0.6$ для зон с Δ_S , также, предположив ее 100 %-анізотропію (что приводит к эффективной величине $\Delta_S^{\text{eff}}(0) \approx 0.8$ мэВ) (сплошная зеленая линия на рис. 4).

Таким образом, наилучшая аппроксимация $H_{c1}(T)$ соответствует второму рассмотренному случаю (синяя кривая на рис. 4, 2-я строка табл. 1).

Из сравнения данных андреевской спектроскопии и первого критического поля видно, что данные $H_{c1}(T)$ не могут быть описаны в рамках изотропного характера Δ_S . Это косвенно указывает на наличие достаточно сильной анизотропии малой щели и наблюдаемости в туннельном эксперименте особенности только от верхнего экстремума $\Delta_S^{\text{out}} \approx 1.6$ мэВ.

Поскольку в рамках s^{++} -подхода трудно получить сильную анизотропию сверхпроводящей щели в k -пространстве [6], можно судить о важности спиновых флуктуаций в механизме сверхпроводящего спаривания BFNA недодопированного состава. Тем не менее, целевая структура BFNA с $x = 0.08$ достаточно схожа с нашими данными по кристаллам оптимального и передопированного состава [7, 8] (за исключением сильной анизотропии Δ_S , не наблюдаемой нами ранее (предмет дальнейших исследований)). Для слабо недодопированного состава мы не наблюдаем заметного изменения анизотропии Δ_L : значение $A_L \approx 30\%$ находится в диапазоне 27–37%, оцененном для составов с $x = 0.1, 0.14$ [7, 8].

Внизу на рисунке 4 соответствующими цветами показаны отклонения трех аппроксимаций от экспериментальных данных по $H_{c1}(T)$. Видно, что в области быстрого снижения концентрации куперовских пар в зонах с малой щелью Δ_S при $T \sim 7$ К все использованные подходы встречают затруднение с количественным соответствием эксперименту. Можно предположить, что это несоответствие является либо следствием увеличения влияния при этих температурах некоего неучтенного канала неупругого рассеяния на примесях, либо асимметрии электрон-дырочных состояний ниже T_c в зонах с Δ_S .

4. Заключение. Предложен комплексный подход к исследованию анизотропного сверхпроводящего параметра порядка с помощью андреевской спектроскопии планарных SnS-контактов и изме-

рения первого критического поля. В пниктидах $\text{BaFe}_{1.92}\text{Ni}_{0.08}\text{As}_2$ слабо недодопированного состава с $T_c \approx 18.2\text{K}$ нами определена $A_L \approx 30\%$ анизотропия большой сверхпроводящей щели (без нулей в k -пространстве). Мы не наблюдаем заметного изменения ее характеристического отношения $2\Delta_L/k_B T_c \approx 4.1\text{--}5.7$ (диапазон соответствует A_L) и степени ее анизотропии по сравнению с другими областями фазовой диаграммы BFNA [7, 8]. Тем не менее, для малой щели на основе температурного поведения $H_{c1}(T)/H_{c1}(0)$ показана значительная анизотропия $A_S \approx 50\text{--}100\%$.

Измеренные напрямую температурные зависимости $\Delta_L^{\text{in,out}}(T)$ и $\Delta_S(T)$ типичны для случая умеренного межзонного взаимодействия, степень предположительной анизотропии большой щели практически не меняется с температурой.

Авторы благодарят Ю. А. Алещенко и В. М. Пудалова за полезные обсуждения. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема “Физика высокотемпературных сверхпроводников и новых квантовых материалов”, # 0023-2019-0005). Измерения частично проведены с использованием оборудования Центра коллективного пользования ФИАН.

1. X. Lu, DOI:10.1007/978-981-10-4998-9.
2. S. Ijeta, T. Yoshida, I. Nishi et al. (Collaboration), Phys. Rev. Lett. **110**, 107007 (2013).
3. D. V. Evtushinsky, V. B. Zabolotnyy, L. Harnagea, A. N. Yaresko, S. Thirupathaiiah, A. A. Kordyuk, J. Maletz, S. Aswartham, S. Wurmehl, E. Rienks, R. Follath, B. Büchner, and S. V. Borisenko, Phys. Rev. B **87**, 094501 (2013).
4. K. Cho, M. Konczykowski, S. Teknowijoyo, M. A. Tanatar, Y. Liu, T. A. Lograsso, W. E. Straszheim, V. Mishra, S. Maiti, P. J. Hirschfeld, and R. Prozorov, Sci. Adv. **2**, e1600807 (2016).
5. P. J. Hirschfeld, Compt. Rend. Phys. **17**, 197 (2016).
6. T. Saito, S. Onari, and H. Kontani, Phys. Rev. B **88**, 045115 (2013).
7. T. E. Kuzmicheva, S. A. Kuzmichev, K. S. Pervakov, and V. A. Vlasenko, JETP Lett. **112**, 786 (2020).
8. T. E. Kuzmicheva, S. A. Kuzmichev, K. S. Pervakov, and V. A. Vlasenko, Phys. Rev. B **104**, 174512 (2021).
9. Yu. A. Aleshchenko, A. V. Muratov, G. A. Ummarino, S. Richter, A. A. Thomas, and R. Hühne, J. Phys.: Condens. Matter **33**, 045601 (2021).
10. Y. Gong, W. Lai, T. Nosach, L. J. Li, G. H. Cao, Z. A. Xu, and Y. H. Ren, New J. Phys. **12**, 123003 (2010).
11. Z.-S. Wang, Z.-Y. Wang, H.-Q. Luo, X.-Y. Lu, J. Zhu, C.-H. Li, L. Shan, H. Yang, H.-H. Wen, and C. Ren, Phys. Rev. B **86**, 060508(R) (2012).
12. M. Abdel-Hafiez, Y. Zhang, Z. He, J. Zhao, C. Bergmann, C. Krellner, C.-Ga. Duan, X. Lu, H. Luo, P. Dai, and X.-J. Chen, Phys. Rev. B **91**, 024510 (2015).
13. B. Zeng, B. Shen, H. Luo, G. Mu, P. Cheng, H. Yang, L. Shan, C. Ren, and H.-H. Wen, Phys. Rev. B **85**, 224514 (2012).
14. K. S. Pervakov, V. A. Vlasenko, E. P. Khlybov, A. Zaleski, V. M. Pudalov, and Yu. F. Eltsev, Supercond. Sci. Technol. **26**, 015008 (2013).
15. Yu. F. Eltsev, K. S. Pervakov, V. A. Vlasenko, S. Yu. Gavrilkin, E. P. Khlybov, and V. M. Pudalov, Phys.-Uspekhi **57**, 827 (2014).
16. V. A. Vlasenko, O. A. Sobolevskiy, A. V. Sadakov, K. S. Pervakov, S. Yu. Gavrilkin, A. V. Dik, and Yu. F. Eltsev, JETP Lett. **107**, 119 (2018).
17. J. Moreland and J. W. Ekin, J. Appl. Phys. **58**, 3888 (1985).
18. S. A. Kuzmichev and T. E. Kuzmicheva, Low Temp. Phys. **42**, 1008 (2016).
19. Z. Popović, S. A. Kuzmichev, and T. E. Kuzmicheva, J. Appl. Phys. **128**, 013901 (2020).
20. M. Octavio, M. Tinkham, G. E. Blonder, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B **27**, 6739 (1983).
21. R. Kümmel, U. Gunsenheimer, and R. Nicolisky, Phys. Rev. B **42**, 3992 (1990).
22. G. B. Arnold, J. Low Temp. Phys. **68**, 1 (1987).
23. D. Averin and A. Bardas, Phys. Rev. Lett. **75**, 1831 (1995).
24. U. Gunsenheimer and A. D. Zaikin, Phys. Rev. B **50**, 6317 (1994).
25. T. P. Devereaux and P. Fulde, Phys. Rev. B **47**, 14638 (1993).
26. G. Wexler, Proc. Phys. Soc. **89**, 927 (1966).
27. C. Ren, Z.-S. Wang, H.-Q. Luo, H. Yang, L. Shan, and H.-H. Wen, Phys. Rev. Lett. **101**, 257006 (2008).
28. D. C. Johnston, Supercond. Sci. Technol. **26**, 115011 (2013).
29. A. Carrington and F. Manzano, Physica C **385**, 205 (2003).
30. M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity: Second Edition*, McGraw-Hill, N.Y. (1996).
31. Yu. G. Naidyuk, O. E. Kvitnitskaya, S. Aswartham, G. Fuchs, K. Nenkov, and S. Wurmehl, Phys. Rev. B **89**, 104512 (2014).
32. C. Ren, Z.-S. Wang, H.-Q. Luo, H. Yang, L. Shan, and H.-H. Wen, Phys. Rev. Lett. **101**, 257006 (2008).
33. M. Naito, A. Matsuda, K. Kitazawa, S. Kambe, I. Tanaka, and H. Kojima, Phys. Rev. B **41**, 4823(R) (1990).

Влияние кристаллизации на 3D структуру пор в сегнетоэлектрических пленках PZT

А. В. Атанова⁺¹⁾, Д. Н. Хмеленин⁺, О. М. Жигалина^{+*}

⁺Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова
Федеральный научно-исследовательский центр “Кристаллография и фотоника” РАН, 119333 Москва, Россия

^{*}Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, 105005 Москва, Россия

Поступила в редакцию 27 сентября 2022 г.

После переработки 7 октября 2022 г.

Принята к публикации 7 октября 2022 г.

Впервые методом ФИП-РЭМ нанотомографии визуализирована структура пористых пленок титаната-цирконата свинца, полученного методом химического осаждения из растворов с добавлением порога Vgij76 . Приведены методики определения связности пор и их распределения. Показано, что пленки обладают высокосвязной системой пор с их закономерным распределением в подслоях, сформированной в процессе многослойного нанесения и последующей кристаллизации.

DOI: 10.31857/S123456782220086, EDN: lyumea

1. Введение. Введение пористости или других материалов в диэлектрики и полупроводники может привести к усилению нелинейно-оптических эффектов [1–3], уменьшению диэлектрической постоянной k (low- k диэлектрики) [4, 5], генерации второй гармоники [6, 7], возникновению пьезоэлектрических свойств в пористом кремнии [8], изменению сегнетоэлектрических и сегнетомагнитических свойств [9, 10] и др., и потому активно исследуется. В случае пьезоэлектриков, подобное наноструктурирование позволяет регулировать независимо в некотором диапазоне такие связанные свойства, как продольный и поперечный пьезоэлектрические эффекты, а также повышать коэффициент пьезоэлектрического напряжения для применений в области ультразвуковых преобразователей и низкочастотных сенсоров [11–13]. Цирконат-титанат свинца ($\text{Pb}(\text{Zr}_x\text{Ti}_{1-x})\text{O}_3$, PZT) демонстрирует превосходные сегнето-, пьезо- и пироэлектрические свойства и поэтому создание пористых пленок на их основе представляет большой интерес для различных применений, использующих эти эффекты, в частности для создания накопителей энергии, пироэлектрических тепловизионных устройств, различных актюаторов и преобразователей [11]. Широкое потенциальное применение пористых пленок PZT обуславливает особое внимание ученых к данному материалу.

Одним из методов получения пористых пленок PZT является метод химического осаждения из рас-

творов. Для формирования структуры в растворы прекурсоров добавляют порогины – органические вещества, служащие формообразующим агентом для пор и впоследствии удаляемые из материала в процессе термической обработки. Вид используемых порогинов оказывает непосредственное влияние на особенности пористой структуры. Однако не только вид порога определяет конечную структуру. Как было показано нами ранее [14], использование блоксополимерных поверхностно-активных веществ в качестве порогинов в PZT приводит к формированию развитой мезопористой структуры, размер пор в которой в 5–10 раз превышает размер пор, формируемых этими же порогами в силикатных пленках [15, 16]. Кроме размера, выделяется также и необычная форма пор и относительно однородное распределение пор, видимые на поперечных срезах при исследовании методами ПЭМ. Пленки такой структуры могут быть крайне перспективными для создания композитов на их основе путем заполнения пор. Однако свойства как самих пористых пленок, так и композитов на их основе определяются пространственной структурой пор и фаз, исследования которой скудно представлены в литературе, а для пленок PZT не известны совсем.

Существует большое количество косвенных методов оценки различных параметров пористых структур, однако все они построены на приближенных моделях и не позволяют изучать локальные особенности материалов, которые, в свою очередь, оказывают значительное влияние на свойства микро- и на-

¹⁾e-mail: atanova.a@crys.ras.ru

ноструктур. Наиболее точно охарактеризовать пористую структуру можно томографическими методами. ФИП-РЭМ нанотомография предназначена для изучения структур с характеристическим размером в диапазоне от десятков до сотен нанометров, занимая, таким образом, нишу между классическими томографическими методами (например, рентгеновская), с разрешением до 0.1 мкм, и ПЭМ томографией, обеспечивающей разрешение до единиц нанометров, однако подходящей только для тонких образцов.

Кроме основных структурных характеристик пористых материалов, таких как площадь поверхности, общая пористость и размер пор, метод ФИП-РЭМ нанотомографии позволяет оценить связность пор и их распределение. Связность фаз является одним из основных параметров, характеризующих транспортные свойства сред. В случае пористых пленок связность пор характеризует возможность заполнения их другими материалами для создания нанокомпозитов, транспорт жидких и газовых сред для мембран и катализаторов и др., а также определяет электрические, механические и термические свойства пористых пленок и композитов на их основе [11, 17, 18].

В данной работе мы провели исследование пористой структуры слоев методом ФИП-РЭМ нанотомографии с оценкой связности и распределения пор в сегнетоэлектрических перовскитных пленках PZT с добавлением порогена Brij76.

2. Материалы и методы. Пористые пленки PZT получали методом химического осаждения из растворов путем добавления в раствор прекурсоров полиоксиэтилен (10) стеариловый эфир с молекулярной массой 711 (Brij76, Sigma-Aldrich) в качестве порогена. Это поверхностно-активное вещество используется для создания различных мезопористых материалов в процессе самосборки: силикатов, оксидов титана, циркония и гибридных органическо-неорганических материалов [19–23], однако, насколько нам известно, впервые используется при синтезе пористых пленок PZT.

Пленки получали методом центрифугирования на платинированные кремниевые подложки Si (690 мкм)–SiO₂ (300 нм)–TiO₂ (10 нм)–Pt (160 нм) (Inostek, Корея). Растворы прекурсоров наносили послойно, до получения заданной толщины. Каждый слой подвергали двухступенчатой сушке при 200 °C и при 400 ° в течение 10 мин для удаления органических остатков. Кристаллизацию всей пленки проводили после нанесения последнего слоя при $T = 650\text{ °C}$ в течение 15 мин в муфельной печи.

Для подтверждения изменения структуры пор в процессе кристаллизации по аналогичной методике

была синтезирована однослойная пленка без этапа кристаллизации, только с сушкой при 200 °C и пиролизом при 400 °C. Однослойная пленка была изготовлена с целью исключения эффекта взаимного влияния слоев при многослойном процессе.

Трехмерную структуру пор исследовали методом ФИП-РЭМ нанотомографии. Данный метод заключается в последовательной резке и съемке интересующего объема образца с заданным шагом в камере электронно-ионного растрового микроскопа, где резание осуществляется с помощью ионного пучка, а после получения каждого среза область интереса фотографируют в электронном пучке. Полученный набор последовательных изображений срезов структуры называют z -стеком (z обозначает ось, вдоль которой осуществляется резка). Процедуру получения z -стека проводили в колонне растрового электронно-ионного микроскопа Scios DualBeam (Thermo Fisher Scientific, США) с помощью специальной программы Slice&View, которая позволяет автоматически проводить последовательную резку и съемку, а также осуществляет коррекцию дрейфа изображения. Шаг резки для исследуемых пористых пленок составлял 3 нм. Полученные данные требуют затем программной обработки, включающей в себя выравнивание и коррекцию стека, его сегментацию – разделение объекта на интересующие группы, реконструкцию и количественный анализ.

Полученные данные обрабатывали с использованием программы Fiji, в частности, плагинов StackReg [24] и Template Matching [25] для выравнивания стека, DenoiseEM [26] для фильтрации от шума, Nonuniform background removal для выравнивания фона, Trainable Weka Segmentation [27] для сегментации изображений и 3D ImageJ Suite [28] для визуализации и анализа полученных данных.

Данные об общей пористости и площади поверхности пор были получены с помощью плагина 3D ImageJ Suite. Погрешность значений общей пористости может быть вызвана целым рядом факторов, однако главным источником погрешности является сегментация изображений. На реальных изображениях граница раздела фаз не является резкой, а представлена переходной зоной с шириной, зависящей от качества полученного стека [29]. В процессе сегментации выбранная граница между фазами находится в пределах этой переходной зоны. В данной работе погрешность значений объема пор определялась по крайним возможным значениям при сегментации.

Размер пор оценивался по методу определения локальной толщины для трехмерных объектов, описанному Хилдебрандом и Руесгсеггером [30], где за

локальную толщину в точке p принимается максимальный диаметр сферы, содержащей p и полностью вписанной в структуру. Таким образом, определенный размер пор в исследуемой структуре – это набор диаметров вписанных сфер, содержащих все точки внутри пор. Данный метод реализован в модуле Local Thickness [31] в программе Fiji.

Анализ связности проводился путем “скелетонирования” структуры, т.е. представления ее в виде графа толщиной в один пиксель, проходящего через центр фазы [32–34]. Скелетонирование фаз возможно с использованием различных программ, например, с помощью модуля ITKThickness3D на языке python или плагина Skeletonize3D [35] в программе Fiji. Реализованный в модуле ITKThickness3D (ITK – Insight Toolkit) фильтр MedialThicknessImageFilter3D, основан на построении медиальной оси и вычислении двойного расстояния от оси до поверхности объекта, т.е. диаметра максимальной вписанной сферы в данной области. Такой алгоритм обеспечивает минимальное количество точек скелетона для полного описания объекта [36]. Анализ распределения пор был осуществлен путем подсчета пористости в каждом срезе в любом интересующем направлении [32]. Кроме получаемого стека в направлении оси z , можно получить стеки в направлении x и y при использовании команды reslice в Fiji или аналогичных команд в других программах.

Дополнительные структурные исследования проводили методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), в частности, с использованием широкоугольного кольцевого детектора темного поля в режиме просвечивающей растровой электронной микроскопии (HAADF STEM) на микроскопе Tescan Osiris (Thermo Fisher Scientific, США) при ускоряющем напряжении 200 кВ. Поперечные сечения композиций для исследования в просвечивающем электронном микроскопе готовили с помощью фокусированных ионных пучков в колонне растрового электронного микроскопа Scios Dual Beam (Thermo Fisher Scientific, США).

3. Результаты и обсуждение. На рисунке 1 представлен общий вид полученной трехмерной структуры. Анализ полученной модели показал, что общая пористость составляет $23.3 \pm 3\%$, а удельная площадь поверхности $0.03747 \text{ нм}^2/\text{нм}^3$. Размер пор составляет $27 \pm 6 \text{ нм}$.

Для оценки связности пористой системы сегментированный z -стек с выделенными порами подвергли скелетонированию в программе Fiji [35]. Стоит отметить, что скелетонирование может быть весьма чувствительным к шуму, и потому рекоменду-

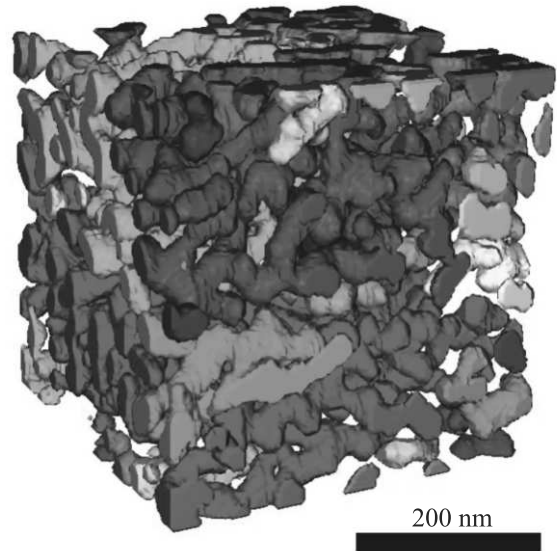


Рис. 1. (Цветной онлайн) Общий вид трехмерной модели пористой структуры пленки PZT

ется дополнительно отфильтровать уже бинаризованный стек перед построением. На рисунке 2 представлен общий вид скелетона после дополнительной фильтрации стека и сечения наложений скелетона на контуры пор от нефильтрованного и дополнительно фильтрованного стека изображений. Видно, что при использовании стека без дополнительной фильтрации неровная форма пор, вызванная шумом, приводит к разветвлению скелетона и появлению лишних точек, мешающих дальнейшему анализу графов.

Анализ полученных в результате скелетонирования графов позволяет проанализировать ряд характеристик системы. Каждый граф состоит из узлов (nodes) и ветвей (branches), количество которых равно N и B соответственно. Анализ скелетона в Fiji (AnalyzeSkeleton [35]) позволяет получить такие полезные характеристики сети, как количество отдельных графов (в интерпретации рассматриваемой системы – связанных пор), количество узлов (N_i) и ветвей в каждом из них (B_i), длины ветвей по отдельности, средние длины ветвей для каждого графа, а также суммарные длины графов. Кроме того, анализ позволяет узнать количество тройных и четверных узлов, т.е. тех узлов, из которых выходит по 3 и 4 ветви, соответственно.

В качестве основного параметра оценки связности можно использовать степень перколяции (p). Этот параметр содержит информацию о доле скелетона, которая взаимосвязана, и описывает транспортные свойства фазы. Методика расчета степени

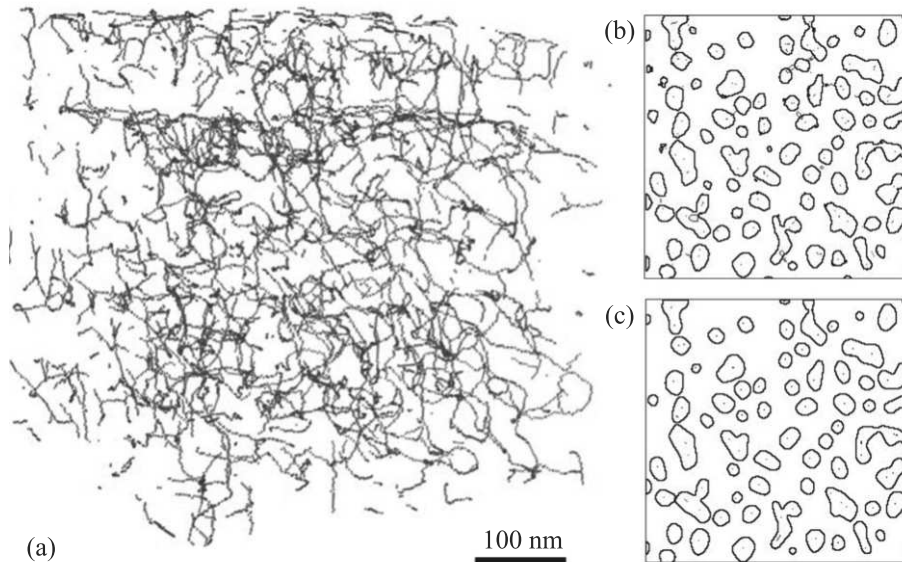


Рис. 2. (Цветной онлайн) Общий вид скелетона после дополнительной фильтрации стека (а) и сечения наложений скелетона на контуры пор от нефильтрованного (б) и дополнительно фильтрованного (с) стека изображений

перколяции хорошо описана в [32]. Скелетон любой фазы (с общей длиной L и средней топологической длиной \bar{L}) состоит из конечного числа отдельных графов (с длинами L_i). Если фаза слабо связана, то ее скелетон состоит из большого числа небольших графов. Если же фаза полностью связана, то ее скелетон представляется одним большим графом. В работе [32] предложен способ определения степени перколяции (p) как отношение кумулятивной (накопленной) длины (L_c) к общей длине скелетона в точке, при которой кумулятивная длина сети изменяется менее чем на 1%. Для ее нахождения индивидуальные графы с длинами L_i сортируют в порядке убывания и для каждого графа вычисляют соответствующую кумулятивную длину всех графов до текущего включительно. Если общая длина скелетона равна L , то p определяется как отношение L_c/L в точке, где последующее увеличение кумулятивной длины приводит к ее изменению (ΔL_c) на менее, чем 1%. Таким образом:

$$p = \frac{\sum L_n}{L} \text{ при } \frac{L_{n+1}}{L} < 1\%. \quad (1)$$

Значение p , близкое к единице, соответствует полностью связанной фазе.

Оценку связности пор в пленке PZT с добавлением 60 вес. % Vgij 76 проводили на области размером $2078 \times 660 \times 500$ нм. Степень перколяции, рассчитанная по формуле (1), составляет 0.75. При этом кумулятивная длина сети представлена тремя графами, один из которых составляет 48.4% от общей се-

ти, второй – 25.2%, а третий – 1.4%. Общее количество ветвей в скелетоне равно 1086, 927 из которых состоят более, чем из одного пикселя. На рисунке 3 представлен график приращения кумулятивной длины для определения степени перколяции. Отношение кумулятивной длины к общей длине сети в точке, где приращение составляет менее 1% определяет степень перколяции. В таблице 1 приведены данные этих трех графов, составляющих 75% скелетона, а в табл. 2 – наиболее важные общие характеристики скелетона в целом. Высокая связность пор показывает, что данные пленки являются перспективными материалами для создания композитов на их основе.

На рисунке 4 представлен результат суммирования последовательных срезов по оси z (по глубине) от области интереса размером $2156 \times 740 \times 600$ нм. Видно, что поры распределены не однородно, а по слоям. Количественный анализ пористости в слоях, параллельных подложке, показан на графике (рис. 4b). Видно, что слоистость пор совпадает с количеством нанесенных слоев (6 слоев для данного образца), между слоями пористость составляет 13.0–16.0%, а внутри слоев наблюдается по два пика: в верхней части слоя количество пор составляет 22.2–28.4%, в середине 20.4–28.0%, а в нижней части пористость максимальная и достигает 26.9–36.8%. В нижней части пленки находится практически сплошной слой толщиной около 40 нм с пористостью до 2%.

Такое необычное распределение пор, как и их форма и размер, могут быть сформированы в про-

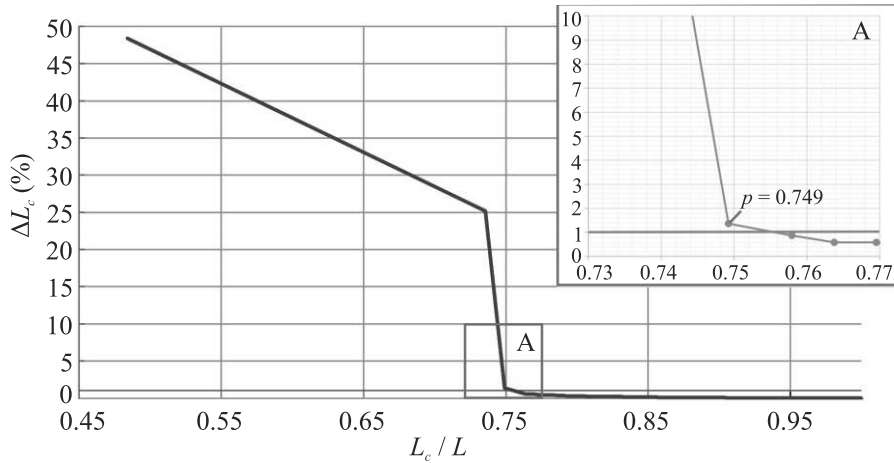


Рис. 3. (Цветной онлайн) График приращения кумулятивной длины для определения степени перколяции

Таблица 1. Некоторые параметры графов в скелетоне для пористой пленки PZT

Граф	Ветви, V_i , шт	Узлы, N_i , шт	Средняя длина ветвей, нм	Тройные узлы	Четверные узлы	Длина графа L_i , нм	L_c , нм	L_c/L
1	4046	1964	36.395	1733	208	147254.2	147254.2	0.48
2	1900	904	40.331	816	81	76628.9	223883.1	0.74
3	96	45	43.328	40	5	4159.5	228042.6	0.75

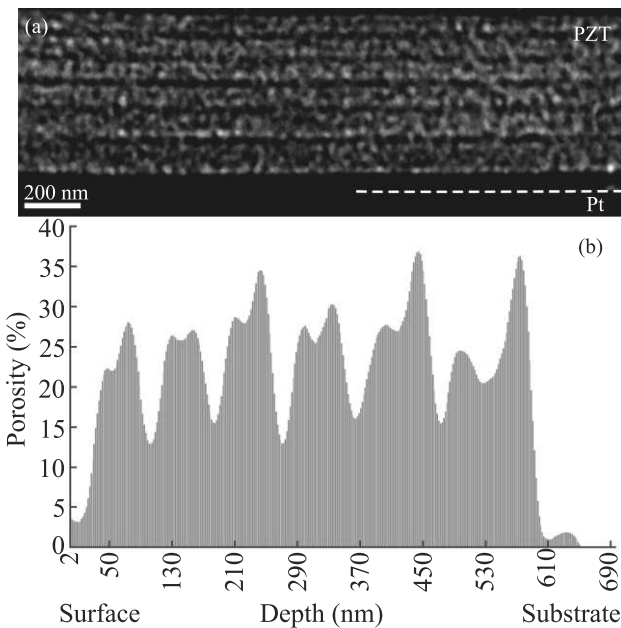


Рис. 4. (Цветной онлайн) Распределение пор в пористой пленке PZT: суммирование изображений на глубине 600 нм (а) и график распределения пор в слоях, параллельных подложке (b)

после кристаллизации пленки. Для сравнения был исследован поперечный срез однослойной пленки с

сушкой и пиролизом, но до кристаллизации (рис. 5). Согласно данным электронограммы (рис. 5b), на данном этапе (до кристаллизации) пленка еще находится в близком к аморфному состоянию, но пороген уже удален в процессе сушки и пиролиза. Размер пор в аморфной пленке составляет всего 2–6 нм, что коррелирует с данными для силикатных пленок [15, 16].

Исследуемые пленки были получены путем послойного нанесения с проведением сушки и пиролиза после каждого слоя и одновременной кристаллизации после нанесения последнего слоя. Вполне вероятно, что открытые поры на поверхности слоев частично заполняются в процессе нанесения следующего слоя, что приводит к уплотнению на границе слоев, как видно из рис. 4. Однако, если считать, что заполнение происходит только PZT-раствором (не порогеном), то над уплотненной зоной должен скапливаться пороген. Это вполне вероятно, так как при синтезе пористых пленок методом химического осаждения из растворов размер пор сразу после удаления порогена соответствует размерам агрегатов самого порогена. В случае порогена Brij76, размер агрегатов и, соответственно, образованных пор находится в узком диапазоне 4–7 нм. В таком случае попадание агрегата из наносимого раствора в пору в уже сформированном слое крайне затруднительно

Таблица 2. Характеристики скелетона для пористой пленки PZT

Количество графов	Общая длина (L), нм	Общее количество узлов (N)	Общее количество ветвей (B)	Средняя топологическая длина (\bar{L}), нм	Степень перколяции (p)
1086	304364.64	3611	8399	84.29	0.75

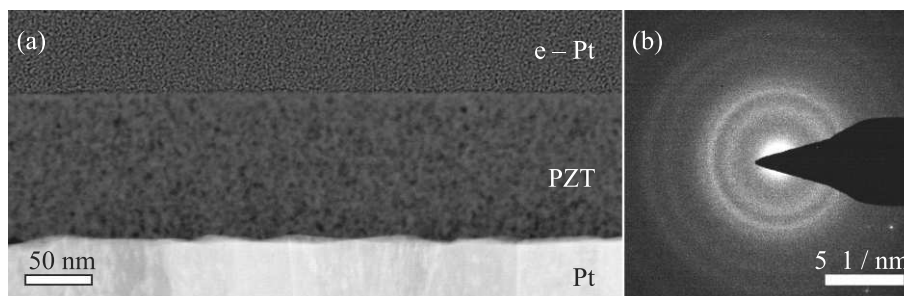


Рис. 5. Микроструктура однослойной пористой пленки PZT после отжига при 400 °С: HAADF STEM изображение (a) и электронограмма (b)

и без дополнительного воздействия (например, давления) невозможно. Далее происходит зарождение и рост перовскитных зерен. Как было показано в работах [37, 38], при аналогичном синтезе плотных пленок PZT на платиновых электродах зерна PZT зарождаются гетерогенно на границе раздела PZT–Pt и растут с образованием столбчатых зерен. В случае синтеза пористых пленок, фронт кристаллизации,двигающийся от подложки, встречает на своем пути наноразмерные поры и приводит к их движению и перераспределению в объеме. Коллективное движение пор наиболее вероятно, если, как ожидается, пороги типа V_{gij} изначально образуют цилиндрические структуры. При критическом скоплении поры становятся неподвижными, объединяются и образуют более крупные – этот пик мы наблюдаем в первом слое вблизи подложки. Стенки пор могут разрушаться в процессе коалесценции во время кристаллизации, что согласуется с поведением, описанным для различных материалов [21, 39]. Уплотненная же часть в первом слое – результат движения пор фронтом кристаллизации. Дальше фронт кристаллизации двигает уже следующие поры, начиная заново, поэтому пористость “проседает” в середине слоя. Однако по мере приближения к границе подслоев,двигающиеся поры упираются в уплотненный слой, их движение прекращается, поры двигаться больше не могут, и объединяются прямо перед ним – это и есть второй пик. После этого мы наблюдаем уплотненную зону между слоями, над которыми, как мы предполагаем, может скапливаться пороген в результате пропитки нижележащего слоя только раствором PZT, без крупных молекул порогена. Если порогена

достаточно много, то поры уже слабо подвижны и формируют нижний пик пористости в слоях. Аналогичные процессы происходят дальше в каждом слое.

Согласно описанному механизму, величина локальной пористости определяется:

- В первом слое – критическим скоплением пор, которые дальше легко двигаться не могут – это наблюдаемый нижний пик.

- В каждом слое сверху – количеством пор, которые удалось подвинуть в толще слоя до столкновения с уплотненным слоем. Данный пик может быть меньше или равен пику в нижней части слоев.

- В каждом слое снизу, кроме первого – количеством порогена, который скопился из-за локального ухода раствора PZT в нижний слой.

Данный механизм объясняет закономерное распределение пор и увеличение их размера при кристаллизации. Кроме того, движение пор фронтом кристаллизации подтверждается и скоплением пор на границах зерен, наблюдаемым нами в различных пленках с порогами типа V_{gij} ранее [14]. Низкая температура горения V_{gij} (250 °С–350 °С) и низкая размерность органического каркаса делает пористую структуру менее устойчивой к уплотнению во время осаждения и кристаллизации.

4. Заключение. Впервые методом 3D-анализа в растровом электронном микроскопе визуализирована структура пористых пленок титаната-цирконата свинца с добавлением порогена $V_{gij}76$. Проведена оценка общей пористости, удельной площади поверхности, распределения пор, их реального размера и связности. Для исследуемых пленок общая пористость составляет 23.3%, размер пор – 27 ± 6 нм,

а удельная площадь поверхности $0.03747 \text{ нм}^2/\text{нм}^3$. Оценка связности пор в пленке с Brj76 показала, что пористая система является высокосвязной, степень перколяции составляет 0.75. Таким образом, результаты анализа трехмерной структуры пористых пленок выявили их высокую перспективность применения в качестве матриц для создания микро/нанокмозитов путем заполнения пор.

Показано, что в сечениях, параллельных подложке, поры располагаются закономерно: на границах слоев пористость составляет 13.0–16.0%, а внутри слоев наблюдается по два максимума: в верхней части каждого слоя количество пор составляет 22.2–28.4%, в середине 20.4–28.0%, а в нижней части достигает 26.9–36.8%. В нижней части пленки находится практически сплошной слой толщиной около 40 нм с пористостью до 2%. Установлено, что увеличение размера пор от 2–5 нм до 20–30 нм происходит на стадии кристаллизации пленок. Такое специфическое распределение пор, как и их увеличенный размер, по сравнению с аморфным состоянием до кристаллизации, по-видимому, связано с их миграцией под действием фронта кристаллизации и частичным заполнением раствором прекурсоров в процессе многослойного нанесения. Результаты работы наглядно иллюстрируют необходимость проведения 3D-анализа в комплексе с традиционными ПЭМ-исследованиями 2D-изображений [14] такого рода объектов.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН в части пробоподготовки и исследований методами ПЭМ, а также при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта # 20-32-90056 в области исследований методом ФИП-РЭМ нанотомографии.

1. A. L. Efros, M. Rosen, B. Averboux, D. Kovalev, M. Ben-Chorin, and F. Koch, *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* **56**, 3875 (1997).
2. И. А. Колмычек, И. В. Малышева, В. Б. Новиков, А. И. Майдыковский, А. П. Леонтьев, К. С. Напольский, Т. В. Мурзина, *Письма ЖЭТФ* **114**, 727 (2021).
3. Н. В. Митетело, С. Е. Сваховский, А. Д. Гартман, А. А. Кудринский, Т. В. Мурзина, А. И. Майдыковский, *Письма в ЖЭТФ* **107**, 315 (2018).
4. S. M. Gates, D. A. Neumayer, M. H. Sherwood, A. Grill, X. Wang, and M. Sankarapandian, *J. Appl. Phys.* **101**, 094103 (2007).
5. M. R. Baklanov and K. Maex, *Philos. Trans. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.* **364**, 201 (2006).
6. Л. А. Головань, В. А. Мельников, С. О. Коноров, А. Б. Федотов, С. А. Гаврилов, А. М. Желтиков, П. К. Кашкаров, В. Ю. Тимошенко, Г. И. Петров, Л. Ли, В. В. Яковлев, *Письма в ЖЭТФ* **78**, 229 (2003).
7. J.-M. Yi, D. Wang, F. Schwarz, J. Zhong, A. Chimeh, A. Korte, J. Zhan, P. Schaaf, E. Runge, and C. Lienau, *ACS Photonics* **6**, 2779 (2019).
8. В. А. Морозов, А. Г. Зегря, Г. Г. Зегря, Г. Г. Савенков, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 680 (2021).
9. V. Stancu, M. Buda, L. Pintilie, M. Popescu, and F. Sava, *J. Optoelectron. Adv. Mater.* **9**, 1516 (2007).
10. A. Matavž, P. Koželj, M. Winkler, K. Geirhos, P. Lunkenheimer, and V. Bobnar, *Thin Solid Films* **732**, 138740 (2021).
11. J. Roscow, Y. Zhang, J. Taylor, and C. R. Bowen, *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **224**, 2949 (2015).
12. D. P. Skinner, R. E. Newnham, and L. E. Cross, *Mater. Res. Bull.* **13**, 599 (1978).
13. K. Ayusawa, T. Arai, H. Sato, K. Kawamura, T. Miyata, and K. Kobayashi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **28**, 187 (1989).
14. A. V. Atanova, O. M. Zhigalina, D. N. Khmelinin, G. A. Orlov, D. S. Seregin, A. S. Sigov, and K. A. Vorotilov, *J. Am. Ceram. Soc.* **105**, 639 (2021).
15. A. S. Vishnevskiy, S. Naumov, D. S. Seregin, Y. H. Wu, W. T. Chuang, M. Rasadujjaman, J. Zhang, J. Leu, K. A. Vorotilov, and M. R. Baklanov, *Materials (Basel)* **13**, 4484 (2020).
16. A. S. Vishnevskiy, D. S. Seregin, K. A. Vorotilov, A. S. Sigov, K. P. Mogilnikov, and M. R. Baklanov, *J. Sol-Gel Sci. Technol.* **92**, 273 (2019).
17. A. Safari and E. K. Akdogan, **331**, 153 (2006).
18. J. A. Taillon, C. Pellegrinelli, Y. L. Huang, E. D. Wachsman, and L. G. Salamanca-Riba, *Ultramicroscopy* **184**, 24 (2018).
19. D. Grosso, F. Cagnol, G. Soler-Illia, E. L. Crepaldi, H. Amenitsch, A. Brunet-Bruneau, A. Bourgeois, and C. Sanchez, *Adv. Funct. Mater.* **14**, 309 (2004).
20. G. J. A. A. Soler-Illia, P. C. Angelomé, M. C. Fuertes, D. Grosso, and C. Boissiere, *Nanoscale* **4**, 2549 (2012).
21. L. Mahoney and R. T. Koodali, *Materials (Basel)* **7**, 2697 (2014).
22. S. J. F. Herregods, K. Wyns, A. Buekenhoudt, and V. Meynen, *Adv. Eng. Mater.* **21**, 1 (2019).
23. P. van Der Voort, D. Esquivel, E. De Canck, F. Goethals, I. Van Driessche, and F. J. Romero-Salguero, *Chem. Soc. Rev.* **42**, 3913 (2013).
24. P. Thevenaz, U. E. Ruttimann, and M. Unser, *IEEE Trans. Image Process.* **7**, 27 (1998).
25. Q. Tseng, I. Wang, E. Duchemin-Pelletier, A. Azioune, N. Carpi, J. Gao, O. Filhol, M. Piel, M. Théry, and M. Balland, *Lab Chip* **11**, 2231 (2011).

26. J. Roels, F. Vernailen, A. Kremer, A. Gonçalves, J. Aelterman, H. Q. Luong, B. Goossens, W. Philips, S. Lippens, and Y. Saeys, *Nat. Commun.* **11**, 771 (2020).
27. I. Arganda-Carreras, V. Kaynig, C. Rueden, K. W. Eliceiri, J. Schindelin, A. Cardona, and H. S. Seung, *Bioinformatics* **33**, 2424 (2017).
28. J. Ollion, J. Cochenec, F. Loll, C. Escudé, and T. Boudier, *Bioinformatics* **29**, 1840 (2013).
29. L. Holzer, F. Indutnyi, P. Gasser, B. Münch, and M. J. Wegmann, *J. Microsc.* **216**, 84 (2004).
30. T. Hildebrand and P. Ruegsegger, *J. Microsc.* **185**, 67 (1997).
31. R. Dougherty and K.-H. Kunzelmann, *Microsc. Microanal.* **13**, 1678 (2007).
32. J. A. Taillon, *Advanced analytical microscopy at the nanoscale: applications in wide bandgap and solid oxide fuel cell materials*, University of Maryland, College Park, USA (2016).
33. H. Homann, *Insight J.* **421**, 1 (2007); <https://doi.org/10.54294/xjdr5f>.
34. D. Gostovic, N. J. Vito, K. A. O'Hara, K. S. Jones, and E. D. Wachsman, *J. Am. Ceram. Soc.* **94**, 620 (2011).
35. I. Arganda-Carreras, R. Fernández-González, A. Muñoz-Barrutia, and C. Ortiz-De-Solorzano, *Microsc. Res. Tech.* **73**, 1019 (2010).
36. H. J. Johnson, M. McCormick, and L. Ibáñez, *The ITK Software Guide: Book 1: Introduction and Development Guidelines. Book 2: Design and Functionality*, Fourth Edition, Updated for ITK version 5.2.0. Insight Software Consortium, <https://itk.org/ItkSoftwareGuide.pdf> (2021). – online.
37. K. A. Vorotilov, O. M. Zhigalina, V. A. Vasiljev, and A. S. Sigov, *Phys. Solid State* **51**, 1337 (2014).
38. K. Vorotilov, A. Sigov, D. Seregin, Yu. Podgorny, O. Zhigalina, and D. Khmelenin, *Phase Transitions* **86**, 1152 (2013).
39. S. Agarwala and G. W. Ho, *Mater. Lett.* **63**, 1624 (2009).

Андреевская спектроскопия стехиометрического сверхпроводящего пниктида $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$

С. А. Кузьмичев^{+,*}, К. С. Перваков^{*}, В. А. Власенко^{*}, А. Ю. Дегтяренко^{*}, С. Ю. Гаврилкин^{*},
Т. Е. Кузьмичева^{*1)}

⁺ Физический факультет, МГУ имени М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

^{*} Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 3 октября 2022 г.

После переработки 10 октября 2022 г.

Принята к публикации 13 октября 2022 г.

Выращены монокристаллы пниктида $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ (семейство 1144) с критической температурой $T_c \approx 36.8 \text{ K}$, обладающего оптимальными сверхпроводящими свойствами в стехиометрическом составе. Ниже T_c с помощью спектроскопии эффекта некогерентных многократных андреевских отражений впервые обнаружена многощелевая сверхпроводимость, определяемая объемными параметрами порядка Δ_L^{out} , Δ_L^{in} и Δ_S с характеристическими отношениями $2\Delta_L^{\text{out}}(0)/k_B T_c \approx 5.3$, $2\Delta_L^{\text{in}}(0)/k_B T_c \approx 3.2$ и $2\Delta_S(0)/k_B T_c \approx 1.3$ соответственно. Показано, что щелевая структура $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ схожа с щелевой структурой сверхпроводящих пниктидов $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$ родственного семейства 122.

DOI: 10.31857/S1234567822220098, EDN: lyvwfq

1. Введение. Среди железосодержащих пниктидов особый интерес представляет недавно открытое семейство 1144, которое является полным стехиометрическим аналогом системе BaFe_2As_2 (так называемое семейство 122). Типичный представитель 1144-пниктидов, $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$, обладает тетрагональной структурой, состоящей из двух чередующихся вдоль c -направления неэквивалентных блоков 122: $\text{Eu-FeAs-Cs-FeAs-}\dots$ [1]. Сложность работы с кристаллами $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ обусловлена быстрой деградацией их свойств на поверхности в присутствии кислорода или паров воды из-за наличия щелочного металла в структуре [2]. Поэтому как подготовку, так и сам эксперимент необходимо проводить в защитной атмосфере.

В отличие от родственных 122-пниктидов, требующих определенного уровня допирования для появления и оптимизации сверхпроводящих свойств, семейство 1144 обладает оптимальными сверхпроводящими свойствами непосредственно в стехиометрическом составе, причем их критические температуры $T_c \approx 36 \text{ K}$ близки к максимальным $T_c \approx 38 \text{ K}$, достигаемым в пниктидах Ва-122 оптимально допированного состава. Уникальной особенностью $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ среди других соединений семейства 1144 является магнитное упорядочение в подрешетке Eu в сверхпроводящем состоянии [1, 3].

Расчеты зонной структуры для $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ пока не проводились. Тем не менее, для некоторых соединений расчеты показали, что зоны, образованные орбиталями Eu, расположены в среднем на 1.5 эВ ниже уровня Ферми (см. рис. 3 в [4]), при этом уровень Ферми пересекает около 10 зон, образованных различными d -орбиталями железа и формирующих вложенные, слегка гофрированные вдоль k_z -направления цилиндры поверхности Ферми вокруг Γ и M -точек зоны Бриллюэна [4, 5].

Хотя расчеты щелевой структуры для семейства 1144 также до сих пор не проводились, по аналогии с пниктидами Ва-122 в рамках как s^\pm [6], так и s^{++} -подхода [7] можно ожидать образование ниже T_c нескольких сверхпроводящих конденсатов с анизотропными в k -пространстве параметрами порядка.

В данной работе впервые экспериментально исследована щелевая структура стехиометрических пниктидов $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$. С помощью спектроскопии эффекта некогерентных многократных андреевских отражений (МАО, IMARE) напрямую определены величины энергетических щелевых параметров сверхпроводника при $T \ll T_c$ и их характеристические отношения. Показано сходство структуры сверхпроводящего параметра порядка пниктидов $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ и их стехиометрических аналогов $\text{Ba(Fe,Ni)}_2\text{As}_2$, исследованных нами ранее.

2. Детали эксперимента. Рост монокристаллов $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ осуществлялся из расплава собственного

¹⁾e-mail: kuzmichevate@lebedev.ru

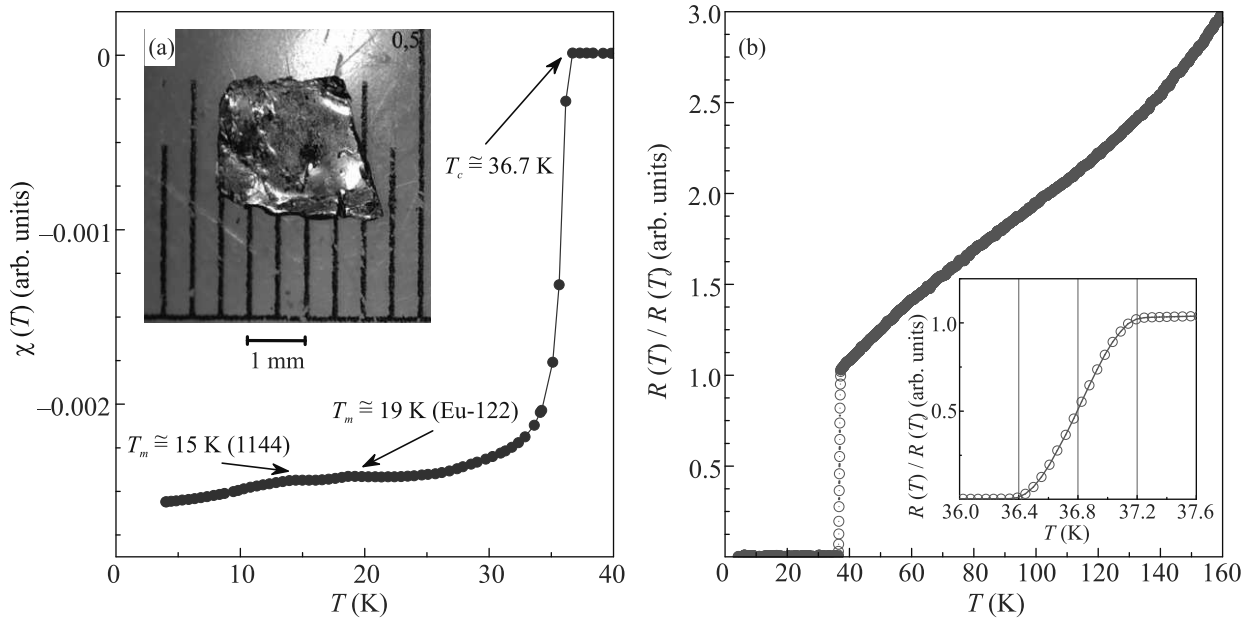


Рис. 1. (Цветной онлайн) Температурные зависимости магнитной восприимчивости (a) и сопротивления (b) монокристалла $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ определяют объемную $T_c \approx 36.7\text{--}36.8\text{ K}$

компонента CsAs так называемым методом “self-flux” [2]. Для синтеза прекурсоров EuAs, Fe_2As и CsAs использовались высокочистые элементы Eu (99.95%), Fe (99.98%), Cs (99.99%), As (99.9999%). Полученные прекурсоры помещались в корундовые тигли в необходимом стехиометрическом соотношении, заваривались в танталовые контейнеры, после чего осуществлялась длительная многоступенчатая термическая обработка в атмосфере аргона при температурах 1200°C и 900°C соответственно. В результате были получены монокристаллы $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ достаточно крупного размера $2.5 \times 2\text{ мм}^2$ (рис. 1a, вставка).

Поскольку фаза 1144 нестабильна на воздухе, отбор монокристаллов, их подготовка и монтаж, а также непосредственно эксперименты проводились в перчаточном боксе в атмосфере сухого аргона для предотвращения деградации сверхпроводящих свойств. Резистивные измерения, проведенные четырехточечным методом, показали достаточно резкий сверхпроводящий переход при $T_c \approx 36.8\text{ K}$ шириной $\Delta T_c \approx 0.8\text{ K}$ (рис. 1b). Выше T_c наблюдалось увеличение $R(T)$ и отсутствие структурных переходов. Температурная зависимость магнитной восприимчивости $\chi(T)$ с ориентацией поля параллельно ab -плоскости образца измерялась на установке PPMS-9 Quantum Design. При $T_m \approx 15\text{ K} < T_c$ заметен магнитный переход фазы $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ (отмечен стрелкой на рис. 1a). Как правило, в процессе роста фаза 1144 конкурирует с родственной фазой 122, при этом достаточно сложно получить чистую фазу 1144. Тем

не менее, отработав температурные режимы роста, нам удалось получить монокристалл $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ со следовыми включениями несверхпроводящей фазы EuFe_2As_2 (слабо выраженная особенность $\chi(T)$ при $T_M \approx 19\text{ K}$).

С помощью техники “break-junction” [8] создавались механически регулируемые планарные контакты на микротрещине (MCPBJ) типа сверхпроводник–тонкий нормальный металл–изолятор–тонкий нормальный металл–сверхпроводник (SnInS). Конструкция измерительного столика и детали эксперимента с образцами слоистых соединений, преимущества и недостатки метода MCPBJ подробно описаны в обзоре [9]. При расслаивании монокристалла при 4.2 K образуются два криогенных скола со ступеньками и террасами на поверхности. Путем тонкой механической регулировки можно добиться того, что криогенные сколы скользят друг относительно друга вдоль террас в кристаллографической ab -плоскости, причем измерительный ток протекает через контакт вдоль c -направления. Физическая модель контакта схематически приведена на рис. 1 в [10].

Ниже T_c в SnInS-контакте имеет место эффект многократных андреевских отражений (MAO). В случае высокой прозрачности диэлектрической прослойки I (барьерный параметр $Z \lesssim 0.3$) и отсутствии фазовой когерентности сверхпроводящих берегов (“длинный контакт”) андреевский транспорт вызывает избыточный ток во всем диапазоне смещений

eV (относительно нормального тока $I(V)$ выше T_c). На $dI(V)/dV$ -спектре такого контакта при $eV \rightarrow 0$ динамическая проводимость в разы повышается относительно проводимости в нормальном состоянии (т.е. образуется область пьедестала), при этом сверхтоковая ветвь отсутствует [11–13]. Также возникает серия минимумов субгармонической щелевой структуры (СГС), положение которых V_n напрямую определяется величиной сверхпроводящей щели Δ при любых температурах вплоть до T_c [11–15]:

$$|eV_n(T)| = 2\Delta(T)/n, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1)$$

Для многощелевого сверхпроводника на $dI(V)/dV$ -спектре будут присутствовать СГС от каждой щели.

Численный расчет в рамках формализма [16] показал, что резкие интенсивные минимумы СГС наблюдаются для изотропной сверхпроводящей щели, в то время как в случае параметра порядка, имеющего точки нулей в k -пространстве (“ноды”), ожидаются минимумы СГС малой амплитуды. В случае расширенной s -волновой симметрии в $k_x k_y$ -плоскости (без нулей) ожидаются дублетные минимумы СГС, ширина которых определяется максимальной Δ^{out} и минимальной Δ^{in} энергиями связи куперовских пар в k -пространстве (см. рис. 4 в [9]). Степень анизотропии Δ далее определена как $A \equiv 100\% \cdot [1 - \Delta^{\text{in}}/\Delta^{\text{out}}]$.

Поскольку в баллистическом режиме нормальное сопротивление контакта $R = (4\rho l)/(3\pi d^2)$ (ρ – удельное сопротивление, l – длина свободного пробега, d – характерный размер контакта; для планарного контакта все величины в ab -плоскости) повышается при увеличении отношения l/d , можно ожидать реализацию баллистического транспорта в высокоомных SnS-контактах (имеющих относительно малый диаметр). Действительно, величины нормальных сопротивлений исследованных планарных SnS-контактов высокой прозрачности R_N до 122 Ом (рис. 2) значительны и превышают типичные $R_N \approx 20\text{--}40$ Ом, получаемые нами ранее в пиктидах других семейств [17, 18], и позволяют заключить баллистический характер транспорта в ab -плоскости. Таким образом, x - и y -компоненты импульса носителей заряда могут сохраняться в процессе МАО, что дает возможность получать информацию об анизотропии Δ в $k_x k_y$ -плоскости. В то же время, в c -направлении может иметь место неупругое рассеяние и “перемешивание” носителей вдоль направления тока.

Подытоживая преимущества использованной экспериментальной методики, спектроскопия SnS-андреевских контактов, создаваемых техникой МСРВJ, дает возможность напрямую определять величины энергетических щелевых параметров

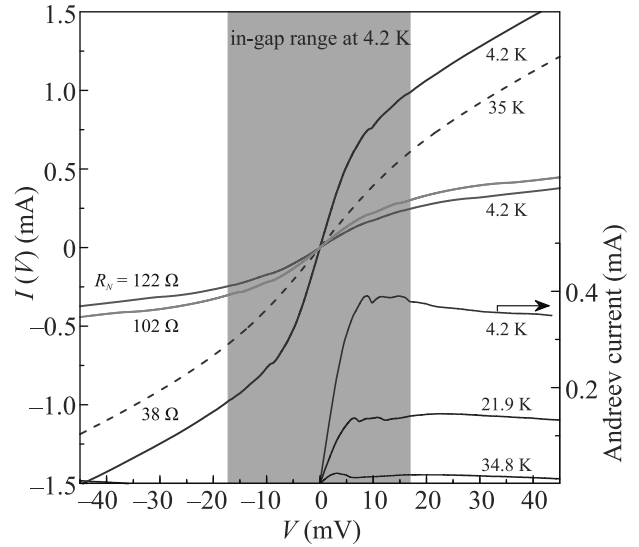


Рис. 2. (Цветной онлайн) ВАХ SnS-андреевских контактов с различными R_N , полученных в монокристаллах $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ при различных температурах. Внизу справа приведены зависимости избыточного андреевского тока $I_{\text{exc}}^A(V, T) \equiv I(V, T) - I(V, 35\text{ K})$ при различных $T < T_c^{\text{local}} \approx 35\text{ K}$, определенные как разность ВАХ в сверхпроводящем и нормальном состоянии (данные приведены для контакта, спектр которого показан синим цветом). Серым обозначена внутрищелевая область смещений при 4.2 K

сверхпроводника при температурах $0 < T < T_c$ и косвенно оценивать их возможную анизотропию в $k_x k_y$ -плоскости.

3. Экспериментальные данные и обсуждение. Типичные вольтамперные характеристики (ВАХ) планарных контактов на микротрещине, полученные нами в монокристаллах $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$, приведены на рис. 2. В сверхпроводящем состоянии на ВАХ воспроизводимо отсутствует сверхтоковая ветвь и гистерезис (все показанные на рис. 2 ВАХ записаны как при росте, так и при уменьшении тока), что исключает джозефсоновскую природу наблюдаемых особенностей. Для кривых синего цвета на рис. 2, по сравнению с ВАХ выше T_c (штриховая линия), в сверхпроводящем состоянии наблюдается избыточный андреевский ток $I_{\text{exc}}^A(V, T) \equiv I(V, T) - I(V, 35\text{ K})$ во всем диапазоне смещений, приведенный внизу рисунка (правая ось). Резко возрастающий при $eV \rightarrow 0$, $I_{\text{exc}}^A(V)$ стремится к постоянному значению при больших смещениях $eV > 2\Delta$ в соответствии со всеми теоретическими моделями, описывающими эффект некогерентных МАО в SnS-контакте высокой прозрачности [11–13]. Таким образом, особенности, хорошо заметные во внутрищелевой об-

ласти ВАХ (серая область на рис. 2), являются андреевской СГС от сверхпроводящих параметров порядка. Локальные критические температуры данных контактов на масштабах десятков нм (соответствующие температуре перехода контактной области в нормальное состояние) примерно одинаковы, были оценены по моменту исчезновения I_{exc} на ВАХ (см. вставку к рис. 2) и составляют $T_c^{\text{local}} \approx 35$ К.

Спектры динамической проводимости данных контактов, измеренные при $T \ll T_c$, приведены соответствующими цветами на рис. 3. Если идти от

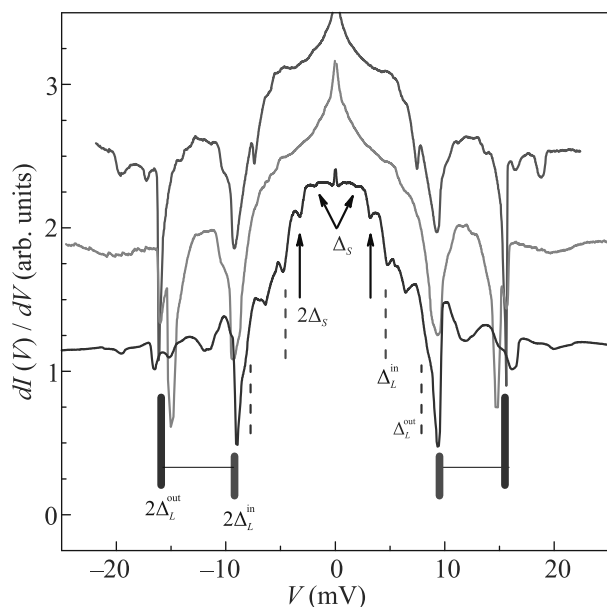


Рис. 3. (Цветной онлайн) Спектры динамической проводимости SnS-андреевских контактов, измеренные при 4.2 К (ВАХ данных контактов показаны соответствующими цветами на рис. 2). Нормальный монотонный ход подавлен для удобства рассмотрения. Вертикальными сплошными линиями показаны положения первых $n = 1$ и вторых $n = 2$ андреевских субгармоник от щелевых параметров Δ_L^{out} (синего цвета), Δ_L^{in} (фиолетового цвета) и Δ_S (черного цвета)

области больших смещений в сторону их уменьшения вдоль гладких, почти горизонтальных участков, то первая резкая особенность проводимости встречается примерно на 16 мВ. Следующая особенность с доминирующей (относительно тонкой структуры) амплитудой воспроизводимо видна на 9.6 мВ. Заметим, что значительная амплитуда особенностей (сравнимая по масштабу с нормальной проводимостью контакта) говорит о доминирующем вкладе соответствующей эффективной зоны в андреевскую проводимость. Интенсивные минимумы образуют дублет, положения которого $|V| \approx 9.6$ и 16 мВ,

согласно формуле (1), напрямую определяют два энергетических щелевых параметра $\Delta_L^{\text{in}} \approx 4.8$ мэВ и $\Delta_L^{\text{out}} \approx 8$ мэВ. Смысл введенных нами обозначений будет ясен из обсуждения их физической природы, проводимого ниже. Вторая субгармоника от Δ_L^{out} ($n = 2$), ожидаемая при $|V| \approx 8$ мВ, перекрывается с фундаментальным минимумом от Δ_L^{in} , из-за чего, по всей вероятности, плохо разрешима. Вместе с тем, хорошо заметна $n = 2$ особенность от Δ_L^{in} при смещениях $|V| \approx 4.7$ мВ. Вблизи нулевого смещения минимумы при 3.8 мВ могут быть интерпретированы как начало СГС от другого сверхпроводящего параметра порядка, имеющего меньшую амплитуду малой щели $\Delta_S \approx 1.9$ мэВ. На нижнем $dI(V)/dV$ -спектре также разрешена $n_S = 2$ субгармоника от Δ_S . Внещелевая тонкая структура $dI(V)/dV$ -спектра более низкой интенсивности требует отдельного исследования.

Несмотря на различные нормальные сопротивления $R_N \approx 38 - 122$ Ом и, соответственно, площадь полученных контактов, вид ВАХ и положение щелевых особенностей представленных $dI(V)/dV$ -спектров хорошо воспроизводятся. Следовательно, наблюдаемые особенности отражают объемные сверхпроводящие свойства $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ и не вызваны поверхностными эффектами или геометрическими резонансами.

Обнаруженные нами энергетические параметры Δ_L^{in} и Δ_L^{out} могут быть двумя отдельными изотропными сверхпроводящими щелями, открывающимися на различных участках поверхности Ферми. С другой стороны, они могут характеризовать единый, анизотропный сверхпроводящий конденсат с большой щелью: в этом случае Δ_L^{in} и Δ_L^{out} представляются экстремумами большой сверхпроводящей щели с расширенным s -волновым типом симметрии – минимальной и максимальной энергиями связи куперовских пар в k -пространстве соответственно. Тогда степень анизотропии Δ_L можно оценить как $A_L \approx 40\%$. В любом случае, можно уверенно утверждать об отсутствии точек нулей большой сверхпроводящей щели в xy -плоскости k -пространства.

Дублеты сходного вида на $dI(V)/dV$ -спектрах SnS-контактов воспроизводимо наблюдаются нами в монокристаллах родственных соединений структурного типа 122: $\text{Ba}(\text{Fe},\text{Ni})_2\text{As}_2$ с различной степенью замещения [18, 19]. Более того, определенная выше щелевая структура $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ в целом схожа с щелевой структурой $\text{Ba}(\text{Fe},\text{Ni})_2\text{As}_2$. Для сравнения данных, полученных в монокристаллах, критическая температура которых отличается почти в 2 раза, на рис. 4 приведены $dI(V)/dV$ -спектры, ось смещений

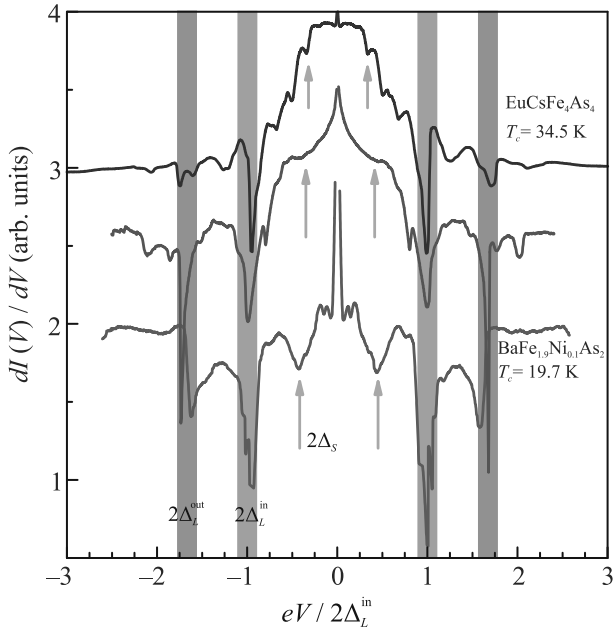


Рис. 4. (Цветной онлайн) $dI(V)/dV$ -спектры андреевских SnS-контактов, полученных нами в $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ (взяты с рис. 3) и оптимально допированном $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$ (нижняя кривая, данные взяты из работы [19]). Для каждого спектра ось смещений нормирована на собственную $2\Delta_L^{\text{in}}(0)$, нормальный монотонный ход подавлен для удобства рассмотрения

которых нормирована на положение щелевой особенности $eV = 2\Delta_L^{\text{in}}(0)$. Нижний спектр на рис. 4 получен в $\text{BaFe}_{1.9}\text{Ni}_{0.1}\text{As}_2$ оптимального состава с $T_c \approx 19.7$ К (взят из работы [19]). Положения минимумов дублета, форма арки и ее относительная ширина практически точно совпадают для обоих соединений (вертикальные линии на рис. 4). Учитывая схожесть формы дублета с численными расчетами (кривая 2 на рис. 4 в [9]), можно косвенно заключить реализацию анизотропного сверхпроводящего параметра порядка Δ_L в k -пространстве. Таким образом, определенные нами энергетические величины Δ_L^{in} и Δ_L^{out} предположительно характеризуют единый сверхпроводящий конденсат с большой щелью и являются ее “экстремумами” – минимальной и максимальной энергиями связи куперовских пар в соответствующих зонах. Величина предположительной анизотропии A_L до 40% при отсутствии нулей также схожа в пниктидах семейств Ва-122 и $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$.

Положения андреевских особенностей от Δ_S также хорошо согласуются, хотя на спектрах контактов в $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ (стрелки) смещены в сторону нуля (т.е. отношение Δ_L/Δ_S возрастает в $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$). Для малой сверхпроводящей щели четкие дублеты на $dI(V)/dV$ -спектрах нами воспроизводимо не наблю-

даются, что может быть следствием либо изотропности Δ_S , либо, наоборот, ее сильной анизотропии более 50% или даже наличие нулей в k -пространстве.

Характеристические отношения $r_i \equiv \equiv 2\Delta_i(0)/k_B T_c^{\text{local}}$ для экстремумов анизотропной большой сверхпроводящей щели в $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ составляют $r_L^{\text{out}} \approx 5.3$, $r_L^{\text{in}} \approx 3.2$. Для малой щели характеристическое отношение $r_S \approx 1.3 < 3.5$ типично для “слабого” конденсата в многощелевом сверхпроводнике. Все полученные значения близки, хотя чуть меньше соответствующих средних величин r_i , определенных нами ранее для $\text{Ba}(\text{Fe},\text{Ni})_2\text{As}_2$ оптимального и передопированного состава [18, 19]. Это может быть вызвано изменением отношения сил внутризонного и межзонного взаимодействия в $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ по сравнению с $\text{Ba}(\text{Fe},\text{Ni})_2\text{As}_2$. Таким образом, в первом приближении выполняется скейлинг амплитуд Δ_i с T_c в пниктидах семейств EuCs -1144 и Ва-122.

4. Заключение. Синтезированы монокристаллы $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ с объемной критической температурой $T_c \approx 36.8$ К. С помощью спектроскопии эффекта некогерентных многократных андреевских отражений в планарных SnS-контактах на микротрещине, полученных методикой МСРВJ, впервые исследована щелевая структура $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$. При $T \ll T_c$ напрямую определены величины малой сверхпроводящей щели 1.9 мэВ и экстремумов большой щели $\Delta_L^{\text{in}} \approx 4.8$ мэВ и $\Delta_L^{\text{out}} \approx 8$ мэВ (предположительно, имеющей $\approx 40\%$ анизотропию в k -пространстве без точек нулей), а также величины характеристических отношений $r_S \approx 1.3$, $r_L^{\text{in}} \approx 3.2$, $r_L^{\text{out}} \approx 5.3$, соответственно. Показано, что щелевая структура $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ близка к таковой для пниктидов $\text{Ba}(\text{Fe},\text{Ni})_2\text{As}_2$ родственного структурного семейства 122, т.е. нами наблюдается скейлинг всех трех энергетических щелевых параметров, Δ_L^{out} , Δ_L^{in} и Δ_S , с T_c в пниктидах семейств EuCs -1144 и Ва-122.

Работа выполнена в рамках проекта Российского научного фонда 22-22-00776.

Измерения частично проведены с использованием оборудования Центра коллективного пользования ФИАН.

1. K. Kawashima, T. Kinjo, T. Nishio, S. Ishida, H. Fujihisa, Y. Gotoh, K. Kihou, H. Eisaki, Y. Yoshida, and A. Iyo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 064710 (2016).
2. V. Vlasenko, K. Pervakov, and S. Gavrilkin, *Supercond. Sci. Technol.* **33**, 084009 (2020).
3. Y.-B. Liu, Y. Liu, and G.-H. Cao, *J. Phys.: Condens. Matter* **34**, 093001 (2022).
4. V. S. Stolyarov, K. S. Pervakov, A. S. Astrakhantseva, I. A. Golovchanskiy, D. V. Vyalikh, T. K. Kim,

4. S. V. Ereemeev, V. A. Vlasenko, V. M. Pudalov, A. A. Golubov, E. V. Chulkov, and D. Roditchev, *J. Phys. Chem. Lett.* **11**, 9393 (2020).
5. F. Lochner, F. Ahn, T. Hickel, and I. Eremin, *Phys. Rev. B* **96**, 094521 (2017).
6. P. J. Hirschfeld, *Compt. Rend. Phys.* **17**, 197 (2016).
7. T. Saito, S. Onari, and H. Kontani, *Phys. Rev. B* **88**, 045115 (2013).
8. J. Moreland and J. W. Ekin, *J. Appl. Phys.* **58**, 3888 (1985).
9. S. A. Kuzmichev and T. E. Kuzmicheva, *Low Temp. Phys.* **42**, 1008 (2016).
10. Z. Popović, S. A. Kuzmichev, and T. E. Kuzmicheva, *J. Appl. Phys.* **128**, 013901 (2020).
11. M. Octavio, M. Tinkham, G. E. Blonder, and T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. B* **27**, 6739 (1983).
12. R. Kümmel, U. Gunsenheimer, and R. Nicosky, *Phys. Rev. B* **42**, 3992 (1990).
13. U. Gunsenheimer and A. D. Zaikin, *Phys. Rev. B* **50**, 6317 (1994).
14. G. B. Arnold, *J. Low Temp. Phys.* **68**, 1 (1987).
15. D. Averin and A. Bardas, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1831 (1995).
16. T. P. Devereaux and P. Fulde, *Phys. Rev. B* **47**, 14638 (1993).
17. T. E. Kuzmicheva, S. A. Kuzmichev, K. S. Pervakov, V. M. Pudalov, and N. D. Zhigadlo, *Phys. Rev. B* **95**, 094507 (2017).
18. T. E. Kuzmicheva, S. A. Kuzmichev, K. S. Pervakov, and V. A. Vlasenko, *Phys. Rev. B* **104**, 174512 (2021).
19. T. E. Kuzmicheva, S. A. Kuzmichev, K. S. Pervakov, and V. A. Vlasenko, *JETP Lett.* **112**, 786 (2020).

Распределение заряда и волна спиновой плотности в подкрученном двухслойном графене при магическом угле подкрутки

А. О. Сбойчаков¹⁾, А. В. Рожков, А. Л. Рахманов

Институт теоретической и прикладной электродинамики РАН, 125412 Москва, Россия

Поступила в редакцию 12 октября 2022 г.

После переработки 12 октября 2022 г.

Принята к публикации 13 октября 2022 г.

Исследована волна спиновой плотности на фоне неоднородного распределения заряда как возможное основное состояние подкрученного двухслойного графена при магическом угле подкрутки. Если взаимодействие электронов не учитывается, то низкоэнергетический спектр материала состоит из четырех (или 8, если учитывать спин) почти плоских, почти вырожденных зон. Взаимодействие снимает вырождение, образуя параметр порядка, который обычно считают волной спиновой плотности с некой заранее выбранной спиновой конфигурацией. В данной работе мы самосогласованно рассчитываем спиновую конфигурацию параметра порядка, а также учитываем неоднородное распределение плотности заряда внутри сверхъячейки. Оказывается, что волна спиновой плотности устойчива в диапазоне допирования от -4 до $+4$ дополнительных электронов на сверхъячейку. Спиновая текстура меняется от коллинеарной при нулевом допировании до почти копланарной при конечном допировании. При допировании параметр порядка приобретает нематическую симметрию. Показано, что в энергетических единицах локальная спиновая намагниченность намного больше, чем вариация плотности заряда, если допирование не превышает трех дополнительных электронов или дырок на сверхъячейку.

DOI: 10.31857/S123456782220104, EDN: lyupfe

После открытия диэлектрических моттовских состояний [1, 2] и сверхпроводимости [2, 3] в подкрученном двухслойном графене (tBLG) этот материал интенсивно изучается. В tBLG один слой графена повернут относительно другого на угол θ . В результате в системе появляется сверхструктура при определенных соразмерных θ [4]. Низкоэнергетические электронные свойства существенно зависят от θ . При так называемом первом магическом угле $\theta_c \cong 1^\circ$ энергетический спектр вблизи уровня Ферми состоит из четырех (восьми, если включен спин) почти плоских зон. Наличие плоских зон делает систему очень восприимчивой к межэлектронным взаимодействиям. Взаимодействия приводят к спонтанному нарушению определенных симметрий. Природа несверхпроводящих многочастичных состояний в tBLG еще окончательно не выяснена. Были предложены различные типы основных состояний tBLG [5–15]. Волна спиновой плотности (ВСП) входит в их число [7, 8, 10, 11].

В наших предыдущих работах [10, 11] мы предположили, что планарная ВСП является основным состоянием системы в диапазоне допирования $-4 < x < 4$ электронов на сверхъячейку. Этот выбор не

был произвольным. Известно, что в tBLG при малом угле подкрутки электроны на уровне Ферми расположены в областях с AA упаковкой [4, 16]. Основное состояние двухслойного AA графена должно быть антиферромагнитным [17, 18]. Наше моделирование качественно хорошо воспроизвело экспериментально наблюдаемую зависимость проводимости tBLG от допирования. Мы также показали [11], что допирование системы приводит к образованию нематического состояния, которое наблюдается в STM экспериментах [19–22].

В данной работе мы расширяем разнообразие возможных параметров порядка, рассматривая некопланарную ВСП на фоне неоднородного распределения заряда. Спиновая текстура меняется с коллинеарной на почти копланарную при допировании. Показано, что симметрия ВСП уменьшается при допировании. Это приводит к образованию нематического состояния. В то же время на симметрию распределения плотности заряда допирование практически не влияет. Нематическое состояние может проявляться в несимметричном пространственном распределении локальной плотности состояний, которое наблюдалось экспериментально [19–22]. Оказывается, что в энергетических единицах локальная намагниченность намного сильнее, чем вариация

¹⁾e-mail: sboycha@mail.ru

ция плотности заряда, если допирование не превышает трех дополнительных электронов или дырок на сверхъячейку.

Модельный гамильтониан. Сверхструктура в tBLG возникает, когда θ удовлетворяет условию

$$\cos \theta = (3m_0^2 + 3m_0r + r^2/2)/(3m_0^2 + 3m_0r + r^2), \quad (1)$$

где m_0 и r положительные взаимно простые числа [4]. Ячейка сверхрешетки имеет форму правильного ромба. Когда $r = 1$, эта ячейка совпадает с ячейкой муара. В нашем исследовании мы рассматриваем только такие сверхструктуры. Когда угол подкрутки мал, сверхъячейку можно рассматривать как состоящую из областей со AA, AB и BA упаковками [4, 23].

Мы используем следующий гамильтониан:

$$H = \sum_{\substack{nmij \\ \alpha\beta\sigma}} t(\mathbf{r}_n^{i\alpha}; \mathbf{r}_m^{j\beta}) d_{n\alpha\sigma}^\dagger d_{m\beta\sigma} + U \sum_{n\alpha\sigma} n_{n\alpha\uparrow} n_{n\alpha\downarrow} + \frac{1}{2} \sum'_{\substack{nmij \\ \alpha\beta\sigma\sigma'}} V(\mathbf{r}_n^{i\alpha} - \mathbf{r}_m^{j\beta}) n_{n\alpha\sigma} n_{m\beta\sigma'}. \quad (2)$$

Здесь $d_{n\alpha\sigma}^\dagger$ ($d_{n\alpha\sigma}$) – операторы рождения (уничтожения) электрона со спином σ ($=\uparrow, \downarrow$) в элементарной ячейке \mathbf{n} в слое i ($= 1, 2$) в подрешетке α ($= \mathcal{A}, \mathcal{B}$), а $n_{n\alpha\sigma} = d_{n\alpha\sigma}^\dagger d_{n\alpha\sigma}$. Первый член в (2) является одночастичным гамильтонианом сильной связи, где $t(\mathbf{r}_n^{i\alpha}; \mathbf{r}_m^{j\beta})$ – амплитуды перескока электрона с узла в позиции $\mathbf{r}_m^{j\beta}$ на узел $\mathbf{r}_n^{i\alpha}$. Второй член в уравнении (2) описывает локальное (хаббардовское) взаимодействие электронов, в то время как последний член соответствует межузловому кулоновскому взаимодействию (члены с $\mathbf{r}_n^{i\alpha} = \mathbf{r}_m^{j\beta}$ следует исключить).

Внутри слоев мы учитываем только перескоки между ближайшими соседями с амплитудой $t = -2.57$ эВ. Межслоевые перескоки описываются формулой Слатера–Костера для p_z электронов

$$t(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \frac{[|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \mathbf{e}_z]^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} V_\sigma(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (3)$$

где \mathbf{e}_z – единичный вектор, перпендикулярный слоям,

$$V_\sigma(\mathbf{r}) = t_0 e^{-(|\mathbf{r}| - d)/r_0} F_c(|\mathbf{r}|), \quad F_c(r) = \frac{1}{1 + e^{(r - r_c)/l_c}}. \quad (4)$$

Функция $F_c(r)$ вводится, чтобы занулить перескоки на расстояниях больше r_c . Мы берем $r_c = 4.92$ Å, $l_c = 0.2$ Å. Параметр t_0 определяет наибольшую амплитуду межслоевых перескоков. Мы выбрали $t_0 = 0.37$ эВ (это значение использовалось для описания двухслойного AB графена [4]). Параметр r_0 описывает, как быстро амплитуды перескоков затухают внутри области $r < r_c$. Мы положили $r_0 = 0.34$ Å.

При первом магическом угле $\theta = \theta_c$ низкоэнергетическая зонная структура состоит из четырех почти плоских, почти вырожденных зон, отделенных энергетическими щелями от более низких и более высоких дисперсионных зон. Ширина плоских зон W имеет минимум при $\theta = \theta_c$. Для параметров модели, используемых в работе, мы численно определяем, что $W = 1.8$ мэВ, щели между плоскими и дисперсионными зонами составляют приблизительно 2.5 мэВ, а $\theta_c = 1.08^\circ$ (что близко к экспериментальному значению и соответствует структуре с $m_0 = 30$ и $r = 1$).

Волны спиновой и зарядовой плотности. Если в системе есть плоские зоны, пересекающие уровень Ферми, то взаимодействия становятся важными. Они нарушают симметрию одночастичного гамильтониана, приводя к возникновению параметра порядка. Рассмотрим сначала ВСП. Введем одноузельные параметры порядка

$$\Delta_{n\alpha} = U \langle d_{n\alpha\uparrow}^\dagger d_{n\alpha\downarrow} \rangle, \quad \Delta_{n\alpha}^z = U \left[\langle d_{n\alpha\uparrow}^\dagger d_{n\alpha\uparrow} \rangle - \langle d_{n\alpha\downarrow}^\dagger d_{n\alpha\downarrow} \rangle \right] / 2. \quad (5)$$

Величина $\Delta_{n\alpha}$ комплексна, а $\Delta_{n\alpha}^z$ действительна. Эти величины описывают намагниченность на узлах

$$\mathbf{S}_{n\alpha} = [\text{Re}(\Delta_{n\alpha}), \text{Im}(\Delta_{n\alpha}), \Delta_{n\alpha}^z] / U. \quad (6)$$

Параметры $\Delta_{n\alpha}$ и $\Delta_{n\alpha}^z$ контролируются хаббардовским взаимодействием. Мы положили $U = 2t$. Это значение несколько меньше критической величины $U_c = 2.23t$, соответствующей переходу однослойного графена в антиферромагнитное состояние в приближении среднего поля [24]. В этом случае хаббардовское взаимодействие не мало, но оно недостаточно, чтобы открыть щель в однослойном графене.

В графене каждый атом в подрешетке имеет трех ближайших соседей, принадлежащих другой подрешетке. По этой причине мы рассматриваем три типа параметров порядка, связывающих электроны, локализованные на ближайших соседях в каждом слое, $A_{n\alpha}^{(\ell)}$ и $A_{n\alpha}^{z(\ell)}$ ($\ell = 1, 2, 3$), где величина ℓ соответствует трем различным связям, соединяющим ближайших соседей. Эти параметры порядка определяются следующим образом

$$A_{n\alpha}^{(\ell)} = V_{nn} \langle d_{\mathbf{n} + \mathbf{n}_\ell i \mathcal{A} \sigma}^\dagger d_{n\alpha} \rangle, \quad (7) \quad A_{n\alpha}^{z(\ell)} = \frac{V_{nn}}{2} \left(\langle d_{\mathbf{n} + \mathbf{n}_\ell i \mathcal{A} \uparrow}^\dagger d_{n\alpha} \rangle - \langle d_{\mathbf{n} + \mathbf{n}_\ell i \mathcal{A} \downarrow}^\dagger d_{n\alpha} \rangle \right),$$

где $\mathbf{n}_1 = (0, 0)$, $\mathbf{n}_2 = (1, 0)$, $\mathbf{n}_3 = (0, 1)$, $\bar{\sigma} = -\sigma$, а $V_{nn} = V(|\delta|)$ – энергия взаимодействия электронов на ближайших атомах внутри слоя (δ – вектор, соединяющий атомы на подрешетках \mathcal{A} и \mathcal{B} в элементарной

ячейке). Мы выбрали $V_{\text{nn}}/U = 0.59$, в согласии с [25]. Параметры порядка (7) определяют спины на связях между ближайшими соседями внутри слоя

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{\mathbf{n}i}^{(\ell)} &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} \langle d_{\mathbf{n}+\mathbf{n}_\ell i A\sigma}^\dagger d_{\mathbf{n}i B\sigma'} \rangle + \text{c.c.} = \quad (8) \\ &= \frac{1}{V_{\text{nn}}} \left(\frac{1}{2} \text{Re}[A_{\mathbf{n}i\uparrow}^{(\ell)} + A_{\mathbf{n}i\downarrow}^{(\ell)}], \frac{1}{2} \text{Im}[A_{\mathbf{n}i\uparrow}^{(\ell)} - A_{\mathbf{n}i\downarrow}^{(\ell)}], A_{\mathbf{n}i}^{z(\ell)} \right), \end{aligned}$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ – матрицы Паули. В отличие от работы [11], спинам $\mathbf{S}_{\mathbf{n}i\alpha}$ и $\mathbf{S}_{\mathbf{n}i}^{(\ell)}$ разрешено иметь z компоненты. В работе [11] рассматривались параметры порядка, связывающие электроны в разных слоях. Расчеты показали, однако, что эти компоненты на порядок меньше, чем $A_{\mathbf{n}i\sigma}^{(\ell)}$ (которые меньше, чем $\Delta_{\mathbf{n}i\alpha}$). В настоящей работе мы пренебрегаем такими параметрами порядка.

Помимо ВСП, в данной работе учтены вклады типа волны зарядовой плотности. Мы принимаем во внимание, что заряды неравномерно распределены внутри сверхъядчейки, и вводим величину

$$\Delta_{\mathbf{n}i\alpha}^c = \frac{U}{2} \left[\sum_{\sigma} \langle d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}^\dagger d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma} \rangle - 1 \right], \quad (9)$$

которую можно рассматривать как одноузельный потенциал, описывающий неоднородное распределение заряда. Этот параметр конечен даже при отсутствии какого-либо нарушения симметрии, поскольку узлы внутри сверхъядчейки не идентичны. Поэтому, он не может рассматриваться как параметр порядка. Потенциал $\Delta_{\mathbf{n}i\alpha}^c$ нормирован так, что

$$\frac{2}{UN_{sc}} \sum_{\mathbf{n}i\alpha} \Delta_{\mathbf{n}i\alpha}^c = x, \quad (10)$$

где N_{sc} – число сверхъядчеек в системе, а x – число дополнительных электронов или дырок, приходящихся на одну сверхъядчейку. Помимо $\Delta_{\mathbf{n}i\alpha}^c$, мы вводим также потенциалы вида

$$A_{\mathbf{n}i}^{c(\ell)} = \frac{V_{\text{nn}}}{2} \sum_{\sigma} \langle d_{\mathbf{n}+\mathbf{n}_\ell i A\sigma}^\dagger d_{\mathbf{n}i B\sigma} \rangle. \quad (11)$$

Мы полагаем, что все введенные распределения заряда и спина имеют периодичность сверхструктуры.

Итерационная процедура. Для вычисления параметров порядка и потенциалов мы используем метод среднего поля. Он основан на расцеплении членов четвертого порядка в уравнении (2):

$$\begin{aligned} n_{\mathbf{n}i\alpha\sigma} n_{\mathbf{m}j\beta\sigma'} &\rightarrow n_{\mathbf{n}i\alpha\sigma} \langle n_{\mathbf{m}j\beta\sigma'} \rangle + n_{\mathbf{m}j\beta\sigma'} \langle n_{\mathbf{n}i\alpha\sigma} \rangle - \\ &- \langle n_{\mathbf{n}i\alpha\sigma} \rangle \langle n_{\mathbf{m}j\beta\sigma'} \rangle - d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}^\dagger d_{\mathbf{m}j\beta\sigma'} \langle d_{\mathbf{m}j\beta\sigma'}^\dagger d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma} \rangle - \\ &- d_{\mathbf{m}j\beta\sigma'}^\dagger d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma} \langle d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}^\dagger d_{\mathbf{m}j\beta\sigma'} \rangle + \\ &+ \langle d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}^\dagger d_{\mathbf{m}j\beta\sigma'} \rangle \langle d_{\mathbf{m}j\beta\sigma'}^\dagger d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma} \rangle. \quad (12) \end{aligned}$$

В результате мы получаем гамильтониан среднего поля H^{MF} . Численный алгоритм нахождения параметров порядка и потенциалов аналогичен используемому в работе [11]. Сначала мы запишем электронные операторы в импульсном представлении [26]

$$d_{\mathbf{p}\mathbf{G}i\alpha\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\mathbf{n}} \exp[-i(\mathbf{p} + \mathbf{G})\mathbf{r}_{\mathbf{n}}^i] d_{\mathbf{n}i\alpha\sigma}, \quad (13)$$

где \mathcal{N} – количество элементарных ячеек графена в одном слое образца, $\mathbf{r}_{\mathbf{n}}^i$ – положение \mathbf{n} -й элементарной ячейки i -го слоя, импульс \mathbf{p} лежит в первой зоне Бриллюэна сверхрешетки, а \mathbf{G} – обратные векторы сверхрешетки, лежащие в первой зоне Бриллюэна. Количество векторов \mathbf{G} равно $N_{sc} = \mathcal{N}/N_{sc}$ для каждого слоя графена.

Гамильтониан среднего поля $\hat{H}_{\mathbf{p}}$ представляет собой матрицу $N_R \times N_R$, где $N_R = 8N_{sc}$ (коэффициент 8 обусловлен индексами спина, слоя и подрешетки). Ранг этой матрицы слишком велик, чтобы выполнить численное интегрирование по квазиимпульсу \mathbf{p} за реалистичное время. Действительно, для магического угла $\theta_c = 1.08^\circ$, имеем $N_R = 22328$. По этой причине мы используем упрощения. Основной вклад в параметры порядка вносят низкоэнергетические состояния. Следовательно, вклады от других состояний можно учитывать приближенно. В пределе несвязанных ($t_0 = 0$) слоев графена и нулевых параметров порядка матрица $\hat{H}_{\mathbf{p}}$ является блочно-диагональной с 2×2 матрицами на ее диагонали

$$-t \begin{pmatrix} 0 & f_{\mathbf{p}+\mathbf{G}}^i \\ f_{\mathbf{p}+\mathbf{G}}^{i*} & 0 \end{pmatrix}, \quad (14)$$

где $f_{\mathbf{p}}^i = 1 + e^{-i\mathbf{p}\mathbf{a}_1^i} + e^{-i\mathbf{p}\mathbf{a}_2^i}$, $\mathbf{a}_{1,2}^i$ – векторы решетки i -го слоя. Собственные значения такой матрицы равны $\pm t|f_{\mathbf{p}+\mathbf{G}}^i|$. Амплитуды межслоевых перескоков и параметры порядка намного меньше, чем t . Поэтому, интересуясь поведением на низких энергиях, мы можем использовать усеченную матрицу $\hat{H}'_{\mathbf{p}}$, исключая строки и столбцы в $\hat{H}_{\mathbf{p}}$, содержащие элементы с $t|f_{\mathbf{G}+\mathbf{p}}^i| > E_R$, где E_R – энергия обрезания. Ранг усеченной матрицы равен $N'_R < N_R$. Собственные энергии $E_{\mathbf{p}}^{(S)}$ из $\hat{H}'_{\mathbf{p}}$, которые лежат близко к $\pm E_R$, вычисляются со значительными ошибками. Чтобы устранить эту проблему, мы учитываем только зоны с $|E_0^{(S)}| < E_0$, где $E_0 < E_R$. Количество таких зон равно $N_0 < N'_R$. Мы используем $E_0 = 0.2t$, $E_R = 0.4t$ ($N_0 = 480$, $N'_R = 720$). Расчеты с меньшими и большими E_R и E_0 показывают, что результаты почти не зависят от этих величин.

Вклад в полную энергию от отброшенных состояний $E_{\mathbf{p}}^{(S)} < -E_0$ должен учитываться отдельно. По-

сколькx E_0 намного больше параметров порядка, это можно сделать пертурбативно. Ведущие поправки к полной энергии квадратичны по параметрам порядка $\Delta_{\mathbf{n}\alpha}$, $\Delta_{\mathbf{n}\alpha}^z$, $A_{\mathbf{n}\sigma}^{(\ell)}$ и $A_{\mathbf{n}i}^{z(\ell)}$. Мы предполагаем, что коэффициенты пропорциональности одинаковы для всех этих параметров порядка и равны

$$-\frac{1}{V_c(E_0)} = -\frac{1}{2} \int_{E_0}^{3t} dE \frac{\rho_0(E)}{E}, \quad (15)$$

где $\rho_0(E)$ – плотность состояний в графене. Такая поправка может быть учтена путем следующей замены в гамильтониане среднего поля:

$$H^{\text{MF}} \rightarrow H'^{\text{MF}} - \sum_{\mathbf{n}\alpha} \frac{|\Delta_{\mathbf{n}\alpha}|^2}{V_c(E_0)} - \sum_{\mathbf{n}\alpha} \frac{|\Delta_{\mathbf{n}\alpha}^z|^2}{V_c(E_0)} - \sum_{\mathbf{n}i\sigma} \frac{|A_{\mathbf{n}\sigma}^{(\ell)}|^2}{V_c(E_0)} - \sum_{\mathbf{n}i\ell\sigma} \frac{|A_{\mathbf{n}i}^{z(\ell)}|^2}{V_c(E_0)}, \quad (16)$$

где H'^{MF} – гамильтониан в усеченном базисе. Вклады в Δ^c и $A^{c(\ell)}$ от зон с $E_{\mathbf{p}}^{(S)} < -E_0$ почти не зависят от взаимодействий и упорядочения. В пределе несвязанных слоев и нулевых параметров порядка вклад в $\Delta_{\mathbf{n}\alpha}^c$ от каждой исключенной зоны равен $U/(4N_{sc})$. В результате мы получаем условие самосогласования

$$\frac{2}{U} \Delta_{\mathbf{n}\alpha}^c = \frac{1}{N_{sc}} \sum'_S \sum_{\mathbf{G}\mathbf{G}'\sigma} \int \frac{d^2\mathbf{p}}{v_{RBZ}} \Phi_{\mathbf{p}\mathbf{G}i\alpha\sigma}^{(S)*} \Phi_{\mathbf{p}\mathbf{G}'i\alpha\sigma}^{(S)} \times e^{-i(\mathbf{G}-\mathbf{G}')\cdot\mathbf{r}_n^i} \Theta(\mu - E_{\mathbf{p}}^{(S)}) - N_0/8N_{sc}, \quad (17)$$

где $\Phi_{\mathbf{p}\mathbf{G}i\alpha\sigma}^{(S)}$ – собственные функции $\hat{H}'_{\mathbf{p}}$, $\Theta(x)$ – функция Хевисайда, v_{RBZ} – площадь зоны Бриллюэна сверхъячейки, а μ – химический потенциал. Суммирование в уравнении (17) выполняется по N_0 зонам и усеченному базису, а уравнение для μ имеет вид

$$\sum'_S \int \frac{d^2\mathbf{p}}{v_{RBZ}} \Theta(\mu - E_{\mathbf{p}}^{(S)}) - \frac{N_0}{2} = x. \quad (18)$$

Вклад в $A_{\mathbf{n}i}^{c(\ell)}$ от исключенных зон отличен от нуля (можно проверить, что он отличен от нуля и для однослойного графена). В пределе несвязанных слоев этот вклад не зависит от \mathbf{n} и i . Таким образом, можно записать $A_{\mathbf{n}i}^{c(\ell)} = \bar{A} + \delta A_{\mathbf{n}i}^{c(\ell)}$, где \bar{A} может быть оценено как

$$\bar{A} = \frac{V_{nn}}{2} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{v_{BZ}} e^{-i\varphi_{\mathbf{k}}^i} \Theta(t|f_{\mathbf{k}}^i| - E_0), \quad (19)$$

где $\varphi_{\mathbf{k}}^i = \arg(f_{\mathbf{k}}^i)$, а \bar{A} не зависит от i . Для выбранных параметров модели, имеем $\bar{A}/V_{nn} = 0.26$. Параметр \bar{A} перенормирует амплитуду перескока между ближайшими соседями t . Мы предполагаем, что

эта перенормировка уже поглощена значением $t = -2.57$ эВ и, следовательно, может быть проигнорирована. Что касается $\delta A_{\mathbf{n}i}^{c(\ell)}$, мы добавляем квадратичный член к эффективному гамильтониану, аналогично тому как это сделано в уравнении (16).

Чтобы вычислить параметры порядка и потенциалы, мы минимизируем полную энергию \mathcal{E} методом последовательных приближений. На каждой итерации мы вычисляем $E_{\mathbf{p}}^{(S)}$ и $\Phi_{\mathbf{p}\mathbf{G}i\alpha\sigma}^{(S)}$ матрицы $\hat{H}'_{\mathbf{p}}$ и градиенты $\partial\mathcal{E}/\partial\lambda = \langle \partial\mathcal{H}^{\text{MF}}/\partial\lambda \rangle$, где $\lambda = \Delta_{\mathbf{n}\alpha}$, $\Delta_{\mathbf{n}\alpha}^z$, $A_{\mathbf{n}\sigma}^{(\ell)}$, $A_{\mathbf{n}i}^{z(\ell)}$ или $\delta A_{\mathbf{n}i}^{c(\ell)}$. Эти градиенты используются для вычисления новых значений вышеупомянутых величин. Новое значение $\Delta_{\mathbf{n}\alpha}^c$ находится с помощью уравнения (17) с μ из уравнения (18).

Результаты. Численный расчет показал, что ВСП существует при любом уровне допинга $|x| \leq 4$. Однако пространственные распределения намагниченности качественно различны для разных x . Начнем с $x = 0$. Рисунки 1a–d изображают пространственные распределения $\mathcal{D}_{\mathbf{n}\alpha} = U|\mathbf{S}_{\mathbf{n}\alpha}|$ и $A_{\mathbf{n}i}^{(\ell)} = V_{nn}|\mathbf{S}_{\mathbf{n}i}^{(\ell)}|$ внутри сверхъячейки для $i = 1$. Эти величины описывают абсолютные значения спина на узлах и спина на связях, соответственно. Параметры порядка отличны от нуля только в области AA. При нулевом допировании пространственные распределения параметров порядка довольно симметричны. Область ненулевого $\mathcal{D}_{\mathbf{n}\alpha}$ имеет вид “закругленного” шестиугольника. Этот шестиугольник инвариантен при вращении на 60° вокруг центра области AA $\mathbf{R}_0 = (\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2)/3$, где $\mathbf{R}_{1,2}$ – векторы сверхрешетки. Рисунки 1b–d показывают, что спиновая намагниченность на связях отлична от нуля в областях, имеющих форму гантели. Вращение на 180° , а также поворот на 120° вокруг \mathbf{R}_0 сохраняют $A_{\mathbf{n}i}^{(\ell)}$.

Когда $x = 0$ все спины, $\mathbf{S}_{\mathbf{n}\alpha}$ и $\mathbf{S}_{\mathbf{n}i}^{(\ell)}$, коллинеарны. Для слоя 1 все локальные спины $\mathbf{S}_{\mathbf{n}1A}$ подрешетки A направлены вдоль оси x , в то время как в подрешетке B они имеют противоположное направление. То же самое верно и для слоя 2. Следовательно, имеется коллинеарное АФМ упорядочение. Спины на связях $\mathbf{S}_{\mathbf{n}i}^{(\ell)}$ также образуют своего рода АФМ структуру: в одной части гантели $\mathbf{S}_{\mathbf{n}i}^{(\ell)}$ направлены вдоль оси x , в то время как в другой части гантели они имеют противоположное направление.

Распределения параметров порядка изменяются с допированием. На рисунке 1e–h показано пространственное распределение $\mathcal{D}_{\mathbf{n}\alpha}$ и $A_{\mathbf{n}i}^{(\ell)}$ при допировании $x = -2$. Видно, что теперь никакой гексагональной симметрии не существует. Профиль $\mathcal{D}_{\mathbf{n}\alpha}$ растянут в определенном направлении, и симметрия при вращении на 120° для $A_{\mathbf{n}i}^{(\ell)}$ исчезает. Однако все эти пара-

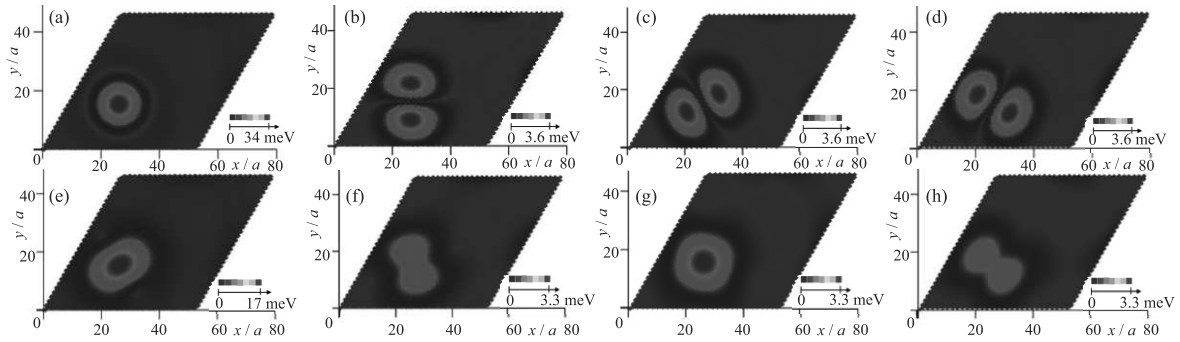


Рис. 1. (Цветной онлайн) Пространственные распределения параметров порядка $\mathcal{D}_{n1\alpha}$ ((a), (e)) и $\mathcal{A}_{n1}^{(\ell)}$ ((b)–(d) и (f)–(h)) (определение см. в тексте), вычисленные при $x = 0$ ((a)–(d)) и $x = -2$ ((e)–(h)). Допирование уменьшает симметрию параметров порядка с C_6 до C_2

метры порядка симметричны при вращении на 180° . В допированных системах спиновые текстуры больше не являются коллинеарными. Спины на узле оказываются копланарными. Мы считаем, что это не артефакт, поскольку численная процедура учитывала некопланарные текстуры. Спины на узле $\mathbf{S}_{ni\alpha}$ лежат в плоскости xz (см. рис. 2), они образуют спиральную АФМ структуру. Спины на связях, $\mathbf{S}_{ni}^{(\ell)}$, обра-

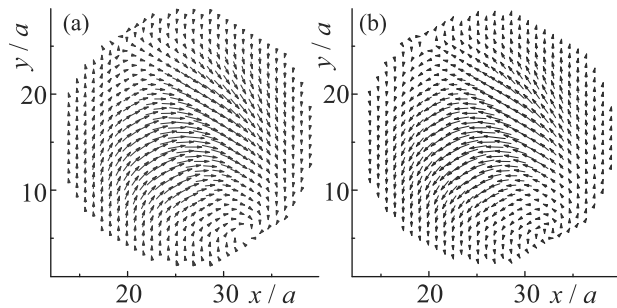


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спины на узле $\mathbf{S}_{ni\alpha}$ в подрешетке \mathcal{A} (a) и \mathcal{B} (b) при $x = -2$. Спины лежат в плоскости xz . Для наглядности спины повернуты из плоскости xz в плоскость xy . Показана только AA область сверхъядчейки

зуют некопланарные структуры. Однако почти все эти спины лежат в плоскости xz , и лишь небольшая часть из них имеет y компоненты. Рисунки 3a–с показывают направления спинов $\mathbf{S}_{ni}^{(\ell)}$, спроецированных на плоскость xy , в то время как рис. 3d–f показывают направления спинов, спроецированных на плоскость xz (с последующим вращением в плоскость xy). Мы видим, что почти все спины лежат в плоскости xz . Спины, нарушающие копланарность, лежат вдоль трех линий, проходящих через центр области AA. Эти линии видны на рис. 3a–с.

На рисунке 4 показаны пространственные распределения потенциала $\Delta_{ni\alpha}^c$, рассчитанные при ну-

левом допировании (панели (a)–(d)) и при $x = -2$ (панели (e)–(h)). Распределения показаны для каждого слоя и подрешетки отдельно. При $x = 0$ наблюдается избыток электронов в области AA и недостаток электронов в AB (углы сверхъядчейки) и BA (область с центром в $\mathbf{R}_{BA} = 2(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2)/3$) областях сверхъядчейки. При $x = -2$ область, где наблюдается избыток электронов, расширяется; дополнительные электроны также появляются в AB (для Δ_{n1B}^c и Δ_{n2A}^c) и BA (для Δ_{n1A}^c и Δ_{n2B}^c) областях. При нулевом допировании распределения зарядов остаются инвариантными при вращении на 120° вокруг точки \mathbf{R}_0 . Потенциалы Δ_{niA}^c и Δ_{niB}^c преобразуются друг в друга при вращении на 60° вокруг точки \mathbf{R}_0 . То же самое верно и при $x = -2$. Таким образом, нематичность не проявляется через распределение заряда.

На рисунке 5 показаны пространственные распределения потенциалов $\delta A_{n1}^{c(\ell)}$, рассчитанные при $x = 0$ и $x = -2$. Профили $\delta A_{n1}^{c(\ell)}$ примерно одинаковы для $x = 0$ и -2 , и только абсолютные значения $\delta A_{n1}^{c(\ell)}$ меняются. Пространственные распределения приблизительно симметричны при вращении на 180° вокруг \mathbf{R}_0 . Потенциалы $\delta A_{n1}^{c(\ell)}$ преобразуются друг в друга и при вращении на 120° вокруг точки \mathbf{R}_0 .

Таким образом, допирование уменьшает симметрию ВСП с C_6 , которая является симметрией решетки, до C_2 , указывая на появление нематического состояния [11]. Симметрия же связанных с зарядом величин практически не зависит от допирования. Параметры Δ^c и $A^{c(\ell)}$ представляют собой интегрированные величины, на которые влияют вклады высокоэнергетических состояний, нечувствительных к нарушению низкоэнергетической симметрии. В то же время электронное нематическое состояние может проявляться как уменьшение симметрии локальной плотности состояний, что может быть обна-

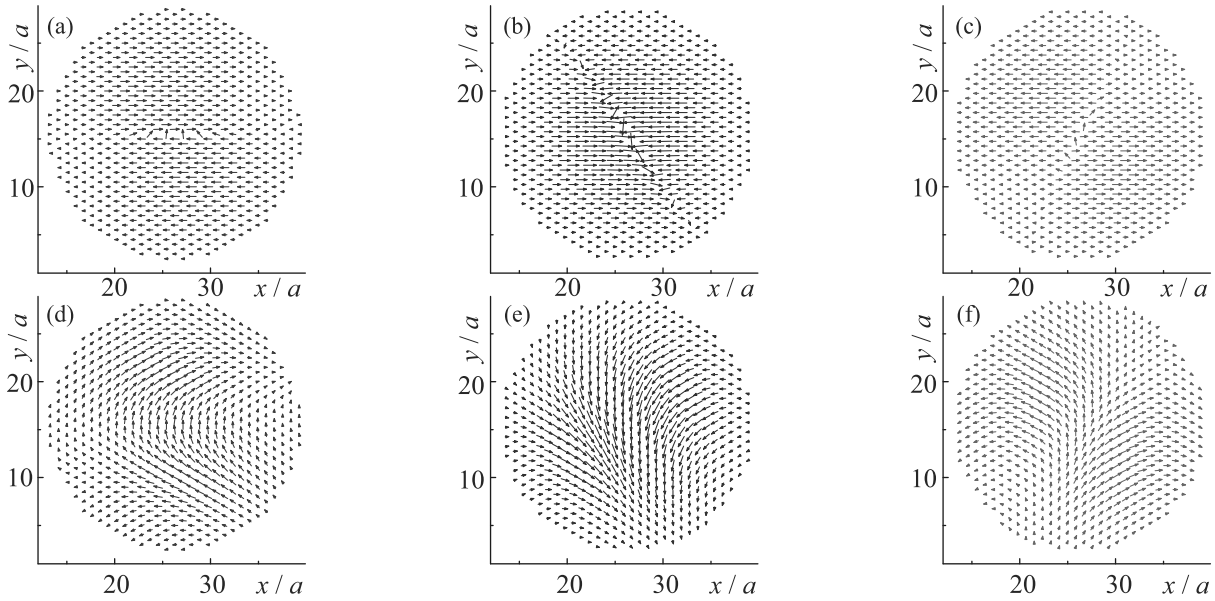


Рис. 3. (Цветной онлайн) Спины на связях, $\mathbf{S}_{n1}^{(\ell)}$, рассчитанные при $x = -2$. Панели (a)–(c) показывают xy проекции спинов при различных значениях $\ell = 1, 2, 3$, в то время как панели (d)–(f) показывают xz проекции спинов (после поворота в плоскость xy). Показана только AA область сверхъячейки

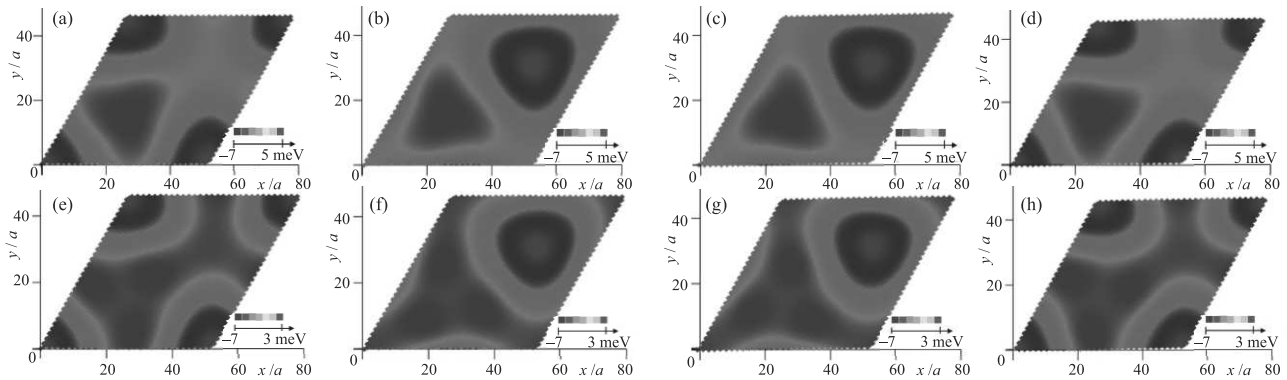


Рис. 4. (Цветной онлайн) Пространственные распределения одноузельных потенциалов Δ_{n1A}^c ((a), (e)), Δ_{n1B}^c ((b), (f)), Δ_{n2A}^c ((c), (g)) и Δ_{n2B}^c ((d), (h)), вычисленные при $x = 0$ ((a)–(d)) и при $x = -2$ ((e)–(h))

ружено в эксперименте STM. На рисунке 6 показано пространственное распределение локальной плотности состояний, рассчитанное вблизи половинного заполнения. Пространственный профиль растягивается, указывая на появление нематического состояния. Такая особенность наблюдалась в экспериментах [19–22].

Наконец, сравним значения вариаций плотности спина и заряда. При нулевом допировании максимальное значение параметра $\mathcal{D}_{ni\alpha}$ равно примерно 34 мэВ. В то же время изменение плотности заряда на узлах $\Delta_{ni\alpha}^c$ примерно в 6 раз меньше. Параметры порядка уменьшаются до нуля, когда допинг изменяется с $x = 0$ на $x = \pm 4$. В то же время значения Δ^c не

сильно меняются с x . Однако даже при $x = \pm 2$ максимальное значение $\mathcal{D}_{ni\alpha}$ примерно в 3 раза больше, чем значение $|\Delta_{ni\alpha}^c|$, и только при $|x| \approx 3$ параметр $\mathcal{D}_{ni\alpha}$ становится сопоставимым с $|\Delta_{ni\alpha}^c|$.

Закключение. Методом среднего поля численно исследованы ВСП и распределение заряда в tBLG с магическим углом подкрутки в диапазоне допирования $x = \pm 4$ дополнительных электронов на сверхъячейку. Одноэлектронный спектр имеет 8 (с учетом спина) почти плоских, почти вырожденных зон. Электрон-электронное взаимодействие нарушает симметрию одночастичного состояния, образуя набор параметров порядка. Мы самосогласованно вычислили распределение заряда в сверхъячейке и

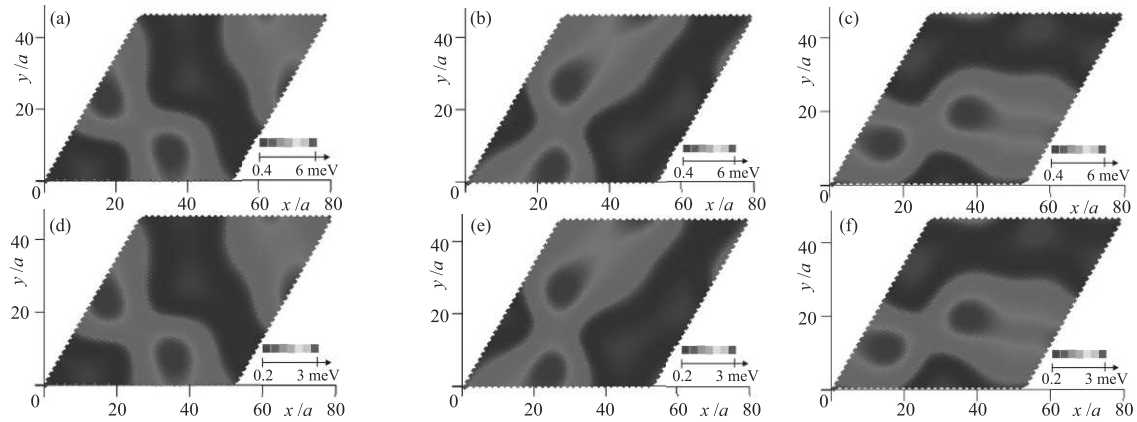


Рис. 5. (Цветной онлайн) Пространственные распределения потенциалов на связях $\delta A_{n1}^{c(\ell)}$ для трех различных ℓ , рассчитанные при $x=0$ ((a)–(c)) и при $x=-2$ ((d)–(f))

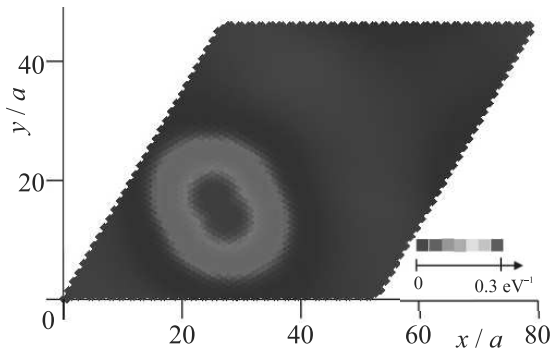


Рис. 6. (Цветной онлайн) Локальная плотность состояний, рассчитанная вблизи половинного заполнения ($x = -1, 75$). Пространственный профиль растянут, указывая на появление электронного нематического состояния

спиновую структуру ВСП. Обнаружено, что ВСП стабильна во всем диапазоне допирования. Спиновая структура зависит от x , изменяясь от коллинеарной при $x = 0$ до почти копланарной при конечном допировании. Основное состояние допированной системы обладает нематической симметрией.

Мы благодарны Межведомственному суперкомпьютерному центру Российской академии наук (МСЦ РАН) за предоставленные вычислительные ресурсы. Анализ данных и аналитические расчеты были профинансированы Российским научным фондом (проект РНФ # 22-22-00464 [https://rscf.ru/en/project/22-22-00464 /](https://rscf.ru/en/project/22-22-00464/)).

1. Y. Cao, V. Fatemi, A. Demir, S. Fang, S. L. Tomarken, J. Y. Luo, J. D. Sanchez-Yamagishi, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, *Nature* **556**, 80 (2018).

2. X. Lu, P. Stepanov, W. Yang, M. Xie, M. A. Aamir, I. Das, C. Urgell, K. Watanabe, T. Taniguchi, G. Zhang, A. Bachtold, A. H. MacDonald, and D. K. Efetov, *Nature* **574**, 653 (2019).
3. Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, *Nature* **556**, 43 (2018).
4. A. Rozhkov, A. Sboychakov, A. Rakhmanov, and F. Nori, *Phys. Rep.* **648**, 1 (2016).
5. B. Padhi, C. Setty, and P. W. Phillips, *Nano Lett.* **18**, 6175 (2018).
6. M. Ochi, M. Koshino, and K. Kuroki, *Phys. Rev. B* **98**, 081102 (2018).
7. C.-C. Liu, L.-D. Zhang, W.-Q. Chen, and F. Yang, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 217001 (2018).
8. T. Huang, L. Zhang, and T. Ma, *Sci. Bull.* **64**, 310 (2019).
9. K. Seo, V. N. Kotov, and B. Uchoa, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 246402 (2019).
10. A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, *Phys. Rev. B* **100**, 045111 (2019).
11. A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, *Phys. Rev. B* **102**, 155142 (2020).
12. S. Zhang, X. Lu, and J. Liu, *Phys. Rev. Lett.* **128**, 247402 (2022).
13. G. Wagner, Y. H. Kwan, N. Bultinck, S. H. Simon, and S. A. Parameswaran, *Phys. Rev. Lett.* **128**, 156401 (2022).
14. A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, K. I. Kugel, and A. L. Rakhmanov, *JETP Lett.* **112**, 651 (2020).
15. I. Mandal, J. Yao, and E. J. Mueller, *Phys. Rev. B* **103**, 125127 (2021).
16. J. M. B. Lopes dos Santos, N. M. R. Peres, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. B* **86**, 155449 (2012).
17. A. L. Rakhmanov, A. V. Rozhkov, A. O. Sboychakov, and F. Nori, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 206801 (2012).

18. A. O. Sboychakov, A. V. Rozhkov, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, *Phys. Rev. B* **88**, 045409 (2013).
19. Y. Choi, J. Kemmer, Y. Peng, A. Thomson, H. Arora, R. Polski, Y. Zhang, H. Ren, J. Alicea, G. Refael, F. von Oppen, K. Watanabe, T. Taniguchi, and S. Nadj-Perge, *Nat. Phys.* **15**, 1174 (2019).
20. A. Kerelsky, L. J. McGilly, D. M. Kennes, L. Xian, M. Yankowitz, S. Chen, K. Watanabe, T. Taniguchi, J. Hone, C. Dean, A. Rubio, and A. N. Pasupathy, *Nature* **572**, 95 (2019).
21. Y. Xie, B. Lian, B. Jäck, X. Liu, C.-L. Chiu, K. Watanabe, T. Taniguchi, B. A. Bernevig, and A. Yazdani, *Nature* **572**, 101 (2019).
22. D. Wong, K. P. Nuckolls, M. Ohet, B. Lian, Y. Xie, S. Jeon, K. Watanabe, T. Taniguchi, B. A. Bernevig, and A. Yazdani, *Nature* **582**, 198 (2020).
23. G. Trambly de Laissardière, D. Mayou, and L. Magaud, *Nano Lett.* **10**, 804 (2010).
24. S. Sorella and E. Tosatti, *Europhysics Letters* **19**, 699 (1992).
25. T. O. Wehling, E. Şaşıoğlu, C. Friedrich, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, and S. Blügel, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 236805 (2011).
26. S. Shallcross, S. Sharma, and O. Pankratov, *Phys. Rev. B* **87**, 245403 (2013).

Механические свойства алмазоподобных муаровых пленок

А. А. Артюх⁺¹⁾, Л. А. Чернозатонский^{+*}

⁺Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля РАН, 119334 Москва, Россия

^{*}Школа химии и технологии полимерных материалов,
Российский экономический университет им. Г. В. Плеханова, 117997 Москва, Россия

Поступила в редакцию 6 октября 2022 г.

После переработки 11 октября 2022 г.

Принята к публикации 14 октября 2022 г.

Методами молекулярно-механического моделирования изучены механические свойства алмазоподобных пленок – муаровых диаманов Dn21.8, Dn27.8, Dn29.4, сформированных при гидрировании свернутых графеновых слоев под углом вблизи 30° и обычного Dn на основе биграфена в АВ-упаковке. Рассчитаны их упругие модули. Показано, что для муаровых диаманов упругие константы заметно отличаются от подобных констант диамана Dn, а их разрыв наступает при больших деформациях, чем для последнего. Отклики на приложение сил в плоскости пленок оказались анизотропными для структур Dn21.8, Dn27.8, а для Dn29.4 практически изотропными. Показано, что прорыв при действии острия для Dn29.4 мембраны наступает при больших значениях силы, чем для мембраны из самого энергетически устойчивого диамана Dn27.8.

DOI: 10.31857/S123456782220116, EDN: lzcoij

В последнее время появилось много работ, посвященных изучению свойств свернутых (*twisted*) графенов, слои которых повернуты относительно друг друга на угол Θ [1, 2]. Причем графеновые листы могут быть наложены друг на друга под заданным углом с точностью в 0.1° [3]. Такая возможность открыла для исследователей целое направление получения и изучения уникальных свойств свернутых молекулярно связанных слоев различного атомного состава, которое получило название *твистроника* [4].

С другой стороны, успехи в разработке методов получения ковалентно связанных нескольких *несвернутых* слоев графена путем функционализации их поверхности легкими атомами или молекулами привело к исследованиям свойств и возможных применений таких алмазоподобных пленок [5–7], названных в пионерской работе [8] *диаманами*, где на основе *ab initio* расчетов были описаны структуры и основные характеристики этих новых 2D материалов. Такие диаманы недавно были получены при гидрировании [9] и фторировании биграфенов [10]. Механизм возможного синтеза диаманов подробно описан в работе [11].

Возможности создать различные соразмерные муаровые сверхрешетки из двух монослоев, образующихся при определенных углах их свертки [12], привели к мысли получить 2D муаровый материал, в котором некоторые области бислоя связываются ко-

валентно (при трансформации их углеродных атомов из sp^2 в sp^3 гибридизацию) [2]. Было показано, что такие структуры обладают механическими свойствами, отличными от диамана (Dn) из *несвернутых* слоев биграфена. Однако не были исследованы механические свойства предсказанных недавно Dn Θ диаманов, образованных при функционализации поверхности биграфенов, свернутых под близкими к 30° углами [12, 13]. Описанные в этих работах структуры показали отличные от обычных диаманов электронные свойства – широкую запрещенную зону ($E_g > 3\text{эВ}$) и резонансный электронный спектр, что может быть востребовано в наноэлектронике и оптоэлектронике. Нам было интересно определить их упругие и прочностные свойства, важные для создания на их основе новых элементов опто- и электромеханических наноструктур, а также сравнить их с механическими свойствами свернутых биграфенов с диамантными областями [14].

Методика расчета. Все расчеты, представленные в данной работе, выполнены в рамках пакета GULP [15] с помощью молекулярно механического и молекулярно динамического моделирования. Межатомное взаимодействие задавалось с помощью потенциалов Бреннера и Леннарда–Джонса. Оптимизация структур производилась методом сопряженных градиентов.

Параметры и упругие характеристики структур. Рассматриваются четыре структуры биграфенов с адсорбированными атомами водорода:

¹⁾e-mail: Anastasiia2000@mail.ru

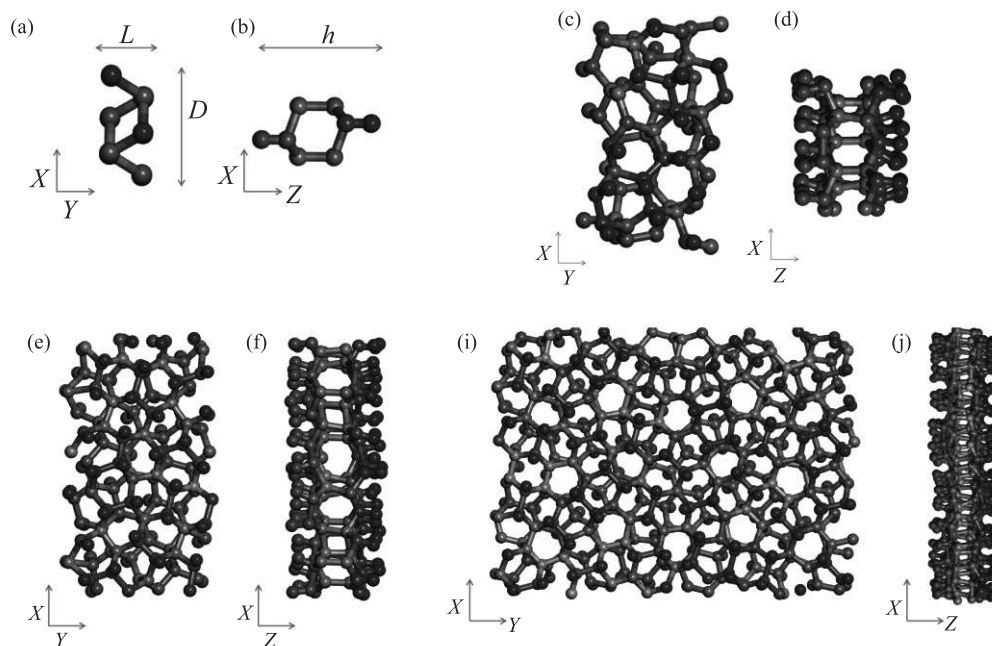


Рис. 1. (Цветной онлайн) Вид сверху и сбоку для расчетных ячеек (РЯ) структур: алмазана Dn (a), (b), муаровых алмазанов Dn21.8 (c), (d), Dn27.8 (e), (f) и Dn29.4 (i), (j); L и D – длина и ширина РЯ, а h – ее высота

три алмазана Dn21.8, Dn27.8 и Dn29.4, а также для сравнения “обычный” Dn алмазан на основе биграфена АВ (Бернала) укладки [8].

Для рассмотренных структур была рассчитана энергия образования E_F по формуле:

$$E_F = \frac{E - E_C \cdot N_C - E_H \cdot N_H}{N_{\text{atom}}},$$

где E – общая энергия системы, E_C и E_H – энергия атома углерода в листе графена или водорода соответственно, N – общее количество атомов, N_H , N_C – количество атомов водорода и углерода соответственно в каждой расчетной ячейке (РЯ).

Затем были рассчитаны по известным формулам: эффективные модули Юнга и коэффициенты Пуассона μ в рамках упругого поведения структур при малых деформациях:

$$Y = \frac{F \cdot L}{S \cdot \Delta L}, \quad F = 2 \frac{\partial E}{\partial L}, \quad \mu = -\frac{\Delta D}{D} \cdot \frac{L}{\Delta L},$$

где F – сила, действующая на структуру вдоль длины L каждой из сторон выбранной прямоугольной РЯ и площади ее поперечного сечения $S = D \cdot (h + d)$, где $d = 3.35 \text{ \AA}$ – стандартное межслоевое расстояние в графите; D и h – ее ширина и толщина (рис. 1), ΔL и ΔD – изменения длины структуры вдоль и поперек направления приложенной силы соответственно.

Для этого были выбраны (как обычно в подобных расчетах [14]) расширенные элементарные ячейки алмазанов. Расчетные ячейки показаны на рис. 1.

Результаты расчетов структур с параметрами представлены в табл. 1.

Самым энергетически выгодным из всех оказался алмазан Dn, что совпадает с результатами работы [12]. Поскольку значение модуля Y для различных направлений исследованных структур отличалось на малую величину $\pm 2\%$, то в табл. 1 приведен только эффективный модуль Юнга для смещений вдоль направления X . Он для обычного алмазана Dn оказался сравним со значением Y , полученным для объемного алмаза [16], а для муаровых алмазанов – меньшим. Это связано с тем, что на единицу площади для Dn алмазана оказывается больше межслоевых C-C' связей, чем в муаровых алмазанах, где в ЭЯ напряжены часть ненаправленных по нормали к пленке связей между C- и C' атомами соседних слоев и “перекрестными” C-C и C'-C'-атомами [12, 13]. Это означает, что для небольших деформаций, когда еще выполняется закон Гука, требуется прикладывать меньшую силу F в плоскости пленки – первоначально несколько гофрированные поверхности муарового алмазана распрямляются из-за наличия таких C-C' связей. При этом в алмазанах Dn27.8 число “перекрестных” H-C-H комплексов на единицу площади больше, а модуль Y меньше, чем в структуре Dn21.8. В высоко симметричной структуре алмазана Dn связи C-H, C'-H' и C-C' (между слоями), а также C-C и C'-C' связи остаются равномерно распределенными в плоскости пленки практически так же, как в алмазе при воз-

Таблица 1. Параметры и упругие характеристики структур

Структура	Энергия образования E_F , эВ	Модуль Юнга Y , ТПа	Коэффициент Пуассона μ	Длина L расчетной ячейки, Å	Ширина D расчетной ячейки, Å
Алмаз (эксперимент) [17]		1.1	0.15		
Dn	-0.11	1.1	0.06	2.53	4.37
Dn21.8	0.06	0.8	0.19	6.73	11.58
Dn27.8	0.06	0.7	0.20	8.96	15.49
Dn29.4	0.09	0.6	0.15	18.10	24.74

действию сил вдоль подобных плоскостей. Коэффициент Пуассона для муарового диамана с существующими С-С' связями, в отличие от алмаза и Dn, направленными не по нормали, сравним со значением параметра μ для алмаза, поскольку изменения ΔL и ΔD происходят практически на одну и ту же величину. Но для обычного диамана, где в верхнем и нижнем слое С-атомы связаны с Н-атомами слабее, чем с "удерживающими" структуру углеродными атомами в примыкающих друг к другу слоях алмаза, величина μ почти в 2.5 раза меньше, чем для алмаза (см. табл. 1). Это, как будет показано ниже, приводит к большему прогибу диска диамана Dn, чем для такого же по диаметру муарового Dn Θ диска при одной и той же силе, приложенной к нему нормально через острие.

Далее проведено моделирование изменения энергии рассмотренных структур при растяжении вдоль осей X и Y вплоть до их разрыва. Чтобы его увидеть на размерах больших, чем размер РЯ, как и в ранее рассмотренных случаях [15, 18], выбирались прямоугольные ($a \times b$) ячейки: Dn – 4.0×5.2 нм (16×12 РЯ); Dn27.8 – 4.6×5.3 нм (3×6 РЯ); Dn29.4 – 4.9×5.4 нм (2×3 РЯ). Такой размер ячеек выбран для того, чтобы при моделировании разрывов пленок исключить влияние граничных эффектов, которые обычно возникают при расчете с малыми размерами РЯ. При растяжении использовался метод, описанный в работе [19].

Изменение деформаций при приложении силы в различных направлениях муаровых диаманов, как и для Dn структуры [18], происходит не одинаково – наблюдается его сильная анизотропия. Это наглядно видно из рассмотрения изменений углов и длин связей для Dn, Dn21.8, Dn27.8 и Dn29.4 при их растяжении.

Изначально в Dn структуре все углы равны величине $109^\circ 85'$, а длины всех С-С связей 1.54 \AA , что соответствует тетраэдрическому расположению атомов углерода. При растяжении $\varepsilon = 0.10$ ($\varepsilon_X = \delta_a/a$, $\varepsilon_Y = \delta_b/b$) в структуре обычного диамана, формиру-

емого при полном гидрировании АВ биграфена, значения четырех углов значительно уменьшаются до $107^\circ 40'$, делая структуру заметно несимметричной. Муаровые диаманы изначально имеют менее симметричные атомные структуры с отличными друг от друга С-С-С углами и С-С связями и несколько вспученными участками в РЯ (см. рис. 1). По мере растяжения эти участки делаются более плоскими относительно изначальной формы. Если в обычном диамане Dn по мере растяжения происходит удлинение всех С-С связей, то в структурах Dn27.8 и Dn29.4 при $\varepsilon = 0.15$ не все связи значительно удлиняются – рис. 2.

В случае приложения напряжения к диаману Dn27.8 (на участке РЯ) вдоль X разрыв наступает при деформации $\varepsilon_x = 0.34$, в другом направлении Y – при $\varepsilon_Y = 0.3$ – рис. 3 (внизу представлены первые шаги разрыва).

В случае растяжения диамана Dn21.8 разрывы начинаются при деформациях $\varepsilon_x = 0.31$ и $\varepsilon_y = 0.33$. При деформациях $\varepsilon_x = 0.35$ и $\varepsilon_y = 0.4$ наблюдается уже значительное разрушение структуры. При $\varepsilon_x = 0.36$ и $\varepsilon_y = 0.37$ наблюдается четкая граница разрыва и фактически полное разрушение листа, когда между двумя частями листа остаются отдельные С-С связи.

В процессе растягивания диаманов Dn21.8 и Dn27.8 сначала формируются дефекты в виде топологических пентагон/гептагон углеродных дефектов, а потом при разрыве отдельных связей между ними образуются "наноотверстия" (см., например, фрагменты на рис. 4). По мере растяжения при $\varepsilon > 0.3$, формируется все больше и больше многоугольников вблизи первых дефектов, которые выстраиваются в длинную цепочку, а затем при $\varepsilon > 0.35$ происходит разъединение разорванных областей с цепочками атомов между ними.

На рисунке 5 для сравнения приведены соответствующие зависимости для обычного диамана Dn. Для него величины критического напряжения в момент появления разрыва ($\varepsilon_x = 0.21$ и $\varepsilon_y = 0.23$), на-

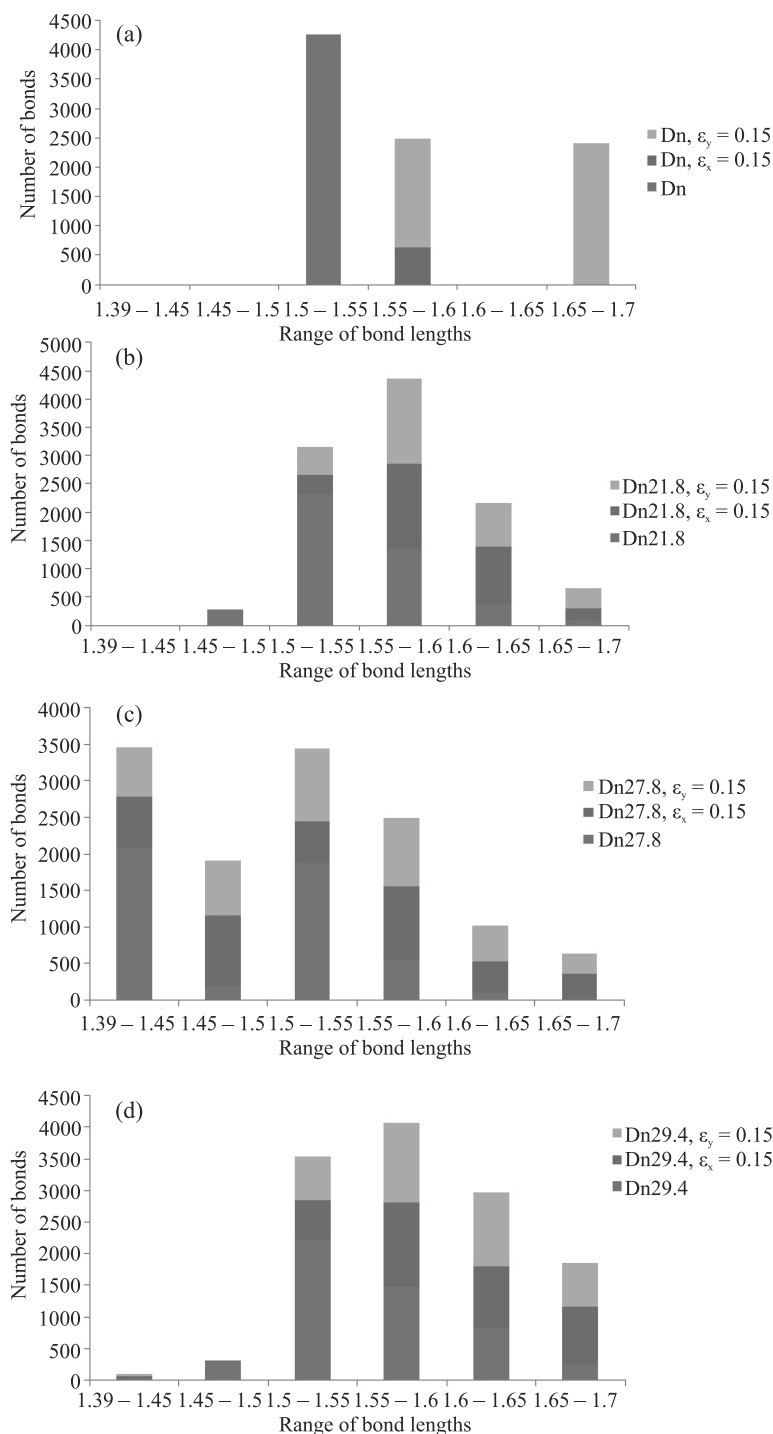


Рис. 2. (Цветной онлайн) Гистограммы длин связей в Dn21.8, Dn27.8 и Dn29.4 при деформации $\epsilon = 0$, $\epsilon_x = 0.15$ и $\epsilon_y = 0.15$

ходятся в хорошем соответствии с результатами работы [18].

Модуль Юнга и прочность на разрыв для алмаза Dn также зависит от направления приложения силы в плоскости пленки: для разных направлений модуль Юнга и кривые напряжение/деформация от-

клоняются друг от друга примерно на 10%, как показано в работе [18]. И в нашем случае при растяжении Dn структуры (см. рис. 1а) вдоль X-координаты, близкой к направлению “кресло”, а разрыв начинается раньше для этого направления приложения сил, чем в “зигзаг” Y-направлении.

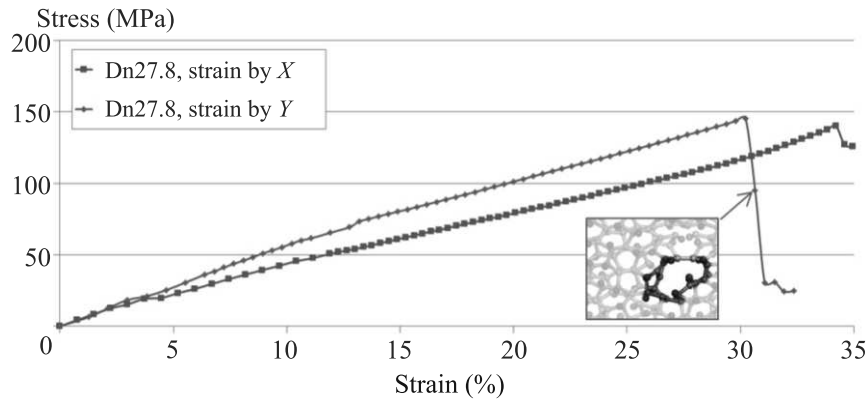


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость изменения напряжения структуры Dn27.8 от величины деформации вдоль осей X и Y

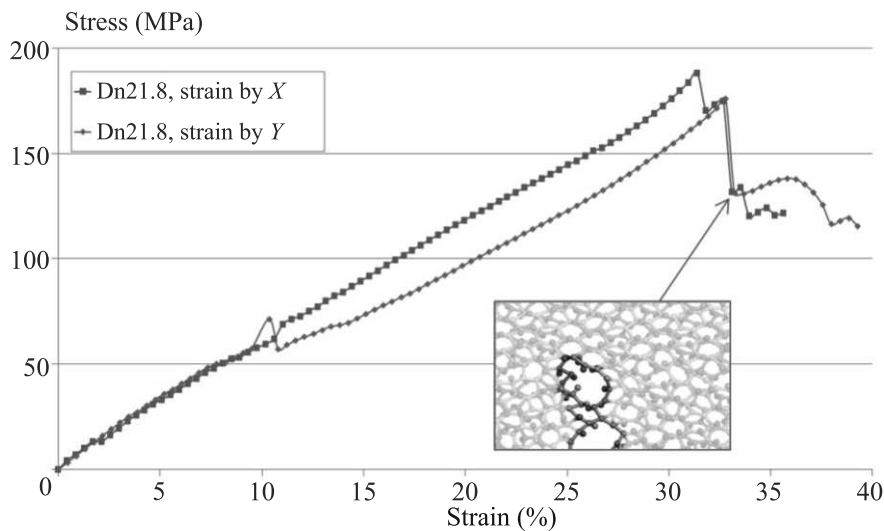


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость изменения напряжения структуры Dn21.8 от величины деформации вдоль осей X и Y ; на вставке – кусок РЯ с изображением начала разрыва при приложении силы вдоль направления X (синим обозначены атомы верхнего слоя, бежевым – нижнего слоя)

Отличительная особенность диаманта Dn29.4 заключается в том, что моменты начала трансформаций его решетки (при ε_x и $\varepsilon_y \approx 0.24$) и величины критических деформаций разрыва вдоль X и Y направлений (ε_x , $\varepsilon_y \approx 0.4$) по нашим расчетам, подобным рис. 3–5, практически совпадают. Дело в том, что в структуре Dn29.4, где угол разворота листов относительно друг друга составляет практически 30° , и верхний слой содержит “кресло” цепочки C-атомов почти в том же направлении, что и “зигзаг” цепочки в нижнем слое (см. рис. 6 b, c). Поэтому растяжение вдоль X координаты РЯ приводит к такой же ее деформации, как при действии силы вдоль оси Y , поскольку ее воздействие на пленку Dn29.4 как бы “усредняется” однонаправленным присутствием в структуре обоих типов взаимодействующих C-атомных цепочек.

Таким образом, расчет показывает, что при растяжении в плоскости муаровых диамантов Dn21.8, Dn27.8 и Dn29.4 их разрывы наступают при больших деформациях, чем в Dn структуре. Это прямо связано с ранее описанным пояснением разности их механических характеристик.

Разрыв мембраны при воздействии щупа. Поведение мембран из диамантов под воздействием щупа были проведены сначала в первой работе 2009 г. [8], а затем недавно более подробно исследованы на мембране частично гидрированного биграфена с углом свертки 7.34° [14] и квазикристалла диаманта [20]. Здесь мы провели моделирование разрыва круглых мембран Dn27.8 и Dn29.4 диаметром 7 нм при надавливании острием нанощупа на их центр при фиксированных краях (по методике работы [8]). Расчет проводился до того момента, когда острие прорывало

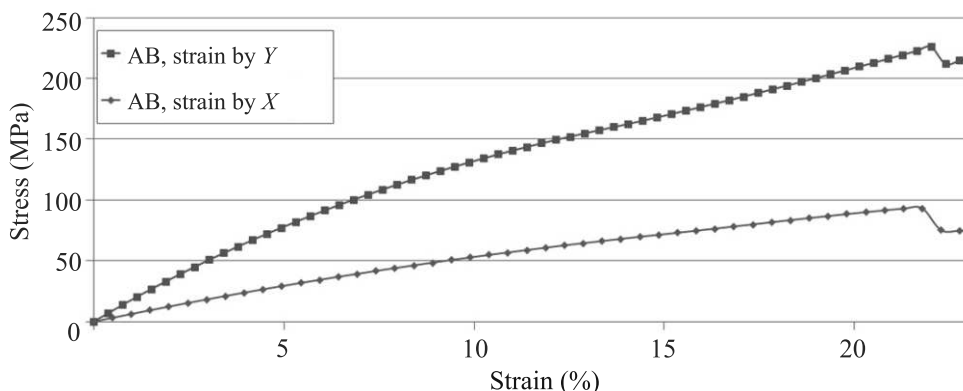


Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость изменения напряжения структуры Dn от величины деформации вдоль осей X и Y

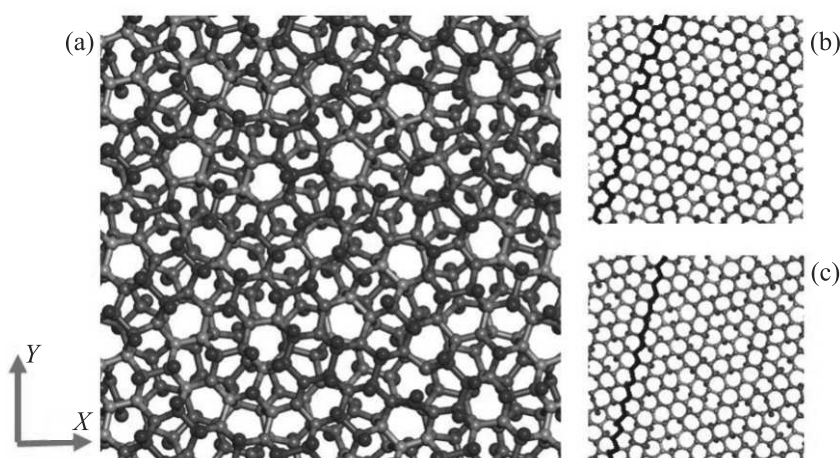


Рис. 6. (Цветной онлайн) Виды сверху диамана Dn29.4: фрагмент структуры РЯ (a), его верхний слой (b) и нижний слой (c), в них жирные ломаные линии – однонаправленные зигзаг и “кресло” цепочки C-атомов

мембрану (рис. 7). Динамика прогиба этих мембран отличается от описанных ранее [8, 20]: при продавливании Dn27.8 мембрана прогибается почти равномерно от середины и до края, тогда как для мембраны из диамана Dn29.4 наблюдается прогиб, более локализованный в центре, по-видимому, за счет более жестких неоднородно направленных связей между углеродными атомами [12, 20].

Мембраны диаманов Dn27.8 и Dn29.4 прогибаются без разрушений вплоть до критических глубин $\delta_c = 11 \text{ \AA}$ и 9.4 \AA , соответственно. При этом величина приложенной к мембране Dn29.4 “критической” силы $F_c = 265 \text{ nN}$ оказывается на 4% выше, чем для мембраны Dn27.8. Это говорит о большей жесткости Dn29.4 диамана – аппроксиманта квазикристалла, который оказался более жестким [20] по сравнению с несвернутым диаманом Dn.

Таким образом, в работе было обнаружено, что 2D муаровые структуры Dn21.8, Dn27.8 и Dn29.4 обладают отличными от несвернутого диамана Dn

упругими свойствами, их разрыв происходит при больших продольных растяжениях, а также для прорыва таких муаровых мембран острием необходимо приложить к нему большую силу, что говорит об их более высокой жесткости. Отметим, что в рассмотренных 2D алмазоподобных пленках с муаровой атомной сверхрешеткой должны при механических воздействиях наблюдаться и специфические опто- и электромеханические эффекты [21]. Поскольку в муаровых бислойных структурах можно изменять резонансные пики плотности электронных состояний приложением внешних механических напряжений [22], то будет интересно это использовать в нелинейной оптике для управления генерацией высших гармоник и смещения волн высокого порядка (см., например, [23]). Такие предполагаемые эффекты потребуют отдельного изучения.

Проведенные исследования позволяют полагать, что муаровые диаманы с подобной алмазоподобной структурой смогут удовлетворить необходимым

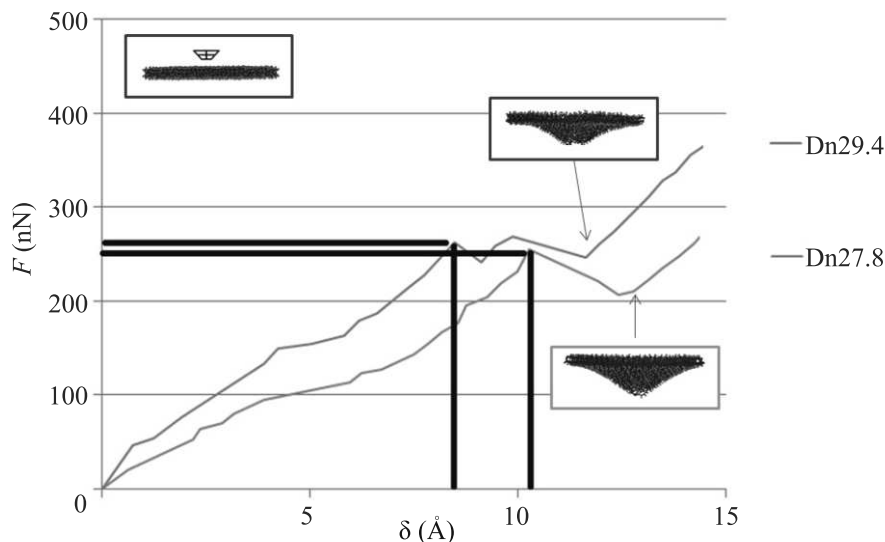


Рис. 7. (Цветной онлайн) Прогиб Dn27.8 и Dn29.4 мембран диаметром 7 нм глубиной δ в их центре под воздействием силы F на наноиндентор. На вставках – вид сбоку на мембраны: сверху – схема начального положения наноципа, ниже – результаты прорыва мембран Dn29.4 и Dn27.8

требованиям для создания разнообразных слоистых наносистем с уникальными механическими свойствами, что делает их перспективными материалами.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках научного проекта # 22-22-01006.

Расчеты выполнены с использованием Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН (МСЦ РАН). Авторы благодарны В. А. Демину за плодотворные обсуждения и замечания.

1. Y. Cao, V. Fatemi, A. Demir, S. Fang, S. L. Tomarken, J. Y. Luo, J. D. Sanchez-Yamagishi, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, R. C. Ashoori, and P. Jarillo-Herrero, *Nature* **556**, 80 (2018).
2. A. R. Muniz and D. Maroudas, *Phys. Rev. B* **86**, 075404 (2012).
3. S. J. Ahn, P. Moon, T.-H. Kim, H.-W. Kim, H.-C. Shin, E. H. Kim, H. W. Cha, S.-J. Kahng, P. Kim, M. Koshino, Y.-W. Son, C.-W. Yang, and J. R. Ahn, *Science* **361**, 782 (2018).
4. Z. Hennighausen and S. Kar, *Electronic Structure* **3**, 014004 (2021).
5. L. Zhu, W. Li and F. Ding, *Nanoscale* **11**, 4248 (2019).
6. D. Qiu, Q. Wang, S. Cheng, and N. Gao, *Results in Physics* **13**, 102240-6 (2019).

7. S. Gupta, J.-H. Yang, and B. I. Yakobson, *Nano Lett.* **19**, 408 (2019).
8. L. A. Chernozatonskii, P. B. Sorokin, A. G. Kvashnin, and D. G. Kvashnin, *JETP Lett.* **90**, 134 (2009).
9. F. Piazza, M. Monthieux, P. Puech, I. Gerber, R. Wiens, G. Paredes, and C. Ozoria, *Carbon* **145**, 10 (2019).
10. P. V. Bakharev, M. Huang, M. Saxena, S. W. Lee, S. H. Joo, S. O. Park, J. Dong, D. C. Camacho-Mojica, S. Jin, Y. Kwon, M. Biswal, F. Ding, S. K. Kwak, Z. Lee, and R. S. Ruoff, *Nat. Nanotechnol* **15**, 59 (2020).
11. Л. А. Чернозатонский, В. А. Демин, *Письма в ЖЭТФ* **115**(3), 184 (2022).
12. L. A. Chernozatonskii, V. A. Demin, and D. G. Kvashnin, *Journal of Carbon Research C* **7**, 17 (2021).
13. L. A. Chernozatonskii, K. P. Katin, V. A. Demin, and M. M. Maslov, *Appl. Surf. Sci.* **537**, 148011 (2021).
14. M. Chen, A. Weerasinghe, A. R. Muniz, A. Ramasubramaniam, and D. Maroudas, *ACS Appl. Nano Mater.* **4**(8), 8611 (2022).
15. J. D. Gale and A. L. Rohl, *Mol. Simul* **29**, 291 (2003).
16. K. A. Klein and G. F. Cardinale, *Proc. SPIE* **1759**, Diamond Optics V, 178 (1992).
17. A. R. Muniz, A. S. Machado, and D. Maroudas, *Carbon* **81**, 663 (2015).
18. Y.-C. Wu, J.-L. Shao, Z. Zheng, and H. Zhan, *J. Phys. Chem. C* **125**, 915 (2021).
19. Y.-X. Du, L.-J. Zhou, and J.-G. Guo, preprint, <https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-748572/v1>.

20. L. A. Chernozatonskii, V. A. Demin, and D. G. Kvashnin, *Appl. Surf. Sci.* **572**, 151362 (2022).
21. В. А. Грешняков, Е. А. Беленков, *ЖЭТФ* **160**, 884 (2021).
22. L. A. Chernozatonskii, A. A. Artyukh, A. G. Kvashnin, and D. G. Kvashnin, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12**, 55189 (2020).
23. Б. Р. Авчян, А. Г. Казарян, К. А. Саргсян, Х. В. Седракян, *Письма в ЖЭТФ* **116**, 426 (2022).

Звуковые колебания в полярной фазе сверхтекучего ^3He в нематическом аэрогеле

Е. В. Суровцев¹⁾

Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, 119334 Москва, Россия

Поступила в редакцию 13 октября 2022 г.

После переработки 13 октября 2022 г.

Принята к публикации 14 октября 2022 г.

В работе исследован звуковой спектр полярной фазы сверхтекучего ^3He в нематическом аэрогеле. Получено уравнение, определяющее дисперсию звуковых колебаний системы. Для направлений вдоль и поперек оси анизотропии аэрогеля найдены решения системы для низкочастотных колебаний, т.е. тех, в которых скорость распространения колебаний много меньше скорости первого звука в чистом ^3He . В том же приближении найдено решение для случая чисто сдвиговых колебаний системы, возникающее при рассмотрении специальных граничных условий, заключающихся в том, что система окружена несжимаемой жидкостью. Проведено сравнение температурной зависимости найденных частот с имеющимися экспериментальными данными.

DOI: 10.31857/S123456782220128, EDN: lzkxvf

1. Введение. Полярная фаза сверхтекучего ^3He относится к классу топологических сверхтекучих фаз и обладает рядом уникальных свойств. Параметром порядка данной фазы является комплексная матрица 3×3 вида $e^{i\varphi} d_\mu m_j$, где d_μ – единичный вектор в спиновом пространстве, а m_j – единичный вектор в орбитальном пространстве [1]. Спектр квази-частиц в полярной фазе имеет топологически устойчивую дираковскую линию нулей, расположенную на экваторе ферми поверхности в плоскости, перпендикулярной направлению вектора \mathbf{m} . Как следствие, сверхтекучие свойства системы описываются одноосным тензором сверхтекучей плотности с максимальным главным значением вдоль направления \mathbf{m} . Еще одним проявлением топологических свойств данной фазы является наличие на границе фазы в силу принципа соответствия специфической ветви возбуждений, принадлежащей к классу майорановских поверхностных состояний [2]. Экспериментальное наблюдение полярной фазы возможно только в присутствии нематического аэрогеля с высокой степенью анизотропии, т.е. в таком, в котором нити с хорошей степенью сонаправленны (нафен, мулитовый аэрогель) [3, 4]. В присутствии нитей аэрогеля в системе могут быть стабилизированы интересные топологические дефекты – полуквантовые вихри [5, 6], которые наблюдались в эксперименте [7]. Помимо указанных топологических свойств полярной фазы, интерес представляет изучение сверхтекучего

отклика системы. Наблюдение именно сверхтекучих свойств системы возможно в экспериментах по колебанию аэрогеля внутри объема, заполненного сверхтекучим ^3He [8, 9]. Особенностью задачи является то, что между сверхтекучей компонентой и каркасом аэрогеля есть эффективное взаимодействие. Это приводит к тому, что колебательный спектр системы определяется не только сверхтекучими свойствами полярной фазы, но и упругими свойствами аэрогеля. Так как упругие свойства нематического аэрогеля имеют очевидную анизотропию, то следует ожидать возникновения интересных смешанных мод колебаний системы, которые не могут возникнуть в изотропном случае. В ходе указанных выше экспериментов по колебанию нематического аэрогеля в сверхтекучем ^3He было обнаружено две колебательные моды [8, 9]. Одна из мод соответствует механическим колебаниям системы и наблюдается во всем диапазоне температур. Изменение с температурой частоты колебаний в первой моде связано как с температурной зависимостью вязкости окружающего аэрогеля ^3He , так и с изменением линий тока вокруг аэрогеля в момент сверхтекучего перехода внутри аэрогеля. Ранее была произведена попытка описать температурную зависимость частоты первой моды с учетом потенциального протекания сверхтекучих токов сквозь аэрогель при условии несжимаемости как жидкости, так и аэрогеля [10]. Вторая ветвь колебаний возникает только в момент сверхтекучего перехода внутри аэрогеля. Характерными особенностями наблюда-

¹⁾e-mail: e.v.surovtsev@gmail.com

емой зависимости частоты от температуры для второй ветви колебаний является ее быстрый рост вблизи точки перехода с последующим выходом на почти постоянное значение порядка 1600 Гц. Такое небольшое значение частоты колебаний исключает возможность зацепления в данной моде первого звука ^3He . Масштаб температур, на котором происходит переход к постоянному значению частоты достаточно мал и составляет несколько сотых от температуры перехода T_c . Данная особенность отличает наблюдаемую моду от “медленной” моды, которая возбуждалась в экспериментах по распространению звука в кремниевых аэрогелях [11]. Целью настоящей работы является изучение спектра звуковых колебаний полярной фазы и нематического аэрогеля, а также идентификация наблюдаемой в эксперименте второй моды колебаний. Аккуратный вывод системы гидродинамических уравнений, необходимых для решения поставленной задачи, является отдельным интересным вопросом и выходит за рамки представленной работы. Ниже для нахождения звукового спектра системы мы будем использовать систему линейных гидродинамических уравнений, которая может быть получена эвристически так же, как это сделано в работе [12]. Решение системы будет произведено для актуального случая низкочастотных колебаний, т.е. таких колебаний, скорость распространения которых гораздо меньше скорости первого звука в чистом сверхтекучем ^3He . Качественно будет рассмотрен вопрос об эффективных граничных условиях, описывающих случай, когда система окружена снаружи несжимаемой сверхтекучей жидкостью. Отметим, что вывод системы линейных уравнений гидродинамики для полярной фазы в нематическом аэрогеле был произведен в работе [13], однако содержащиеся в указанной статье неточности не позволяют использовать ее результаты для наших целей.

2. Линеаризованные уравнения гидродинамики для полярной фазы в нематическом аэрогеле. Система гидродинамических уравнений для рассматриваемой системы содержит пять уравнений, описывающих законы сохранения следующих величин: массы аэрогеля, массы ^3He , суммарного импульса составной системы, энтропии (затухание мы рассматривать не будем), и потенциальности сверхтекучего движения. В качестве независимых гидродинамических переменных мы будем использовать: плотность аэрогеля – ρ_a , плотность ^3He – ρ_l , энтропию единицы объема – s , сверхтекучую скорость – \mathbf{v}_s , а также вектор локального смещения частиц аэрогеля \mathbf{u} . Использовать последнюю переменную в качестве независимой становится возможным при

условии отсутствия проскальзывания между каркасом аэрогеля и нормальной компонентой сверхтекучего ^3He , что имеет место для низких частот движения. В этом случае скорость нормальной компоненты $(v_n)_i = \dot{u}_i$ и полная плотность тока определяется выражением: $j_i = (\rho_a \delta_{ij} + (\rho_n)_{ij}) \dot{u}_j + (\rho_s)_{ij} (v_s)_j$, где $(\rho_s)_{ij}$, $(\rho_n)_{ij}$ – тензоры сверхтекучей и нормальной компонент ^3He ($(\rho_s)_{ij} + (\rho_n)_{ij} = \rho_l \delta_{ij}$). Также отметим, что мы не будем рассматривать движение специфических для полярной фазы гидродинамических переменных – спинового вектора d_μ и орбитального вектора m_j . Первый из векторов не участвует в движении, так как отсутствует его связь с другими гидродинамическими переменными, если пренебречь спин-орбитальным взаимодействием. Учет второго вектора является превышением точности для рассматриваемого далее линейного приближения и длинноволнового предела, так как в этом случае энергия текстуры орбитального вектора содержит производные вектора смещения более высокого порядка, чем упругая энергия аэрогеля. Таким образом, линеаризованные уравнения для рассматриваемой системы имеют вид:

$$\frac{\partial \delta s}{\partial t} + s^{(0)} \nabla_i \dot{u}_i = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \delta \rho_a}{\partial t} + \rho_a^{(0)} \nabla_i \dot{u}_i = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \delta \rho_l}{\partial t} + (\rho_s)_{ij} \nabla_i (v_s)_j + (\rho_n)_{ij} \nabla_i \dot{u}_j = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial (v_s)_i}{\partial t} + \nabla_i \delta \mu_l = 0, \quad (4)$$

$$(\rho_a^{(0)} \delta_{ij} + (\rho_n)_{ij}) \ddot{u}_j + (\rho_s)_{ij} (\dot{v}_s)_j + \nabla_i \delta p - \nabla_j \delta \sigma_{ij} = 0, \quad (5)$$

где $\delta s = s - s^{(0)}$, $\delta \rho_l = \rho_l - \rho_l^{(0)}$, $\delta \rho_a = \rho_a - \rho_a^{(0)}$ – малые отклонения из положения равновесия соответственно энтропии, плотности ^3He , плотности аэрогеля, $\delta \mu_l$, δp , $\delta \sigma_{ij}$ – изменения химического потенциала жидкости (в расчете на одну частицу), давления и тензора напряжений. Дополнительную особенность рассматриваемой системе придает наличие тензора напряжений аэрогеля в уравнении сохранения суммарного импульса системы. Отметим, что если давление определить как изменение полной энергии составной системы при изменении ее объема, то тензор напряжений, входящий в последнее уравнение, должен относиться к упругой энергии, не связанной с изменением объема системы. Так как изменение объема определяется дивергенцией вектора смещения, то для исключения указанных членов нужно положить $\sigma_{ii} = 0$.

Чтобы замкнуть написанную систему, необходимо выразить величины $\delta\mu_l$, δp , $\delta\sigma_{ij}$ через малые отклонения рассмотренных гидродинамических переменных. Для этого запишем энергию единицы объема с точностью до членов второго порядка по относительным отклонениям из положения равновесия (без учета кинетической энергии):

$$\begin{aligned} \delta\varepsilon = \varepsilon - \varepsilon_0 = & \frac{\rho_l^{(0)} c_{l1}^2}{2} \left(\frac{\delta\rho_l}{\rho_l^{(0)}} \right)^2 + [\rho^{(0)} c_{al}^2] \frac{\delta\rho_a \delta\rho_l}{(\rho^{(0)})^2} + \\ & + (\rho_l^{(0)} (c_{ul})^2) \tilde{u}_{zz} \frac{\delta\rho_l}{\rho_l^{(0)}} + \frac{\rho_a^{(0)} c_{a1}^2}{2} \left(\frac{\delta\rho_a}{\rho_a^{(0)}} \right)^2 + \\ & + \{ \rho_a^{(0)} c_{a3}^2 \} \tilde{u}_{zz} \frac{\delta\rho_a}{\rho_a^{(0)}} + \rho_l^{(0)} c_{ls}^2 \frac{\delta\rho_l \delta s}{\rho_l^{(0)} s^{(0)}} + \rho_a^{(0)} c_{as}^2 \frac{\delta\rho_a \delta s}{\rho_a^{(0)} s^{(0)}} + \\ & + \frac{\rho_l^{(0)} c_{l2}^2}{2} \left(\frac{\delta s}{s^{(0)}} \right)^2 + \rho_a^{(0)} c_{us}^2 \frac{\delta s}{s^{(0)}} + \mu_{ijkl} \frac{\tilde{u}_{ij} \tilde{u}_{kl}}{2}, \quad (6) \end{aligned}$$

где индекс “а” относится к величинам, связанным с аэрогелем, индекс “l” соответственно к ${}^3\text{He}$, $\tilde{u}_{ij} = u_{ij} - \frac{1}{3} u_{ll} \delta_{ij}$, ось z направлена вдоль оси анизотропии аэрогеля, $\rho^{(0)} = \rho_a^{(0)} + \rho_l^{(0)}$, тензоры $(\rho_s^{(0)})_{ij}$, μ_{ijkl} определяются выражениями:

$$(\rho_s)_{ij} = \rho_s^\perp \delta_{ij} + (\rho_s^\parallel - \rho_s^\perp) \hat{z}_i \hat{z}_j, \quad \rho_s^\parallel > \rho_s^\perp, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \mu_{ijkl} = & \frac{\rho_a^{(0)} c_{a2}^2}{2} \left(\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \delta_{kl} \right) + \\ & + \rho_a^{(0)} c_{a4}^2 \left(\frac{1}{4} [\delta_{ik} \hat{z}_j \hat{z}_l + \delta_{jl} \hat{z}_i \hat{z}_k + \right. \\ & \left. + \delta_{jk} \hat{z}_i \hat{z}_l + \delta_{il} \hat{z}_j \hat{z}_k] - \hat{z}_i \hat{z}_j \hat{z}_k \hat{z}_l \right) + \end{aligned}$$

$$+ \rho_a^{(0)} (c_{a5}^2 + c_{a4}^2) \cdot \left(\hat{z}_i \hat{z}_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right) \left(\hat{z}_k \hat{z}_l - \frac{1}{3} \delta_{kl} \right), \quad (8)$$

величины c_{a1} , c_{l1} и т.п. – феноменологические коэффициенты, имеющие размерность скорости: c_{l1} , c_{l2} – скорости первого и второго звука в сверхтекучем ${}^3\text{He}$; c_{ai} – скорости звука в аэрогеле, определяемые его упругими коэффициентами; c_{as} , c_{ls} , c_{us} – скорости, связанные с эффектом теплового расширения аэрогеля и ${}^3\text{He}$; c_{al} , c_{ul} – наиболее интересные для рассматриваемой задачи коэффициенты, описывающие взаимодействие аэрогеля и ${}^3\text{He}$. Ввиду большого количества переменных мы не будем далее рассматривать условия термодинамической устойчивости системы, т.е. будем просто считать, что речь идет об области параметров, где написанная квадратичная форма положительно определена.

Сделаем несколько замечаний по поводу количественных характеристик феноменологических коэффициентов, фигурирующих в написанном разложе-

нии энергии. Во-первых, для рассматриваемых систем плотность ${}^3\text{He}$ имеет тот же порядок, что и плотность аэрогеля $\rho_a \sim \rho_l$. Также известно, что скорость первого звука в гелии гораздо больше соответствующих скоростей в аэрогеле, т.е.: $c_{l1} \gg c_{ai}$ ($c_{l1} \sim 300$ м/с). Скорость второго звука для сверхтекучих ферми-систем также крайне мала. Последовательных измерений упругих свойств нематических аэрогелей на настоящий момент не проведено. Однако, можно сделать некоторые предположения о соотношениях между феноменологическими коэффициентами c_{ai} : наибольшим из них является c_{a5} , так как он определяет упругость системы вдоль оси z , совпадающей с направлением нитей аэрогеля. Можно также считать, что скорости, связанные с эффектом теплового расширения малы, как относительно скорости первого звука, так и всех феноменологических скоростей аэрогеля. Наконец, скорости, описывающие взаимодействие аэрогеля с ${}^3\text{He}$, должны быть малы относительно скорости первого звука в меру низкой концентрации примесей. Резюмируя все вышесказанное, можно утверждать, что скорость первого звука в рассматриваемой системе много больше всех остальных скоростей.

Для начала, используя написанную выше квадратичную форму, найдем точные выражения для малых изменений химического потенциала жидкости, давления и тензора напряжений, а затем упростим результат, исходя из количественных соотношений между феноменологическими коэффициентами, описанных ранее. Согласно определению имеем:

$$\begin{aligned} \delta\mu_l = & \frac{\partial\mu_l^{(0)}}{\partial\rho_l} \delta\rho_l + \frac{\partial\mu_l^{(0)}}{\partial\rho_a} \delta\rho_a + \frac{\partial\mu_l^{(0)}}{\partial\tilde{u}_{ij}} \delta\tilde{u}_{ij} + \frac{\partial\mu_l^{(0)}}{\partial s} \delta s = \\ = & \frac{\partial\delta\varepsilon}{\partial\delta\rho_l} = c_{l1}^2 \frac{\delta\rho_l}{\rho_l^{(0)}} + c_{al}^2 \frac{\delta\rho_a}{\rho^{(0)}} + c_{ul}^2 \tilde{u}_{zz} + c_{ls}^2 \frac{\delta s}{s^{(0)}}. \quad (9) \end{aligned}$$

Так как из уравнений (1), (2) следует, что

$$\frac{\delta s}{s^{(0)}} = \frac{\delta\rho_a}{\rho_a^{(0)}} = -u_{ll}, \quad (10)$$

то выражение для $\delta\mu_l$ можно упростить до вида:

$$\delta\mu_l = c_{l1}^2 \frac{\delta\rho_l}{\rho_l^{(0)}} + c_{ul}^2 u_{zz} - \tilde{c}_{ls}^2 u_{ll}, \quad (11)$$

где

$$\tilde{c}_{ls}^2 = c_{al}^2 + c_{ls}^2 + \frac{1}{3} c_{ul}^2. \quad (12)$$

В линейном приближении изменение давления определяется выражением:

$$\delta p = s^{(0)}\delta T + \rho_l^{(0)}\delta\mu_l + \rho_a^{(0)}\delta\mu_a. \quad (13)$$

Проделив аналогичные предыдущим преобразования для δT , $\delta\mu_a$ и $\delta\sigma_{ij}$, получим следующее выражение для изменения давления и тензора деформаций:

$$\delta\bar{p} = \tilde{c}_{l1}^2\delta\rho_l + \rho_a^{(0)}\tilde{c}_{a3}^2u_{zz} - \rho_a^{(0)}\tilde{c}_{a1}^2u_{ll}, \quad (14)$$

$$\delta\tilde{\sigma}_{ij} = \rho_a^{(0)}c_{a2}^2u_{ij} + \rho_a^{(0)}\frac{c_{a4}^2}{2}(\hat{z}_i^{(0)}u_{zj} + \hat{z}_j^{(0)}u_{zi}) + \left(\rho_a^{(0)}c_{a5}^2u_{zz} + c_{ul}^2\delta\rho_l - \rho_a^{(0)}\tilde{c}_{us}^2u_{ll}\right)\hat{z}_i\hat{z}_j, \quad (15)$$

где в $\delta\bar{p}$ включен коэффициент из тензора $\delta\sigma_{ij}$, стоящий перед δ_{ij} , а для сокращения записи введены следующие обозначения:

$$\tilde{c}_{l1}^2 = c_{l1}^2 + c_{al}^2\frac{\rho_l^{(0)}}{\rho^{(0)}} + c_{ls}^2 + \frac{1}{3}c_{ul}^2, \quad (16)$$

$$\rho_a^{(0)}\tilde{c}_{a3}^2 = \rho_a^{(0)}\left(c_{a3}^2 + \frac{1}{3}[c_{a4}^2 + c_{a5}^2]\right) + \rho_l^{(0)}c_{ul}^2 + \rho^{(0)}c_{us}^2, \quad (17)$$

$$\rho_a^{(0)}\tilde{c}_{a1}^2 = \rho_a^{(0)}c_{a1}^2 + \rho_a^{(0)}c_{al}^2\frac{\rho_a^{(0)}}{\rho^{(0)}} + 2\rho_a^{(0)}c_{as}^2 + \rho_l^{(0)}c_{l2}^2 + \rho_l^{(0)}c_{ls}^2 + \frac{2}{3}\rho_a^{(0)}c_{us}^2 + \frac{1}{3}\rho_l^{(0)}c_{ul}^2 - \frac{1}{3}\rho_a^{(0)}c_{a2}^2 - \frac{2}{3}\rho_a^{(0)}c_{a3}^2 + \frac{1}{9}\rho_a(c_{a4}^2 + c_{a5}^2), \quad (18)$$

$$\tilde{c}_{us}^2 = c_{us}^2\frac{\rho^{(0)}}{\rho_a^{(0)}} + c_{a3}^2 + \frac{1}{3}(c_{a4}^2 + c_{a5}^2). \quad (19)$$

Исходя из сделанных выше оценок, положим далее везде:

$$\tilde{c}_{l1}^2 \approx c_{l1}^2. \quad (20)$$

3. Дисперсионное уравнение. Для решения системы уравнений (3)–(5) используем определение потенциальности сверхтекучего течения в полярной фазе, т.е. $(v_s)_i = \nabla_i\delta\varphi$, ($\hbar/2m = 1$). Тогда уравнение (5) упрощается до вида:

$$\frac{\partial\delta\varphi}{\partial t} + \delta\mu_l = 0. \quad (21)$$

Будем искать решение уравнений в виде периодической функции $\sim e^{-i\omega t + ikr}$. Исключив из уравнений (3) и (21) переменную $\delta\rho_l$, после тривиальных преобразований получим выражения для $\delta\varphi$, δp и $\delta\sigma_{ij}$, записанные как функции смещения u_i :

$$\begin{aligned} \delta\varphi &= \omega k_i(\delta\varphi)_{ij}u_j = \\ &= \omega k_i\{(\delta\varphi)_\perp\delta_{ij} + [(\delta\varphi)_\parallel - (\delta\varphi)_\perp]\hat{z}_i\hat{z}_j\}u_j, \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \delta\bar{p} &= ik_i(\delta p)_{ij}u_j = \\ &= ik_i\{(\delta p)_\perp\delta_{ij} + [(\delta p)_\parallel - (\delta p)_\perp]\hat{z}_i\hat{z}_j\}u_j, \end{aligned} \quad (23)$$

$$\delta\tilde{\sigma}_{ij} = i\delta\alpha_{ijkl}k_lu_m = \quad (24)$$

$$\begin{aligned} &= i\left(\rho_a^{(0)}\frac{c_{a2}^2}{2}[\delta_{im}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jm}] + \right. \\ &+ \frac{\rho_a^{(0)}c_{a4}^2}{4}[\hat{z}_i\hat{z}_m\delta_{jl} + \hat{z}_j\hat{z}_m\delta_{il} + \hat{z}_j\hat{z}_l\delta_{im} + \hat{z}_i\hat{z}_l\delta_{jm}] + \\ &\left. + \hat{z}_i\hat{z}_j\{(\delta\alpha)_\perp\delta_{lm} + [(\delta\alpha)_\parallel - (\delta\alpha)_\perp]\hat{z}_l\hat{z}_m\}\right)k_lu_m, \end{aligned}$$

где

$$(\delta\varphi)_\perp = -\frac{\tilde{c}_{ls}^2\rho_l^{(0)} + c_{l1}^2\rho_n^\perp}{\omega^2\rho_l^{(0)} - (\rho_s)_{ij}k_ik_jc_{l1}^2}, \quad (25)$$

$$(\delta\varphi)_\parallel - (\delta\varphi)_\perp = \frac{c_{ul}^2\rho_l^{(0)} - c_{l1}^2[\rho_n^\parallel - \rho_n^\perp]}{\omega^2\rho_l^{(0)} - (\rho_s)_{ij}k_ik_jc_{l1}^2}, \quad (26)$$

$$\begin{aligned} (\delta p)_\perp &= \frac{1}{\omega^2\rho_l^{(0)} - (\rho_s)_{ij}k_ik_jc_{l1}^2} \times \\ &\times (-\rho_l^{(0)}\omega^2[\rho_n^\perp c_{l1}^2 + \rho_a^{(0)}\tilde{c}_{a1}^2] + \\ &+ (\rho_s)_{ij}k_ik_j[\rho_a^{(0)}\tilde{c}_{a1}^2 - \rho_l^{(0)}\tilde{c}_{ls}^2c_{l1}^2]), \end{aligned} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} (\delta p)_\parallel - (\delta p)_\perp &= \frac{1}{\omega^2\rho_l^{(0)} - (\rho_s)_{ij}k_ik_jc_{l1}^2} \times \\ &\times (\omega^2\rho_l^{(0)}[\rho_a^{(0)}\tilde{c}_{a3}^2 - [\rho_n^\parallel - \rho_n^\perp]c_{l1}^2] - \\ &- (\rho_s)_{ij}k_ik_j[\rho_a^{(0)}\tilde{c}_{a3}^2 - \rho_l^{(0)}\tilde{c}_{ul}^2]c_{l1}^2), \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} (\delta\alpha)_\perp &= -\frac{1}{\omega^2\rho_l^{(0)} - (\rho_s)_{ij}k_ik_jc_{l1}^2} \times \\ &\times (\rho_l^{(0)}\omega^2[\rho_n^\perp c_{ul}^2 + \rho_a^{(0)}\tilde{c}_{us}^2] - \\ &- (\rho_s)_{ij}k_ik_j[\rho_a^{(0)}\tilde{c}_{us}^2c_{l1}^2 - \rho_l^{(0)}\tilde{c}_{ls}^2c_{ul}^2]), \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} (\delta\alpha)_\parallel - (\delta\alpha)_\perp &= \frac{1}{\omega^2\rho_l^{(0)} - (\rho_s)_{ij}k_ik_jc_{l1}^2} \times \\ &\times (\omega^2\rho_l^{(0)}[\rho_a^{(0)}\tilde{c}_{a5}^2 - [\rho_n^\parallel - \rho_n^\perp]c_{ul}^2] - \\ &- (\rho_s)_{ij}k_ik_j[\rho_a^{(0)}\tilde{c}_{a5}^2c_{l1}^2 - \rho_l^{(0)}\tilde{c}_{ul}^4]). \end{aligned} \quad (30)$$

Используя полученные выражения и введенные обозначения, переписем итоговое уравнение на вектор смещения \mathbf{u} в виде:

$$\begin{aligned} [-\omega^2\{\rho_a^{(0)}\delta_{im} + (\rho_n)_{im} - (\rho_s)_{ij}(\delta\varphi)_{lm}k_jk_l\} + \\ + \{(\delta\alpha)_{ijlm} - \delta_{il}(\delta p)_{jm}\}k_jk_l]u_m = 0. \end{aligned} \quad (31)$$

Условие совместимости трех линейных уравнений дает дисперсионное уравнение на частоты колебаний:

$$\begin{aligned} \det(-\omega^2\{\rho_a^{(0)}\delta_{im} + (\rho_n)_{im} - (\rho_s)_{ij}(\delta\varphi)_{lm}k_jk_l\} + \\ + \{(\delta\alpha)_{ijlm} - \delta_{il}(\delta p)_{jm}\}k_jk_l) = 0. \end{aligned} \quad (32)$$

Полученное уравнение является, вообще говоря, уравнением четвертой степени относительно квадрата частоты, что соответствует четырем колебательным модам для каждого направления волнового

вектора. Понятно, что четвертая колебательная мода должна возникать в точке сверхтекучего перехода внутри аэрогеля и являться аналогом второго звука для рассматриваемой системы. Наличие трех различных типов колебаний выше точки перехода обусловлено анизотропными упругими свойствами аэрогеля.

4. Низкочастотные моды. Точное решение уравнения (32) слишком громоздко. Ограничимся лишь некоторыми простыми пределами, имеющими отношение к недавним экспериментам [8]. Наблюдаемые в экспериментах по колебанию нематического аэрогеля в ^3He частоты резонансов имеют порядок 10^3 Гц. Так как характерные длины возбуждаемых волн определяются размерами аэрогеля, т.е. порядка 1 мм, то отсюда можно заключить, что первый звук в ^3He в рассматриваемых экспериментах внутри аэрогеля не возбуждается. Исходя из этого, будем искать решение уравнения (32) только для низкочастотных мод колебаний системы, т.е. с учетом малого параметра $\omega^2/(c_{l1}^2 k^2)$ в нашем уравнении. Более того, считая, что скорость звука в ^3He порядка 300 м/с, а точность измерения сверхтекучей плотности ограничена условием $\frac{\rho_s}{\rho_l^{(0)}} > 10^{-4}$, то можно утверждать, что во всем доступном диапазоне температур выполнено даже более сильное условие: $\omega^2 \ll \frac{\rho_s}{\rho_l^{(0)}} k^2 c_{l1}^2$. Таким образом, в нулевом порядке по рассматриваемому малому параметру в знаменателях выражений для $\delta\varphi_{\perp,\parallel}$, $\delta p_{\perp,\parallel}$, $\delta\alpha_{\perp,\parallel}$ можно пренебречь первым слагаемым, а также отношением всех скоростей к скорости первого звука c_{l1} . В данном приближении компоненты тензоров $(\delta\varphi)_{ij}$, $(\delta p)_{ij}$, $(\delta\alpha)_{ijkl}$ имеют крайне простой вид:

$$(\delta\varphi)_{\perp} = \frac{\rho_n^{\perp}}{(\rho_s)_{ij} k_i k_j},$$

$$(\delta\varphi)_{\parallel} - (\delta\varphi)_{\perp} = \frac{[\rho_n^{\parallel} - \rho_n^{\perp}]}{(\rho_s)_{ij} k_i k_j},$$

$$(\delta p)_{\perp} = \omega^2 \frac{\rho_l^{(0)} \rho_n^{\perp}}{(\rho_s)_{ij} k_i k_j} - \rho_a^{(0)} \tilde{c}_{a1}^2 + \rho_l^{(0)} \tilde{c}_{l5}^2,$$

$$(\delta p)_{\parallel} - (\delta p)_{\perp} = \omega^2 \frac{\rho_l^{(0)} [\rho_n^{\parallel} - \rho_n^{\perp}]}{(\rho_s)_{ij} k_i k_j} + \rho_a^{(0)} \tilde{c}_{a3}^2 - \rho_l^{(0)} c_{ul}^2,$$

$$(\delta\alpha)_{\perp} = -\rho_a^{(0)} \tilde{c}_{us}^2,$$

$$(\delta\alpha)_{\parallel} - (\delta\alpha)_{\perp} = \rho_a^{(0)} c_{a5}^2.$$

Рассмотрим два частных случая направления распространения волн в аэрогеле: параллельно оси анизотропии аэрогеля и перпендикулярно. В первом случае, когда $k_{x,y} = 0$, получим две частоты коле-

баний – для двух поперечных ($u_z = 0$) и одной продольной ($u_z \neq 0$) мод:

$$(\omega_{1,2}^z)^2 = \frac{\rho_a^{(0)}}{\rho_a^0 + \rho_n^{\perp}} \frac{2c_{a2}^2 + c_{a4}^2}{4} k_z^2, \quad (33)$$

$$(\omega_3^z)^2 = \frac{\rho_l^{(0)} \rho_s^{\parallel}}{\rho_a^0 \rho_s^{\parallel} + \rho_l^{(0)} \rho_n^{\parallel}} \tilde{c}_{a5}^2 k_z^2, \quad (34)$$

где $\tilde{c}_{a5}^2 = [\tilde{c}_{a1}^2 + c_{a2}^2 - \tilde{c}_{a3}^2 + c_{a4}^2 + c_{a5}^2 - \tilde{c}_{us}^2] \frac{\rho_s^{(0)}}{\rho_l^{(0)}} + c_{ul}^2 - \tilde{c}_{l5}^2$.

Первая колебательная мода – это очевидно поперечные колебания аэрогеля и нормальной компоненты ^3He , распространяющиеся вдоль оси z . Данное решение существует как в нормальной фазе, так и в сверхтекучей и связано исключительно с упругостью аэрогеля. Вторая колебательная мода – это аналог второго звука в сверхтекучей системе. Действительно, если устремить все скорости, связанные с аэрогелем, и плотность аэрогеля к нулю, то получим обычное выражение для частоты второго звука в сверхтекучей системе:

$$(\omega_3^z)^2 \rightarrow \frac{\rho_s^{\parallel}}{\rho_n^{\parallel}} c_{l2}^2 k_z^2. \quad (35)$$

Отметим, что для данной моды взаимодействие с аэрогелем приводит к тому, что скорость распространения колебаний определяется теперь упругостью аэрогеля вдоль оси z .

Для колебаний в направлениях, перпендикулярных оси z , получим следующие результаты:

$$(\omega_1^{xy})^2 = \frac{\rho_a^{(0)}}{\rho_a^0 + \rho_n^{\parallel}} \frac{2c_{a2}^2 + c_{a4}^2}{4} (k_x^2 + k_y^2), \quad (36)$$

$$(\omega_2^{xy})^2 = \frac{\rho_a^{(0)}}{\rho_a^0 + \rho_n^{\perp}} \frac{c_{a2}^2}{2} (k_x^2 + k_y^2), \quad (37)$$

$$(\omega_3^{xy})^2 = \frac{\rho_l^{(0)} \rho_s^{\perp}}{\rho_a^0 \rho_s^{\perp} + \rho_l^{(0)} \rho_n^{\perp}} \times \left([\tilde{c}_{a1}^2 + c_{a2}^2] \frac{\rho_a^{(0)}}{\rho_l^{(0)}} - \tilde{c}_{l5}^2 \right) (k_x^2 + k_y^2). \quad (38)$$

Первая колебательная мода аналогична первым двум модам, найденным ранее ($\omega_{1,2}^z$), но в ней колеблется z компонента вектора смещения. Различие частот в данных модах связано с анизотропией нормальной компоненты плотности полярной фазы сверхтекучего ^3He . Появление второй поперечной моды, в свою очередь, связано с анизотропией упругих свойств аэрогеля. Наконец, третья колебательная мода включает в себя совместные колебания нормальной компоненты ^3He и аэрогеля относительно сверхтекучей компоненты, т.е. это опять аналог

второго звука только уже для поперечного направления распространения колебаний.

Спектр собственных колебаний системы зависит от граничных условий на поверхности аэрогеля. В применении к рассматриваемой экспериментальной ситуации, когда аэрогель в форме прямоугольного параллелепипеда находится в ячейке и окружен снаружи ^3He , необходимо дополнительно решить гидродинамические уравнения снаружи аэрогеля для соответствующей сверхтекучей фазы, наложив условия отсутствия тока на бесконечности. Качественное обсуждение данного вопроса содержится в следующем разделе.

5. Сдвиговые колебания. Рассмотрим теперь приближенно колебания, в которых все компоненты вектора смещения и волнового вектора не равны нулю. Для нас существенно, что снаружи аэрогеля находится сверхтекучий ^3He . Покажем с помощью простых оценочных рассуждений, что в этом случае в системе возможно возбуждение сдвиговых колебаний. Будем искать пространственную часть решения внутри аэрогеля в виде:

$$u_x = u_x^{(0)} \sin(k_x x + \gamma_x) \cos(k_y y + \gamma_y) \cos(k_z z + \gamma_z), \quad (39)$$

$$u_y = u_y^{(0)} \cos(k_x x + \gamma_x) \sin(k_y y + \gamma_y) \cos(k_z z + \gamma_z), \quad (40)$$

$$u_z = u_z^{(0)} \cos(k_x x + \gamma_x) \cos(k_y y + \gamma_y) \sin(k_z z + \gamma_z). \quad (41)$$

Колебания аэрогеля могут возбуждать волны первого и второго звука снаружи. Так как скорость второго звука гораздо меньше упругих скоростей аэрогеля, то второй звук будет излучаться в окружающее пространство, давая при этом вклад в затухание собственных мод системы. Скорость первого звука, наоборот, гораздо больше скоростей звука в аэрогеле, что приводит к затуханию волн первого звука вдали от границы аэрогеля. Действительно, квадрат волнового вектора для колебаний первого звука снаружи будет:

$$(k_1^{\text{out}})^2 = \frac{\omega^2}{c_{11}^2}, \quad (42)$$

где ω – частота собственных колебаний системы (аэрогель и ^3He). Длина волны первого звука даже для максимальных частот колебаний (порядка 1600 Гц) составляет примерно 20–25 см, что во много раз превышает размеры образца. Рассмотрим плоскость xz , разделяющую аэрогель ($y < 0$) и жидкость ($y > 0$). Вблизи поверхности решение для нормальной компоненты смещения снаружи аэрогеля приближенно будет иметь вид:

$$u_y \approx u_y^{(0)} \sin \gamma_y e^{-k_y^{\text{out}} y} \cos(k_x x) \cos(k_z z), \quad (43)$$

где $k_y^{\text{out}} = \sqrt{k_x^2 + k_z^2 - (k_1^{\text{out}})^2} \approx \sqrt{k_x^2 + k_z^2}$. На границе аэрогеля, определяемой нормалью n_i , должны быть непрерывны компоненты тензора потока импульса $\Pi_{ij} n_j$. В частности, должна быть непрерывна компонента тензора Π_{yy} . Так как колебания давления во втором звуке в окружающей аэрогель сверхтекучей жидкости крайне малы, то основной вклад в Π_{yy}^{out} будет давать затухающая волна первого звука:

$$\Pi_{yy}^{\text{out}} \approx \rho_l^{(0)} c_{11}^2 \partial_i u_i = \frac{\rho_l^{(0)} \omega^2}{k_y^{\text{out}}} u_y. \quad (44)$$

Внутри аэрогеля имеем соответственно:

$$\Pi_{yy}^{\text{in}} \approx \rho_a^{(0)} c_{ay}^2 \partial_y u_y - \omega^2 \frac{\rho_l^{(0)} \rho_n^{\perp}}{(\rho_s)_{ij} k_i^{\text{in}} k_j^{\text{in}}} \partial_i u_i, \quad (45)$$

где $c_{ay}^2 = \tilde{c}_{a1}^2 + c_{a2}^2$ – продольная скорость звука вдоль направления y в аэрогеле. Вблизи T_c , когда $\rho_s \ll \rho_n$, положим $\rho_a^{(0)} c_{ay}^2 \ll \omega^2 \frac{\rho_l^{(0)} \rho_n^{\perp}}{(\rho_s)_{ij} k_i^{\text{in}} k_j^{\text{in}}}$ (область параметров аэрогеля, где данное утверждение можно использовать, будет рассмотрена ниже), и поэтому первым членом в Π_{yy}^{in} можно пренебречь. Приравняв Π_{yy}^{in} и Π_{yy}^{out} на границе, получим следующее соотношение:

$$(u_i^{(0)} k_i^{\text{in}}) = - \frac{(\rho_s)_{ij} k_i^{\text{in}} k_j^{\text{in}}}{\rho_n^{\perp} k_y^{\text{in}} k_y^{\text{out}}} (u_y^{(0)} k_y^{\text{in}}) \tan \gamma_y. \quad (46)$$

Во-первых, заметим, что так как $k_x^{\text{in}}, k_y^{\text{in}}, k_y^{\text{out}}$ в задаче имеют одинаковый порядок, то $\frac{(\rho_s)_{ij} k_i^{\text{in}} k_j^{\text{in}}}{\rho_n^{\perp} k_y^{\text{in}} k_y^{\text{out}}} \sim \frac{\rho_s}{\rho_n} \ll 1$. Во вторых, из непрерывности Π_{xy} можно оценить $\sin \gamma_y$ как $\sin \gamma_y \sim \delta(\omega) \cdot k_x \ll 1$, где $\delta(\omega) \sim 0.1$ мм – глубина вязкого проникновения в ^3He для частот порядка 1000 Гц. Таким образом, получим, что $|u_y^{\text{in}} k_y| \gg |u_i k_i^{\text{in}}|$. Аналогичным образом можно рассмотреть другую боковую грань аэрогеля (параллельную оси анизотропии), откуда следует, что $|u_x^{\text{in}} k_x| \gg |u_i k_i^{\text{in}}|$. Нас в дальнейшем будут интересовать колебания, в которых $u_x^{(0)}$ и $u_y^{(0)}$ имеют одинаковый знак (одновременное сжатие или растяжение в боковых направлениях). Для таких колебаний с необходимостью следует, что $|k_x u_x| \ll |k_z u_z|$, что верно, если выполнено дополнительное условие $\rho_a^{(0)} \tilde{c}_{a5}^2 \ll \omega^2 \frac{\rho_l^{(0)} \rho_n^{\perp}}{(\rho_s)_{ij} k_i^{\text{in}} k_j^{\text{in}}}$. Таким образом, в нулевом порядке по отношению ρ_s/ρ_n можно положить $k_x u_x \approx 0$. В итоге мы получили, что вблизи T_c из-за наличия снаружи аэрогеля несжимаемой жидкости рассматриваемые колебания должны быть чисто сдвиговыми. Найдем теперь как соотносятся $k_x^{\text{in}}, k_y^{\text{in}}$ и

k_z^{in} в данном типе колебаний. Как было сказано выше, жесткость аэрогеля вдоль оси z гораздо больше, чем в поперечном направлении. Поэтому, считая, что продольная скорость звука вдоль оси z в аэрогеле в несколько раз больше, чем поперечная, из уравнения на u_z следует, что $k_z^2 \sim \omega^2/\tilde{c}_{a5}^2 \ll k_x^2, k_y^2$, (здесь мы предположили, что итоговая частота колебаний определяется поперечной скоростью звука в аэрогеле). Рассматриваемые колебания представляют из себя двухстороннее сжатие в поперечном направлении при одновременном растяжении в продольном, сохраняющем полный объем аэрогеля, т.е. это колебания формы аэрогеля.

Найдем спектр системы с учетом дополнительного требования $k_i u_i = 0$. Для этого рассмотрим первые два уравнения для u_x, u_y , подставив в них значение u_z из нулевого приближения, т.е. $u_z = -\frac{u_x k_x + u_y k_y}{k_z}$. Таким образом, эффективная система уравнений имеет вид:

$$\begin{aligned} & \left[-(\rho_a^0 + \rho_n^\perp)\omega^2 + \left(\frac{\rho_a^0 c_{a2}^2}{2} - \frac{\rho_a^0 c_{a4}^2}{4} - \right. \right. \\ & \left. \left. - \rho_s^\perp [(\delta\varphi)_\parallel - (\delta\varphi)_\perp]\omega^2 + [\delta p_\parallel - \delta p_\perp] \right) k_x^2 + \right. \\ & \left. + \frac{\rho_a^0 c_{a2}^2}{2} k_y^2 + \left(\frac{\rho_a^0 c_{a2}^2}{2} + \frac{\rho_a^0 c_{a4}^2}{4} \right) k_z^2 \right] u_x + \\ & \quad + \left[-\rho_s^\perp [(\delta\varphi)_\parallel - (\delta\varphi)_\perp]\omega^2 + \right. \\ & \left. + \left(\delta p_\parallel - \delta p_\perp - \frac{\rho_a^0 c_{a4}^2}{4} \right) \right] k_x k_y u_y = 0, \quad (47) \end{aligned}$$

где второе уравнение получается из первого заменой индексов $x \leftrightarrow y$. Чтобы исследовать интересующий нас эффект связи колебаний аэрогеля и сверхтекучей компоненты ^3He , выражение для $(\delta p_\parallel - \delta p_\perp)$ необходимо писать с точностью до первого не исчезающего члена по малому параметру $\omega^2/(c_{l1}^2 k^2)$, т.е.:

$$\begin{aligned} \delta p_\parallel - \delta p_\perp &= \omega^2 \frac{\rho_l^{(0)} [\rho_n^\parallel - \rho_n^\perp]}{(\rho_s)_{ij} k_i k_j} + \rho_a^{(0)} \tilde{c}_{a3}^2 - \\ & - \rho_l^{(0)} c_{ul}^2 \left(1 + \frac{\rho_l^{(0)} \omega^2}{(\rho_s)_{ij} k_i k_j c_{l1}^2} \right). \quad (48) \end{aligned}$$

Согласно сделанному выше предположению во всех уравнениях можно опустить члены, пропорциональные k_z^2 . Условие совместимости двух линейных уравнений дает две частоты колебаний:

$$\omega_1^2 = \frac{\rho_a^0}{\rho_a + \rho_n^\perp} \frac{c_{a2}^2}{2} (k_x^2 + k_y^2), \quad (49)$$

$$\omega_2^2 = \frac{\rho_a^{(0)} \rho_s^\perp (k_x^2 + k_y^2) c_{a\perp}^2}{\left[(\rho_n^\perp \rho_s^\parallel + \rho_a^{(0)} \rho_s^\perp) + \rho_l^{(0)} \rho_n^\perp \frac{c_{yl}^2}{c_{l1}^2} \right]}, \quad (50)$$

где $c_{a\perp}^2 = \left(\frac{c_{a2}^2}{2} + \left(\tilde{c}_{a3}^2 - \frac{\rho_a^{(0)}}{\rho_a^0} c_{ul}^2 \right) - \frac{c_{a4}^2}{4} \right)$. Первой частоте колебаний соответствует собственный вектор, в котором колебания вдоль осей x и y происходят в противофазе и удовлетворяют уравнению $k_x u_x + k_y u_y = 0$. Поэтому данное решение должно быть отброшено как не удовлетворяющее исходному предположению. Наибольший интерес представляет вторая мода, для которой $k_x u_x + k_y u_y \neq 0$. Отметим, что скорость $c_{a\perp}$, вообще говоря, не зависит от c_{ul} , что видно после подстановки выражения для \tilde{c}_{a3} . Таким образом, $c_{a\perp}$ полностью определяется упругими свойствами аэрогеля. В полученном выражении можно выделить две асимптотические зависимости:

$$\frac{(\rho_s^\perp \rho_a^0) c_{a\perp}^2}{(\rho_l^{(0)})^2 c_{ul}^2} c_{l1}^2 k^2, \quad \frac{\langle \rho_s \rangle}{\rho_l^{(0)}} \ll \frac{c_{ul}^2}{c_{l1}^2}, \quad (51)$$

$$\frac{\rho_a^{(0)}}{\rho_a^{(0)} + \rho_n \frac{\rho_s^\parallel}{\rho_s^\perp}} c_{a\perp}^2 k^2, \quad \frac{\langle \rho_s \rangle}{\rho_l^{(0)}} \gg \frac{c_{ul}^2}{c_{l1}^2}, \quad (52)$$

где $\langle \rho_s \rangle = \rho_s^\parallel + \frac{\rho_a^{(0)}}{\rho_l^{(0)}} \rho_s^\perp$. При относительно малых значениях сверхтекучей плотности выражение (51) пропорционально $\rho_s^\perp c_{l1}^2$, что совпадает с зависимостью для четвертого звука, распространяющегося в перпендикулярном к оси анизотропии аэрогеля направлении. В противоположном пределе квадрат частоты стремится к асимптотическому предельному значению, определяемому частотой сдвиговых колебаний аэрогеля с учетом дополнительной массы ^3He .

6. Сравнение с экспериментом. Проведем сравнение полученной зависимости с экспериментальными данными на начальном участке, т.е. вблизи температуры сверхтекучего перехода, где справедливо разложение Гинзбурга–Ландау [8] (см. рис. 1). В пределе Гинзбурга–Ландау анизотропия тензора сверхтекучей плотности не зависит от давления и отношение диагональных компонент тензора $\rho_s^\parallel/\rho_s^\perp$ равно 3. В этом же приближении сверхтекучая плотность в направлении, перпендикулярном орбитальному вектору \mathbf{m} , определяется выражением:

$$\rho_s^\perp = \frac{(1 - \frac{T}{T_{ca}}) \rho_l^{(0)}}{\beta_{12345} (1 + \frac{F_1^s}{3})}, \quad (53)$$

где T_{ca} – температура сверхтекучего перехода в полярную фазу, $\beta_{12345} = \beta_1 + \beta_2 + \beta_3 + \beta_4 + \beta_5$, β_i – коэффициенты разложения свободной энергии ^3He в теории Гинзбурга–Ландау, F_1^s – параметр Ландау ферми-жидкости. Все коэффициенты, которые входят в написанное выше выражение, зависят от давления. Для оценки положим волновые вектора в перпендикулярном направлении $k_x \sim k_y \sim \pi/a$. Срав-

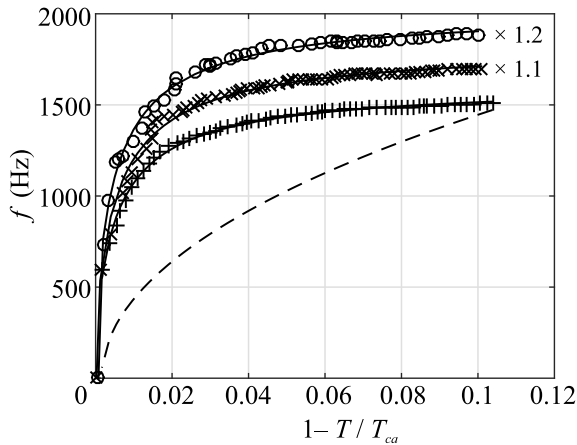


Рис. 1. Пунктирная линия – схематичное изображение температурной зависимости частоты продольной колебательной моды (34). Кружки, кресты, плюсы – зависимость от температуры частоты второй колебательной моды, наблюдаемой в эксперименте [8], для давлений 7.1, 15.6, 29.3 бар соответственно. Сплошные линии – подгонка теоретической зависимостью для сдвиговой колебательной моды (50). Зависимость ρ_s^\perp взята из (53), где использовались значения коэффициентов β_i чистого ^3He

нение теоретической и экспериментальной зависимостей частоты второй моды от температуры для давлений 7.1, 15.6 и 29.3 бар представлено на рис. 1. Для наглядности значения частоты для 7.1 бар умножены на 1.2, а для 15.6 бар на 1.1. При построении теоретической зависимости использовались три подгоночных параметра: T_{ca} , $c_{a\perp}$ и c_{ul} . Для всех трех зависимостей наилучшее согласие достигается при $c_{a\perp} \approx 17$ м/с, что согласуется с утверждением, что данная скорость определяется исключительно упругими свойствами аэрогеля, которые не зависят от давления. Одновременно с этим феноменологический коэффициент c_{ul}^2 зависит от давления, но его отношение к c_{11}^2 от давления практически не зависит и равно примерно 0.01. По всей видимости, этот результат указывает на то, что данное отношение является функцией только от концентрации примесей.

Вернемся теперь к вопросу о сделанном в начале раздела предположении, что близи T_c можно считать $\rho_a^{(0)} c_{a5}^2 \ll \omega^2 \frac{\rho_l^{(0)} \rho_n^\perp}{(\rho_s)_{ij} k_i k_j}$. Подставив для частоты асимптотическое решение (51) и найденные численно значения параметров, получим, что $c_{a5} \ll 150$ м/с. Температурная же область применимости полученных результатов ограничена условием $\rho_s^\perp / \rho_n^\perp \ll \frac{c_{a\perp}^2}{c_{a5}^2}$. Поэтому можно заключить, что для возможности применения построенного приближения необходимо,

чтобы анизотропия скоростей в аэрогеле была не слишком большой.

7. Заключение. Остановимся на некоторых выводах работы относительно экспериментального применения полученных результатов. Во-первых, отметим, что найденные в разделе 4 колебательные моды ^3He и нематического аэрогеля вряд ли могли быть возбуждены в экспериментах по колебанию аэрогеля внутри сверхтекучего ^3He [8]. Это связано со специфическими граничными условиями в которых находится рассматриваемая система. Сравнение теоретической кривой с экспериментальной зависимостью представлено на рис. 1. Отметим, что полученные в статье продольные колебательные моды (для двух направлений распространения колебаний) аналогичны полученной теоретически и найденной экспериментально “медленной” моде в изотропном кремниевом аэрогеле [11]. Поэтому, по всей видимости, для наблюдения данных мод в рассматриваемой системе полезным было бы использование методики возбуждения колебаний посредством пропускания обычного звука через аэрогель в различных направлениях. В то же время найденная в статье зависимость частоты сдвиговых колебаний от температуры достаточно хорошо согласуется с экспериментально наблюдаемой, а подгоночные параметры в виде соответствующих упругих коэффициентов укладываются в оценочные рамки. С одной стороны, возможность возникновения такого рода колебаний возникает вследствие очень слабой сжимаемости жидкости как снаружи системы, так и внутри нее, по отношению к сжимаемости аэрогеля. Это приводит к тому, что при колебаниях объем системы не изменяется. С другой стороны, возбуждение таких колебаний является спецификой рассматриваемой системы, связанной с анизотропными свойствами нематического аэрогеля. Взаимодействие ^3He и анизотропного аэрогеля приводит к тому, что химический потенциал жидкости становится функцией u_{zz} . Появление такой связи описывается упругим коэффициентом $c_{ul}^2 \neq 0$ в разложении энергии системы по степеням u_{zz} . Из-за низкой концентрации примесей данный коэффициент мал по отношению к квадрату скорости первого звука c_{11}^2 . Наличие дополнительного члена приводит к тому, что даже при условии, что $u_{ll} = 0$, оказывается возможной связь между колебаниями нормальной компоненты системы и колебаниями сверхтекучей компоненты. В полученной зависимости частоты от температуры можно выделить два участка: в начале зависимость совпадает с частотой четвертого звука, уменьшенной на величину связи $c_{a\perp}/c_{ul}$, а на конечном сводится к частоте сдвиговых колеба-

ний системы с учетом только ее нормальной компоненты плотности. Как следует из подгонки экспериментальных кривых, отношение c_{ul}^2/c_{l1}^2 не зависит от давления. Поэтому полученное выражение для частоты сдвиговых колебаний можно было бы использовать для исследования температурной зависимости сверхтекучей плотности и степени ее анизотропии в области температур, пока выполнено условие $\rho_s^\perp/\rho_n^\perp \ll \frac{c_s^2}{c_{a5}^2}$. На настоящий момент упругие свойства нематических аэрогелей систематически не изучались. Для возможности правильной интерпретации полученных из сравнения с экспериментов результатов необходимо, чтобы отношение $\frac{c_s^2}{c_{a5}^2}$ было не больше 0.1 (так как из (53) $\rho_s^\perp/\rho_l^{(0)} \sim 0.1[1 - T/T_{ca}]$). Отметим, что для системы примесей, состоящей из идеально сонаправленных и зеркально отражающих квазичастицы нитей справедлива теорема Андерсона, согласно которой данный тип примесей не меняет сверхтекучих свойств полярной фазы, таких как температура сверхтекучего перехода и зависимость щели в спектре возбуждений от температуры [14]. Поэтому, измерение температурной зависимости сверхтекучей плотности позволяет произвести оценку степени выполнения данной теоремы для реальных аэрогелей. Здесь следует заметить, что для рассматриваемой системы вклад примесей в сверхтекучую плотность не связан только с рассеянием квазичастиц на нитях. Есть еще эффект присоединенной массы, которая возникает при потенциальном обтекании нитей сверхтекучим потоком в направлении, перпендикулярном направлению нитей. Данный вклад не может быть посчитан в рассмотренном гидродинамическом приближении, однако конечность эффекта не вызывает сомнений. Исходя из

этого, при проверке выполнения теоремы Андерсона необходимо исключить из рассмотрения указанный выше эффект.

Автор признателен Л. А. Мельниковскому, А. А. Солдатову и И. А. Фомину за полезные комментарии и конструктивную критику.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект # 18-12-00384).

-
1. D. Vollhardt and P. Wölfle, *The Superfluid Phases of ^3He* , Taylor and Francis, London (1990).
 2. T. T. Heikkilä and G. E. Volovik, *JETP Lett.* **93**, 59 (2011).
 3. K. Aoyama and R. Ikeda, *Phys. Rev. B* **73**, 060504(R) (2006).
 4. V. V. Dmitriev, A. A. Senin, A. A. Soldatov and A. N. Yudin, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 165304 (2015).
 5. V. P. Mineev, *Low Temp. Phys.* **177**, 48 (2014).
 6. G. E. Volovik, *Pis'ma v ZhETF* **115**, 306 (2022).
 7. S. Autti, V. V. Dmitriev, J. T. Mäkinen, A. A. Soldatov, G. E. Volovik, A. N. Yudin, V. V. Zavjalov, and V. B. Eltsov, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 255301 (2016).
 8. В. В. Дмитриев, М. С. Кутузов, А. А. Солдатов, Е. В. Суровцев, А. Н. Юдин, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 820 (2020).
 9. V. V. Dmitriev, M. S. Kutuzov, A. A. Soldatov, and A. N. Yudin, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 265301 (2021).
 10. Е. В. Суровцев, *ЖЭТФ*, **160**, 553 (2021).
 11. A. Golov, D. A. Geller, and J. M. Parpia, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3492 (1999).
 12. M. J. McKenna, T. Slawcki, and J. D. Maynard, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 1878 (1991).
 13. H. R. Brand and H. Pleiner, *Phys. Rev. B* **102**, 094510 (2020).
 14. И. А. Фомин, *ЖЭТФ* **154**, 1034 (2018).

Одномерный мир как площадка для исследования киральных эффектов

З. В. Хайдуков¹⁾

Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

Институт теоретической и экспериментальной физики
Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 117259 Москва, Россия

Поступила в редакцию 5 августа 2022 г.

После переработки 17 октября 2022 г.

Принята к публикации 17 октября 2022 г.

Исследован аналог эффекта разделения киральностей и кирального магнитного эффекта в случае фермионов в одном пространственном измерении. Показана их связь с аксиальной аномалией в методе эпсилон раздвижки. Вычислен большой канонический потенциал для киральных фермионов в одном пространственном измерении в присутствии кирального химического потенциала.

DOI: 10.31857/S12345678222013X, EDN: lzpdxs

1. Введение. Киральные эффекты – это общее название, описывающее возникновение недиссипативных токов в среде в термодинамическом равновесии. Наиболее известными примерами в 4-измерениях являются эффект разделения киральностей [1, 2], киральный магнитный [3] и киральный вихревой эффекты [4]. Значительное внимание уделяется взаимосвязи между эффектами и аномалиями в квантовой теории поля (КТП). В течение долгого времени предполагалось, что все киральные эффекты связаны с инфракрасной областью, и поэтому могут быть вычислены в рамках формализма КТП, но без необходимости регуляризации. Впоследствии было указано на неполноту таких аргументов [6, 5] и на отсутствие равновесного кирального магнитного эффекта. Чуть раньше было предложено объяснение универсальности экспериментального соотношения между током в эффективно одномерных тонких проводниках и приложенным напряжением [7]. Из тех же самых аргументов получалось выражение для кирального магнитного эффекта [7], что с учетом [6, 5] ставит подобные выводы под сомнение.

В рамках настоящей статьи будет предложен простой подход, который позволит изучить основные черты киральных эффектов в термодинамическом равновесии. Мы сосредоточимся на 2-ух пространственно-временных измерениях. Все результаты будут получены в хорошо регуляризованной теории, что позволит нам в рамках единого формализма изучить все особенности и все существенные

отличия между эффектом разделения киральностей (ЭРК) и киральным эффектом (КЭ) – аналогом кирального магнитного эффекта, а также взаимосвязь эффектов с аномалией.

2. Киральные эффекты в одном пространственном измерении в теории без регуляризации. В двух пространственно-временных измерениях существует связь между векторным и аксиальным токами:

$$j^{a,\nu} = \epsilon^{\nu\mu} j_{\nu,\mu}. \quad (1)$$

Мы используем следующие обозначения:

$$\gamma^0 = \sigma^y, \quad \gamma^x = i\sigma^x, \quad \gamma^5 = -\gamma^0\gamma^x = \sigma^z, \quad (2)$$

при ненулевой плотности зарядов ($n_{v,a} = \langle \langle j_{v,a}^0 \rangle \rangle_{T,\mu_{v,a}}$) можно получить:

$$j_{v,a}^x = \pm n_{a,v}, \quad (3)$$

j_v^x – аналог кирального магнитного эффекта, j_a^x – аналог эффекта разделения киральностей. С точки зрения классической теории все, что нам нужно, – просто создать ненулевую плотность соответствующего заряда. В квантовом случае нам необходимо получить все результаты в хорошо регуляризованной теории.

3. Связь между эффектом разделения киральностей и аномалией. Аксиальная аномалия в двух пространственно-временных измерениях подразумевает точное соотношение между дивергенцией аксиального тока и напряженностью калибровочного поля:

$$\partial_\mu j^{\mu 5} = \frac{e}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu} F_{\mu\nu}, \quad \mu, \nu = 0, 1. \quad (4)$$

¹⁾e-mail: khaidukov.zv@phystech.edu

Соотношение (4) может пониматься как операторное. Чтобы проследить возникновение аксиальной аномалии, нам придется прибегнуть к регуляризации, которая сохраняет калибровочную инвариантность и связывает аномалию с физикой на малых расстояниях [8]. Запишем

$$j^{5\mu} = \bar{\psi} \left(x + \frac{\epsilon}{2} \right) \gamma^\mu \gamma^5 W \left(x + \frac{\epsilon}{2}, x - \frac{\epsilon}{2} \right) \psi \left(x - \frac{\epsilon}{2} \right),$$

$$W \left(x + \frac{\epsilon}{2}, x - \frac{\epsilon}{2} \right) = \exp \left(-ie \int_{x-\frac{\epsilon}{2}}^{x+\frac{\epsilon}{2}} A_\nu(y) dy^\nu \right).$$

В формализме реального времени выражение для пропагатора фермионов в безмассовом случае имеет вид [9]:

$$S_F(p) = p_i \gamma^i \left(\frac{i}{p^2 + i0^+} - 2\pi \delta(p^2) (n_f(|p_0| - \text{sign}(p_0)\mu)) \right). \quad (5)$$

Подставляем пропагатор в выражение для тока и получаем два вклада:

$$j_{IR}^{5x} = -\text{Tr} \int \frac{d^2 p}{2\pi} \gamma^x \gamma^5 p_i \gamma^i \delta(p^2) n_f(E(p_0)),$$

$$E(p_0) = |p_0| - \text{sign}(p_0)\mu,$$

$$j_{IR}^{5x} = \text{Tr} \int \frac{dp}{2\pi} (n_f(|p| - \mu) - (n_f(|p| + \mu))) = \frac{\mu}{\pi}.$$

Инфракрасная часть отвечает за ЭРК и не содержит расходимости. Запишем дивергенцию аксиального тока в массивном случае:

$$\partial_\mu j^{5\mu}(x, \epsilon) = -ie j^{5\mu}(x, \epsilon) \epsilon^\nu F_{\mu\nu} + M(x, \epsilon), \quad (6)$$

$$M(x, \epsilon) =$$

$$= 2im \bar{\psi} \left(x + \frac{\epsilon}{2} \right) \gamma^5 W \left(x + \frac{\epsilon}{2}, x - \frac{\epsilon}{2} \right) \psi \left(x - \frac{\epsilon}{2} \right), \quad (7)$$

$$I = -j^{5\mu} \epsilon^\nu = - \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \gamma^\mu \gamma^5 \epsilon^\nu \exp(ip \cdot \epsilon) G(p), \quad (8)$$

$$I = \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} i \frac{\partial}{\partial p_\nu} \exp(ip \cdot \epsilon) G(p), \quad (9)$$

$$I = - \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} i \exp(ip \cdot \epsilon) \frac{\partial}{\partial p_\nu} G(p). \quad (10)$$

Мы можем сделать поворот Вика и свести интеграл к интегралу по бесконечно удаленной 1-сфере, воспользуемся:

$$\int d^2 p \frac{\partial}{\partial p_\nu} \rightarrow \oint dS^\nu = \oint |p| d\Omega \frac{p^\nu}{|p|}, \quad (11)$$

$$p^\nu p_\alpha \rightarrow \frac{\delta_\alpha^\nu}{2} p^2. \quad (12)$$

Здесь $d\Omega$ – телесный угол, который равен 2π . С учетом выражения для пропагатора получаем:

$$\partial_\mu j^{5\mu} = \frac{e}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu} F_{\mu\nu} + 2im \bar{\psi}(x) \gamma^5 \psi(x). \quad (13)$$

Необходимо отметить, что с точки зрения метода эpsilon-раздвижки – аномалия существенно ультрафиолетовый эффект и сводится к потоку через бесконечно удаленную поверхность, а вот КЭ связан с инфракрасным поведением в теории²⁾. В рамках этого же рассмотрения очевидно, что распределение Ферми не влияет на коэффициент в аномалии, поскольку обращается в нуль при интегрировании. Из всего вышесказанного следует, что влияние взаимодействия на этих масштабах может быть различным. Например, при введении массы фермионов аномалия не изменится, а ЭРК получит поправку $n_f(|p| - \mu) \rightarrow n_f(\sqrt{p^2 + m^2} - \mu)$. Подобное рассмотрение дает возможность привести примеры перенормируемых теорий, в которых ЭРК получает поправки из-за взаимодействия.

4. Киральный эффект в теории с регуляризацией. Вопрос существования кирального эффекта является более сложным, в связи с проблемами регуляризации теории (см. ниже). Нас будут интересовать два вопроса: можно ли из выражения для аксиальной аномалии получить выражение для тока и может ли этот ток существовать в равновесии в хорошо определенной теории? Чтобы ответить на первый вопрос, рассмотрим действие [11]:

$$S = \int dt dx \bar{\psi}(x, t) i \gamma^\mu (\partial_\mu - ie A_\mu - b_\mu^5 \gamma^5) \psi(x, t).$$

Сделаем преобразование:

$$\psi \rightarrow \exp(-ids\theta(x)\gamma^5/2)\psi, \quad (14)$$

$$\bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi} \exp(-ids\theta(x)\gamma^5/2), \quad (15)$$

$s \in [0, 1]$, $\theta(x) = 2b_\mu x_\mu$, ds – дифференциальный параметр, в бесконечно малом калибровочном киральном преобразовании, параметризующий бесконечную последовательность таких преобразований. Тогда в функциональном интеграле после замены переменных мы получим:

$$Z = \int D\psi^+ D\psi J \exp(-S(\psi^+, \psi)), \quad (16)$$

$$J = \det(U^{-2}) = e^{\ln(\det U^{-2})}. \quad (17)$$

В итоге:

$$J = \exp \left(-ids \int d^2 x \frac{e}{4\pi} \theta(x) \epsilon^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \right) \quad (18)$$

²⁾ Без введения epsilon-раздвижки мы бы столкнулись с расходимостью, которая описана в [10].

и получаем действие:

$$S = \int_0^1 ds \int d^2x \frac{e\theta(x)}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu} F_{\mu\nu}. \quad (19)$$

Преобразуем:

$$S = \int d^2x \epsilon^{\nu\mu} \frac{e\partial_\mu\theta(x)}{2\pi} A_\nu, \quad (20)$$

что приводит к току:

$$j^\nu = \frac{\epsilon^{\nu\mu} e}{2\pi} \partial_\mu\theta(x). \quad (21)$$

В том случае, если $\theta(x) = 2\mu_5 t$, мы приходим к выражению для КЭ

$$j^x = -\frac{e\mu_5}{\pi} \quad (22)$$

и плотности аксиального заряда

$$j^{50} = -\frac{e\mu_5}{\pi}. \quad (23)$$

Формально, можно сказать, что плотность аксиального заряда индуцировала векторный ток, но механизм, приведенный выше, этого не подразумевает, хотя b_0^5 , на первый взгляд, играет роль химического потенциала. Рассмотрим теперь термодинамическое равновесие и введем химический потенциал согласно стандартным правилам

$$H_D \rightarrow H_f = H_D + \mu_a Q_a, \quad (24)$$

$$H_f = -\psi^+ \sigma^z \left(\frac{\partial}{\partial x} - \mu_5 \right) + \gamma^0 m. \quad (25)$$

Обыкновенно химический потенциал вводится по отношению к сохраняющимся зарядам, что подразумевает требование $m = 0$, но мы обсудим оба случая. Начнем с $m = 0$, тогда заряды левых и правых фермионов сохраняются по отдельности:

$$Z = \int D\psi^+ D\psi \exp\left(-\int d\tau dx \psi^+ (-\partial_\tau + H_f) \psi\right),$$

$$\Omega = -T \ln Z.$$

Сосредоточимся на вычислениях для левых фермионов, что приводит к потенциалу вида:

$$\Omega_L = -T \sum_n \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{2\pi} \ln \left(-\frac{i}{T} (-i\omega_n - p - \mu_l) \right). \quad (26)$$

Пользуясь симметричностью спектра относительно нуля, мы можем записать

$$\begin{aligned} \Omega_L = -T \int_0^\infty \frac{dp}{2\pi} \left(p + T \ln \left(1 + \exp \left(\frac{-p - \mu_l}{T} \right) \right) \right) + \\ + T \ln \left(1 + \exp \left(\frac{-p + \mu_l}{T} \right) \right) = -\frac{\mu_l^2}{4\pi^2} - \frac{\pi T^2}{12}. \end{aligned} \quad (27)$$

Но в случае массивных частиц, проделывая сходные манипуляции, мы бы пришли к выражению:

$$\Omega = -T \int_{-\infty}^\infty \frac{dp}{2\pi} \left(\frac{E_p}{2} + 2T \ln \left(1 + \exp \left(\frac{-E_p}{T} \right) \right) \right), \quad (28)$$

$$E_p = \sqrt{(p - \mu_5)^2 + m^2}.$$

В этом случае мы не можем выделить вакуумный вклад и сталкиваемся с проблемой термодинамического описания, в частности с вычислением интеграла в (28), который является расходящимся. Это также приводит к проблемам с некоторыми регуляризациями, например, Паулли-Вилларса, поскольку духовые степени свободы обладают массой, а значит мы не можем привести стандартный аргумент о том, что их вклад подавлен по функции распределения $n_F(\frac{M}{T})$, $M \rightarrow \infty$.

Получим выражение для КЭ при помощи метода эpsilon раздвижки в безмассовом случае. Введем конечный размер системы L (в конце положим $L \rightarrow \infty$) и периодические граничные условия, это позволит нам понять происхождение расходимостей. Мы знаем спектр Гамильтониана, а также, что $[Q_{L/R}, H] = 0$. При конечных температурах и химическом потенциале нам необходимо вычислить суммы:

$$Q_l = \sum_{k=-\infty}^\infty n_f \left(\left(k + \frac{1}{2} \right) \frac{2\pi}{L} - \mu_l \right), \quad (29)$$

$$Q_R = \sum_{k=-\infty}^\infty n_f \left(-\left(k + \frac{1}{2} \right) \frac{2\pi}{L} + \mu_r \right). \quad (30)$$

Сосредоточимся на левом заряде. Используем для отрицательных энергий свойство $n_F(-E - \mu) = 1 - n_F(E + \mu)$, тогда сумма распадается на хорошо определенную сходящуюся часть и вакуумный вклад:

$$Q_l = \sum_{-\infty}^{-1} 1 + \sum_{k=0}^\infty (n_f(E_k - \mu_l) - n_f(E_k + \mu_l)). \quad (31)$$

Просуммируем бесконечную сумму из единиц. Введем регулятор, сохраняющий калибровочную инвариантность [12]:

$$Q_{L,\text{vac}} = \sum_{-\infty}^{-1} \exp \left(-i\epsilon \left(\left(k + \frac{1}{2} \right) \frac{2\pi}{L} + A_x \right) \right). \quad (32)$$

В пределе $\epsilon \rightarrow 0$ мы получаем выражение

$$Q_{L,\text{vac}} = \frac{iL}{2\pi\epsilon} + \frac{L}{2\pi} A_x + O(\epsilon). \quad (33)$$

Аналогично для правых:

$$Q_{R,\text{vac}} = \frac{-iL}{2\pi\epsilon} - \frac{L}{2\pi} A_x + O(\epsilon). \quad (34)$$

Из вакуумной части мы можем получить выражение для аномалии ($Q = Q_L + Q_R, Q_5 = Q_L - Q_R = = 2\frac{\mu}{2\pi}A_x$). Возникает искушение учесть влияние калибровочного поля и на распределение Ферми. Делаем сдвигку в импульсе $p - A_x$ и проделываем вычисления для изменения в левом заряде. В таком случае в термальной части также происходит изменение заряда. Но данный пример подсказывает нам, что мы просто дважды учли один и тот же вклад. Причина этой ошибки очень проста, термодинамические потенциалы строятся по отношению к основному состоянию, а значит, возникает вопрос: относительно какого основного состояния мы отсчитываем наши возбужденные уровни, заряды и т.д.? Если мы рассматриваем внешнее поле как адиабатическое, а переход как череду равновесных состояний, то все параметры системы измеряются относительно исходного вакуума, а значит, мы можем рассмотреть этот процесс как процесс, влияющий только на распределение Ферми, поскольку вакуумный вклад мы не меняем. Второй способ – переход сначала в новое вакуумное состояние, а уже потом построение термодинамики (такое описание повлияет, например, на начало отсчета температуры). В невзаимодействующем безмассовом случае результаты совпадают.

Что касается тока, то мы можем записать

$$\langle\langle j^x \rangle\rangle_{T, \mu_{L,R}} = \langle\langle q_l \rangle\rangle_{T, \mu_l} - \langle\langle q_r \rangle\rangle_{T, \mu_r}, \quad (35)$$

что с учетом выражения для большого канонического потенциала приводит к плотности тока КЭ:

$$\langle\langle j^x \rangle\rangle_{T, \mu_{L,R}} = \frac{\mu_l}{2\pi} - \frac{\mu_r}{2\pi} = \frac{\mu_5}{\pi}. \quad (36)$$

5. Физические аргументы. Мы привели доказательства существования КЭ в равновесии, но без учета влияния самого тока. Мы продемонстрировали, что результат может зависеть от регуляризации, а значит, нам необходимы физические аргументы для ответа на вопрос о существовании равновесного КЭ. Если рассматривать уравнения для электрического поля с учетом выражения для тета-члена, то мы получим:

$$\partial_0 F^{0x} = j^x. \quad (37)$$

Это означает, что система не может быть стационарной, поскольку уже на уравнениях движения с учетом квантовых поправок возникает неограниченный рост электрического поля, а значит, в случае двух пространственно-временных измерений мы можем говорить о КЭ только как о неравновесном эффекте. Для ЭРК подобные аргументы не могут быть приведены, а значит он может существовать в равно-

весии. Если же система эффективно пространственно одномерна, то подобная аргументация неприменима, поскольку электрический ток индуцирует лишь магнитное поле, но в этом случае могут возникать другие проблемы [13, 5, 6].

6. Заключение. Было показано, что мир с одним пространственным измерением представляет из себя прекрасную площадку для изучения киральных эффектов. Были вычислены ЭРК и КЭ в теориях с регуляризацией при помощи метода эpsilon-раздвижки. В обоих случаях была продемонстрирована связь эффектов с аксиальной аномалией, показано, что в случае ЭРК при учете массы выражение для тока изменяется, а для аномалии нет. Был получен большой термодинамический потенциал для теории с киральными фермионами и киральным потенциалом, показана проблема с вычислением в массивном случае и как следствие проблема с регуляризацией массивной теории и использование некоторых регуляризаций для сокращения вакуумного вклада. Эта проблема не возникает в случае обыкновенного векторного потенциала. Например, в регуляризации Паули–Вилларса духовые степени свободы не вносят вклад в термодинамическую область из-за подавления в термальных распределениях по массе. Все эти наблюдения начинают играть существенную роль при учете взаимодействия, поскольку поведение систем с векторным и аксиальным потенциалами будет различным.

Крайне интересным представляется вопрос о влиянии взаимодействия на рассматриваемую задачу. Проводимость в эксперименте с тонким проволочками мало зависит от взаимодействия, и можно было бы предположить, что она выражается через топологически защищенную величину в импульсном пространстве [14–17]. Вполне возможно, что она может описываться по аналогии с Холловской проводимостью [18].

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда # 21-12-00237.

1. M. A. Metlitski and A. R. Zhitnitsky, Phys. Rev. D **72**, 045011 (2006).
2. M. Pühr and P. V. Buividovich, Phys. Rev. Lett. **118**(19), 192003 (2017); arXiv: 1611.07263 [hep-lat].
3. K. Fukushima, D. E. Kharzeev, and H. J. Warringa, Phys. Rev. D **78**, 074033 (2008).
4. A. Vilenkin, Phys. Rev. D **21**, 2260 (1980).
5. M. A. Zubkov, Phys. Rev. D **93**(10), 105036 (2016); arXiv:1605.08724 [hep-ph].

6. P. V. Buividovich, Nucl. Phys. A **925**, 218 (2014); doi:10.1016/j.nuclphysa.2014.02.022; arXiv:1312.1843 [hep-lat].
7. A. Alekseev, V. Cheianov, and J. Froehlich, Phys. Rev. Lett. **81**, 3503 (1998); arXiv:cond-mat/9803346.
8. B. L. Ioffe, Int. J. Mod. Phys. A **21**, 6249 (2006); arXiv:hep-ph/0611026.
9. M. Laine and A. Vuorinen, arxiv.org/abs/1701.01554.
10. Z. V. Khaidukov and M. A. Zubkov, Phys. Rev. D **95**, 074502 (2017); arXiv: 1701.03368.
11. A. A. Zyuzin and A. A. Burkov, Phys. Rev. B **86**, 115133 (2012).
12. М. А. Шифман, УФН **157**, 561 (1989).
13. Z. V. Khaidukov, V. P. Kirilin, A. V. Sadofyev, and V. I. Zakharov, Nucl. Phys. B **934**, 521 (2018); e-Print: 1307.0138 [hep-th].
14. G. E. Volovik, *The Universe in a Helium Droplet*, Clarendon Press, Oxford (2003).
15. G. E. Volovik, Lect. Notes Phys. **870**, 343 (2013); arXiv:1111.4627 [hep-ph].
16. M. A. Zubkov, Ann. Physics **373**, 298 (2016); arXiv:1603.03665 [cond-mat.mes-hall].
17. M. A. Zubkov, Phys. Rev. D **93**(10), 105036 (2016); arXiv:1605.08724 [hep-ph].
18. C. X. Zhang and M. A. Zubkov, J. Phys. A: Math. Theor. **53**, 195002 (2020).

Содержание

Том 116, выпуск 9

Поля, частицы, ядра

Volovik G.E. Particle creation: Schwinger + Unruh + Hawking 577

Артемьев А.А., Белавин А.А. Пятиточечные корреляционные числа в минимальной Лиувилевской гравитации 579

Поляруш А.Ю., Акименко С.А., Артамонов А.В., Бычков В.Н., Горин А.М., Гуцин Е.Н., Донсков С.В., Дук В.А., Залиханов Б.Ж., Инякин А.В., Кекелидзе Г.Д., Колосов В.Н., Кравцов В.И., Куденко Ю.Г., Кулик А.В., Куршецов В.Ф., Лишин В.А., Лысан В.М., Медынский М.В., Образцов В.Ф., Охотников А.В., Поляков В.А., Романовский В.И., Рыкалин В.И., Садовский А.С., Самойленко В.Д., Тюрин И.С., Уваров В.А., Филин А.П., Филиппов С.Н., Хаустов Г.В., Холоденко С.А., Худяков А.А., Чикилев О.Г., Ющенко О.П. Измерение T -нечетной корреляции в радиационном распаде $K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu_e \gamma$ с помощью установки ОКА 586

Оптика, лазерная физика

Бобров М.А., Блохин С.А., Малеев Н.А., Кузьменков А.Г., Блохин А.А., Васильев А.П., Гусева Ю.А., Рахлин М.В., Галимов А.И., Серов Ю.М., Трошков С.И., Устинов В.М., Торопов А.А. Цилиндрические микрорезонаторы с квантовыми точками InAs/GaAs – моделирование и анализ оптических характеристик 592

Бункин А.Ф., Давыдов М.А., Федоров А.Н., Уваров О.В. Вынужденное рассеяние лазерного излучения в водной суспензии стеклянных микросфер 599

Конденсированное состояние

Зюзин А.Ю. Сверхпроводимость в разбавленной системе узлов с сильным межэлектронным притяжением 603

Зиновьев В.А., Зиновьева А.Ф., Володин В.А., Гутаковский А.К., Дерябин А.С., Крупин А.Ю., Кулик Л.В., Живулько В.Д., Мудрый А.В., Двуреченский А.В. Синтез эпитаксиальных структур, содержащих двумерные слои Si, встроенные в диэлектрическую матрицу CaF_2 608

Shorikov A.O. Theoretical modeling of high spin to low spin transition and structural stability under pressure in CaFeO_3 614

Ткаченко О.А., Ткаченко В.А., Бакшеев Д.Г., Сушков О.П. Диаграммы Ванье для полупроводникового искусственного графена 616

Быков А.А., Стрыгин И.С., Родякина Е.Е., Бакаров А.К. Магнето-межподзонные осцилляции в условиях перекрывающихся зон Ландау 621

Квантовая информатика

Томилин В.А., Ильичев Л.В. Квантовая обратная связь вне контролируемой системы 628

Содержание

Том 116, выпуск 10

Поля, частицы, ядра

Родкин Д.М., Чувильский Ю.М. Особенности альфа-распада высоковозбужденных состояний ядра ^{10}Be 637

Серебров А.П., Самойлов Р.М., Чайковский М.Е., Жеребцов О.М. Результат эксперимента Нейтрино-4 и космологические ограничения на стерильные нейтрино (Миниобзор) 644

Оптика, лазерная физика

Румянцев Б.В., Пушкин А.В., Михеев К.Е., Потемкин Ф.В. Влияние длины и давления газовой струи на процесс генерации оптических гармоник фемтосекундным излучением лазерной системы на кристалле Fe:ZnSe с длиной волны 4.5 мкм 659

Прудковский П.А. Моды Шмидта и временная волновая функция широкополосного бифотонного поля 667

Конденсированное состояние

Мазилкин А.А., Протасова С.Г., Страумал Б.Б., Дружинин А.В. Автоколебания крутящего момента при деформации кручением под высоким давлением сплава NdFeB 675

Клумов Б.А. Двумерная система Юкавы: поведение дефектов вблизи области плавления 681

Садаков А.В., Муратов А.В., Кузьмичев С.А., Соболевский О.А., Массалимов Б.И., Прищепа А.Р., Михайлов В.М., Перваков К.С., Власенко В.А., Кузьмичева Т.Е. Определение сверхпроводящего параметра порядка слабо недодопированных пниктидов $\text{BaFe}_{1.92}\text{Ni}_{0.08}\text{As}_2$ двумя взаимодополняющими методами 686

Атанова А.В., Хмеленин Д.Н., Жигалина О.М. Влияние кристаллизации на 3D структуру пор в сегнетоэлектрических пленках PZT 694

Кузьмичев С.А., Перваков К.С., Власенко В.А., Дегтяренко А.Ю., Гаврилкин С.Ю., Кузьмичева Т.Е. Андреевская спектроскопия стехиометрического сверхпроводящего пниктида $\text{EuCsFe}_4\text{As}_4$ 702

Сбойчаков А.О., Рожков А.В., Рахманов А.Л. Распределение заряда и волна спиновой плотности в подкрученном двухслойном графене при магическом угле подкрутки 708

Артюх А.А., Чернозатонский Л.А. Механические свойства алмазоподобных муаровых пленок 716

Суровцев Е.В. Звуковые колебания в полярной фазе сверхтекучего ^3He в нематическом аэрогеле 724

Методы теоретической физики

Хайдуков З.В. Одномерный мир как площадка для исследования киральных эффектов 733

