

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 115

Выпуск 5

10 марта 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>

Ограничения на популяцию космических лучей в радиогало галактики M87 по данным гамма-наблюдений

Б. А. Низамов⁺¹⁾, М. С. Пширков^{+*×}

⁺Государственный астрономический институт им. П. К. Штернберга, МГУ им. М. В. Ломоносова, 119234 Москва, Россия

^{*}Институт ядерных исследований РАН, 117312 Москва, Россия

[×]Пушкинская радиоастрономическая обсерватория Астрокосмический центр Физического института Академии Наук, 142290 Пушкино, Россия

Поступила в редакцию 20 декабря 2021 г.

После переработки 31 января 2022 г.

Принята к публикации 31 января 2022 г.

В этой статье мы представляем результаты поиска протяженного высокоэнергетического излучения вокруг M87 – центральной галактики в скоплении Девы. Галактика M87 содержит очень тяжелую сверхмассивную черную дыру, $M_{BH} > 4 \cdot 10^9 M_\odot$, и в последние 100 млн. лет переживает период повышенной активности, что привело к образованию полостей, которые являются заметными радио- и рентгеновскими источниками. Мы провели поиск в данных Fermi-LAT за 13 лет в трех энергетических интервалах: 0.1–1, 1–10 и 10–100 ГэВ. Ни в одном из интервалов не было обнаружено статистически значимого протяженного излучения, со слабым признаком сигнала ($\sim 2.5\sigma$) в последнем интервале (10–100 ГэВ). Мы использовали гамма-наблюдения, чтобы установить пределы на популяцию космических лучей в радиопузырях, ограничив их долю X относительно тепловой энергии горячего газа. В зависимости от значения спектрального индекса, для электронов $X_e < (0.1–0.2)$, протоны ограничены на уровне $X_p < (0.2–0.5)$. Эти результаты подтверждают, что в смысле вклада в полную энергию космические лучи являются второстепенным компонентом радиопузырей, а основная доля энергии сосредоточена в горячем газе.

DOI: 10.31857/S1234567822050019

1. Введение. Мощные астрофизические истечения вещества взаимодействуют с окружающей средой и раздувают пузыри, наполненные горячим разреженным газом и космическими лучами (КЛ), в конечном итоге передавая энергию истечений среде. В случае внегалактических источников – активных ядер галактик (АЯГ) – это явление наблюдательно проявляется в виде полостей вокруг релятивистских струй, запущенных активным ядром; при этом сама струя в одних случаях уже прекратила активность, а в других активна до сих пор. Такие пузыри наблюдались в большом количестве источников [1–4], обычно в радио- и рентгеновском диапазонах. Изучение этих пузырей очень важно, поскольку может помочь уточнить наше понимание процессов взаимодействия джетов АЯГ с окружающей средой и оценить мощность джетов, используя пузыри в качестве калориметров [5]. Наблюдения на более высоких энергиях, в диапазоне энергий гамма-лучей, также могут быть очень ценными, позволяя исследовать не только лептонную, но и адронную компоненту КЛ, заполняющих пузыри.

К сожалению, ограниченное угловое разрешение²⁾ и низкая статистика в высокоэнергетическом диапазоне делают в настоящее время такие наблюдения чрезвычайно трудными. Есть два исключения: первое – это галактика Cen A (NGC 5128), принадлежащая к типу I по Фанарову–Райли (FR I). Ее близость к Земле ($D = 4.7$ Мпк) и большая протяженность пузырей ($l = 600$ кпк, соответствует угловому размеру $\theta = 10^\circ$) позволили обнаружить их как протяженные объекты с помощью наблюдений Fermi-LAT [6]. Наблюдения гамма-излучения указывают на наличие значительной популяции релятивистских электронов, которые заполняют пузыри и испытывают обратное комптоновское (ОК) рассеяние на фотонах реликтового излучения и внегалактического фонового света с возможным дополнительным вкладом от протонов КЛ, взаимодействующих с диффузной средой пузырей [7, 8]. Также гамма-излучение было обнаружено от пузырей галактики For A (NGC 1316, $D = 18.6$ Мпс, тип FR I/FR II) [9]. Это излучение

¹⁾e-mail: nizamov@physics.msu.ru

²⁾Угловое разрешение Fermi-LAT составляет около нескольких градусов при энергии 100 МэВ, $\sim 1^\circ$ на энергии 1 ГэВ и $\sim 0.2^\circ$ на энергии > 10 ГэВ.

может быть смешанного лепто-адронного происхождения [9] или чисто лептонным [10].

Другим возможным кандидатом на подобное обнаружение является галактика М87. Расположенная на расстоянии $D = 16.7$ Мпк недалеко от центра скопления Девы она обладает пузырями, которые интенсивно наблюдались в радио- и рентгеновских лучах (например, [11–15]). Они раздулись из-за активности АЯГ в последние $10^7 - 10^8$ лет [11]. Между М87 и галактиками Сеп А и Фор А существует большая разница – последние находятся в среде относительно низкой плотности, в то время как первая расположена близко к центру массивного скопления галактик Девы, где плотность среды гораздо выше.

Идея использования гамма-излучения от протяженного источника вокруг М87 для исследования физических свойств гало, особенно магнитных полей, была впервые предложена в работе [16]. Размер пузырей сравнительно мал, $l \sim 30$ кпк, на расстоянии М87 это соответствует 0.1° . Столь небольшой угловой размер делает обнаружение гало в гамма-лучах чрезвычайно трудным. Сильной стороной гамма-лучей является их способность ограничивать протонную компоненту КЛ, что гораздо сложнее сделать другими способами. Кроме того, релятивистские электроны могут быть обнаружены благодаря ОК рассеянию, что в свою очередь может стать полезным дополнением к обнаружению синхротронного излучения в радио: хотя гамма-наблюдения менее чувствительны, чем радио, поле фоновых фотонов, которые участвуют в рассеянии, может быть описано гораздо точнее, чем магнитное поле, тем самым эта важная неопределенность устраняется.

В данной работе мы использовали данные, собранные Fermi-LAT, с целью ограничения протяженного компонента. Мы представляем результаты этого поиска в 13-летних данных Fermi-LAT на энергиях выше 100 МэВ и накладываем ограничения на популяцию КЛ в пузырях.

2. Данные и анализ данных. В нашем анализе мы использовали данные, собранные за 157 месяцев наблюдений Fermi-LAT с 4 августа 2008 г. (MET = 239557417 с) по 5 сентября 2021 г. (MET = 652552934 с). Мы выбрали события, относящиеся к классу “SOURCE” (реконструкция Pass 8R3), с энергией больше 100 МэВ, а также с обычным ограничением на “качество” события, а именно, что зенитный угол должен быть меньше 90° . Анализ проводился в программных пакетах *Fermitools*³⁾ и *Fermipy* [17].

В качестве области интереса (ОИ) мы взяли круг радиусом 15° с центром в М87 ($\alpha_{J2000} = 187^\circ.706$, $\delta_{J2000} = 12^\circ.391$).

Данные были проанализированы с помощью метода бинированного максимального правдоподобия [18], реализованного в утилите *gtlike*, в котором две модельные гипотезы сравнивались по их максимальным правдоподобиям относительно наблюдаемого распределения фотонов. Нулевая гипотеза не включает протяженный источник, альтернативная добавляет его к списку источников нулевой гипотезы.

Модель включает 239 источников из каталога 4FGL-DR2 [19], последнюю модель галактической межзвездной эмиссии *gll_iem_v07.fits* и изотропный спектральный шаблон *iso_P8R3_SOURCE_V3_v1.txt*⁴⁾.

Галактика М87 была смоделирована как точечный источник. Наконец, в модель источника были вставлены пространственные шаблоны для пузырей. Мы использовали две альтернативные модели. Во-первых, шаблон, полученный из NRAO VLA Sky Survey [20] с помощью ресурса *SkyView* [21]. В этом шаблоне структура гамма-источника близка структуре радиоисточника, что соответствует ситуации, когда радио- и гамма-излучение рождаются в одних и тех же областях. Это может быть так, если гамма-излучение производится ОК рассеянием фоновых фотонов и если увеличение радиояркости в горячих точках не может быть связано только с усилением магнитного поля. Вторым принятым шаблоном была однородная форма, имитирующая форму пузырей, взятых из NVSS. Такой шаблон естественно возникает в сценариях, где КЛ распределены более или менее равномерно в объеме пузырей и особенно актуален для адронных моделей.

Спектры точечного источника М87 и пузырей описываются простой моделью, основанной на степенном законе. Значимость обнаружения гамма-сигнала от протяженного источника оценивалась с помощью статистики отношения правдоподобия:

$$TS = -2 \ln \frac{L_{\max,0}}{L_{\max,1}}, \quad (1)$$

где $L_{\max,0}$ и $L_{\max,1}$ – значения максимального правдоподобия, полученные из наблюдаемых данных при использовании нулевой и альтернативной гипотез соответственно. Если гипотеза верна, то $\sqrt{TS}$ приблизительно равно значимости обнаружения источника.

Для того чтобы оценить потенциальную чувствительность наших поисков, мы провели моделирова-

³⁾<http://fermi.gsfc.nasa.gov/ssc/data/analysis/software/>.

⁴⁾<http://fermi.gsfc.nasa.gov/ssc/data/access/lat/BackgroundModels.html>.

ние с помощью утилиты *gtobssim*. Мы смоделировали события для изотропного и галактического фона, ярчайших источников (всего 185 в 15°) и M87 либо как точечного источника с потоком, равным значению из каталога 4FGL-DR2, либо как протяженно-го источника с тем же потоком, который распределен по одному из двух вышеупомянутых шаблонов. Этот подход позволяет проверить предельную чувствительность: какова будет разница в логарифме правдоподобия между моделями только с точечным источником и точечным плюс протяженным источниками, если весь поток действительно исходит от протяженного источника? Можно ли провести различие между нулевой и альтернативной гипотезами?

3. Результаты. Наш анализ данных гамма-излучения не смог обнаружить протяженные источники в месте расположения M87 ни в одном из трех интервалов (0.1–1, 1–10, 10–100 ГэВ). Только в последнем мы получили некоторые незначительные признаки на уровне значимости 2.5σ ($TS = 6.2$). Отрицательный результат, вероятно, объясняется компактностью гало вокруг M87: его размер составляет всего около 0.1° , а функция рассеяния точки на уровне 68 % при энергии 100 МэВ составляет около 5° . При более высоких энергиях статистика фотонов становится недостаточной. Даже когда мы моделировали M87 как протяженный источник с потоком, взятым из 4FGL, для бинов (0.1–1) и (1–10) ГэВ модель с точечным источником оказалась так же хороша, как и с протяженным. Интересно, что в последнем энергетическом бине, 10–100 ГэВ, эта модель привела к обнаружению на уровне значимости 5.6σ ($TS = 32$). Слабое обнаружение протяженной компоненты на уровне значимости 2σ наблюдалось, когда общий поток в моделировании был поровну разделен между точечным источником и гало. Поскольку протяженный компонент обнаружить не удалось, в дальнейшем мы использовали поток M87 из каталога 4FGL в качестве верхнего предела для потока от гало.

Гамма-наблюдения можно использовать для наложения ограничений на свойства пузырей, такие как напряженность магнитного поля и плотность энергии КЛ. Радионаблюдения показывают, что в пузырях существует популяция релятивистских электронов⁵⁾, которые производят синхротронное излучение. Эта же популяция будет взаимодействовать с фотонами фона с энергией E_{bckg} и производить фотоны более высокой энергии E_γ : $E_\gamma \sim \gamma^2 E_{bckg}$, где

γ – лоренц-фактор релятивистских электронов. В частности, гамма-лучи образуются, когда электроны взаимодействуют с фотонами ближнего ИК-УФ фона, исходящего от M87. В дальнейшем мы будем называть эти фоновые фотоны оптическими.

3.1. Ограничения на магнитные поля. Мы можем исключить определенные значения магнитного поля B , выводя свойства популяции электронов, которая могла бы произвести наблюдаемый радиопоток при фиксированном значении B . Если сигнал от ОК рассеяния от этой популяции выше, чем наблюдаемый поток гамма-излучения, то это значение B может служить нижним пределом на индукцию магнитного поля.

Мы предполагаем, что одна и та же популяция нетепловых электронов производит как синхротронное излучение в магнитном поле, заполняющем пузыри, так и обратное комптоновское излучение из-за присутствия фонового света от галактики. Чтобы сделать теоретическую оценку потока гамма-излучения от пузырей, необходимо знать спектр нетепловых электронов и плотность энергии фонового поля излучения. Спектр электронов можно получить из радионаблюдений синхротронного излучения. Его спектр в диапазоне 100 МГц – 10 ГГц приведен в [22]. Если спектр электронов имеет вид

$$N(E)dE = C_e E^{-\alpha_e} dE \quad [\text{см}^{-3}], \quad (2)$$

тогда энергии нетепловых электронов, создающих синхротронное излучение, находятся в диапазоне [23]:

$$2.5 \cdot 10^2 \left(\frac{\nu_1}{By_1(\alpha_e)} \right)^{1/2} \leq E(\text{эВ}) \leq 2.5 \cdot 10^2 \left(\frac{\nu_2}{By_2(\alpha_e)} \right)^{1/2}, \quad (3)$$

где B – индукция магнитного поля, ν_1 и ν_2 – минимальная и максимальная частоты радиоспектра, y_1 и y_2 – табулированные функции. Эти функции, а также функция $a(\alpha_e)$ (см. ниже) приведены в [23]. Из синхротронного спектра мы можем получить нормировку электронного спектра [23]:

$$C_e = \frac{7.4 \cdot 10^{21} D^2}{a(\alpha_e) B V} \Phi_\nu \left(\frac{\nu}{6.26 \cdot 10^{18} B} \right)^{(\alpha_e-1)/2}, \quad (4)$$

где V – объем, содержащий излучающие частицы, D – расстояние до M87, а Φ_ν – поток синхротронного излучения на частоте ν . Поскольку мы используем данные об излучении, интегрированные по радиогало, мы будем предполагать в этом подразделе,

⁵⁾ В данном контексте под словом электроны мы понимаем как собственно электроны, так и позитроны.

что распределение нетепловых электронов однородно, так что нормировка C_e постоянна во всем гало (это название будем также употреблять для пузырей). Для описания источника оптического излучения мы используем модель точечного источника, тогда плотность лучистой энергии на расстоянии r от центра галактики равна:

$$U_{\text{rad}}(r) = \frac{L}{4\pi r^2 c}, \quad (5)$$

где L – оптическая светимость галактики. Для оценки L мы использовали данные Слоановского цифрового обзора неба (SDSS), поскольку его величины $ugriz$ имеют абсолютную калибровку. В работе [24] сообщается, что данные SDSS сильно недооценивают яркость крупных протяженных источников, поэтому мы использовали исправленные величины из цитируемой работы: $u = 10.98$, $g = 9.42$, $r = 8.61$, $i = 8.16$, $z = 7.86$. Мощность обратного комптоновского излучения в расчете на один электрон равна [25]

$$P_{\text{IC}} = \frac{4}{3} \sigma_T c U_{\text{rad}} \gamma^2 \beta^2, \quad (6)$$

где σ_T – сечение томсоновского рассеяния, γ – лоренц-фактор электрона и $\beta = v/c \approx 1$. Используя наши выражения для плотности энергии излучения и электронов, мы получаем полную мощность обратного комптоновского излучения:

$$\begin{aligned} P_{\text{tot}} &= \iint \frac{4}{3} \sigma_T c \gamma^2 \frac{L}{4\pi r^2 c} C_e(B) E^{-\alpha_e} dV dE = \\ &= \frac{4}{3} \sigma_T \frac{C_e(B)}{(m_e c^2)^2} L R \int E^{2-\alpha_e} dE, \end{aligned} \quad (7)$$

где $R = 35$ кпк – принятый нами радиус гало [11]. Можно видеть, что результат неявно зависит от магнитного поля. Для $B < 1.5$ мкГс результирующий поток энергии гамма-излучения становится больше наблюдаемого от M87 ($F = 1.8 \cdot 10^{-11}$ эрг/см² выше 100 МэВ), поэтому эти значения индукции могут быть исключены.

3.2. Ограничения на содержание нетепловых электронов. Большая часть энергии пузырей является тепловой, т.е. запасенной в кинетической энергии горячего (~ 2 кэВ) разреженного газа [26]. В КЛ заключена меньшая доля энергии пузырей, тем не менее КЛ могут играть важную роль в их эволюции. Эта энергия также может быть определена из гамма-наблюдений.

Для моделей с преобладанием электронов поток гамма-излучения возникает из-за ОК рассеяния на фотонах оптического фона. Мы использовали так называемое изобарическое приближение, в котором

плотность энергии нетепловых электронов составляет постоянную долю X_e от тепловой энергии. В горячем рентгеновском газе концентрации ионов и электронов приблизительно равны, поэтому плотность тепловой энергии равна $\epsilon_{\text{th}} \approx 3n_e kT$, где n_e и T – плотность числа и температура тепловых электронов. Для этих параметров мы используем аналитические модели, полученные в [26]. Пусть $C_e E^{-\alpha_e}$ описывает плотность нетепловых электронов в единице объема на единицу энергии, тогда

$$X_e = \frac{C_e(r) \int E^{1-\alpha_e} dE}{3n_e(r)kT(r)}, \quad (8)$$

где r – расстояние от центра галактики. Полная мощность ОК излучения пузырей составляет [25]:

$$P_{\text{IC}} = \iint \frac{4}{3} \sigma_T c U_{\text{rad}}(r) \frac{C_e}{(m_e c^2)^2} E^{2-\alpha_e} dE dV. \quad (9)$$

Подставляя уравнение (8), получим выражение для X_e :

$$X_e = \frac{4\pi D^2 F(m_e c^2)^2 \int E^{1-\alpha_e} dE}{4\sigma_T L \int E^{2-\alpha_e} dE \int n_e kT dr}, \quad (10)$$

где мы использовали уравнение (5) для U_{rad} . Лоренц-фактор электронов, рассеивающих фотоны от ~ 1 эВ до ~ 100 МэВ, имеет порядок 10^4 . Если использовать это значение как γ_{min} , то X_e не превышает 0.45–0.67 %, когда α_e изменяется от 2.5 до 3.5. Интегрируя плотность тепловой энергии от центра галактики до расстояния 35 кпк (или 7 угловых минут), мы получаем полную энергию $E_{\text{th}} = 4.7 \cdot 10^{59}$ эрг.

3.3. Ограничение на содержание нетепловых протонов. Подобные ограничения могут быть наложены и на адронную компоненту. Гамма-лучи образуются в р-р (и р-He) столкновениях КЛ с кинетической энергией больше порога 280 МэВ с последующим распадом нейтральных пионов. Коэффициент излучения в этом случае

$$q_\gamma(E_\gamma) = 2 \int_{E_\gamma + m_\pi^2 c^4 / 4E_\gamma}^{\infty} \frac{q_\pi(E_\pi)}{\sqrt{E_\pi^2 - m_\pi^2 c^4}} dE_\pi, \quad (11)$$

где $q_\pi(E_\pi)$ – темп рождения π^0 . В приближении дельта-функции энергия пиона, рожденного в р-р столкновении, равна фиксированной доле кинетической энергии протона: $E_\pi = \kappa_\pi E_{\text{kin}}$, где $\kappa_\pi \approx 0.17$ – параметр неупругости. При таком упрощении темп производства пионов может быть записан как

$$q_\pi(E_\pi) = \frac{cn_H}{\kappa_\pi} \sigma_{pp} \left(m_p c^2 + \frac{E_\pi}{\kappa_\pi} \right) N_p \left(m_p c^2 + \frac{E_\pi}{\kappa_\pi} \right), \quad (12)$$

где n_H – плотность протонов в окружающей среде (мы предполагаем $n_H \approx n_e$), σ_{pp} – сечение реакции образования π^0 , $N_p = C_p E^{-\alpha_p}$ – спектр протонов космических лучей. Итак, отношение плотности нетепловых протонов к плотности тепловой энергии равно

$$X_p = \frac{C_p(r) \int E^{1-\alpha_p} dE}{3n_e(r)kT(r)}. \quad (13)$$

Подставляя (12) и (13) в (11), мы получаем

$$Q_\gamma = \int q_\gamma dV = \frac{6cX_p}{\kappa_\pi} \times \\ \times \int \frac{\sigma_{pp}(m_p c^2 + E_\pi/\kappa_\pi)}{\sqrt{E_\pi^2 - m_\pi^2 c^4}} (m_p c^2 + E_\pi/\kappa_\pi)^{-\alpha_p} dE_\pi \times \\ \times \frac{1}{\int E^{-\alpha_p+1} dE} \int 4\pi r^2 n_e(r)^2 kT(r) dr. \quad (14)$$

Опять же мы принимаем $4\pi D^2 F = \int Q_\gamma dE_\gamma$, как если бы поток гамма-излучения M87 был полностью адронного происхождения. Для спектрального индекса протонов от 2.1 до 2.5 мы получаем X_p от 0.23 до 0.53 и полную нетепловую энергию в протонах КЛ $E_{p,\text{non-th}} < (1-2) \cdot 10^{59}$ эрг.

4. Обсуждение и выводы. Результаты показывают, что для $\gamma > 10^4$, $X_e < (4-6) \cdot 10^{-3}$ в зависимости от спектрального индекса распределения релятивистских электронов. Подчеркнем, что значение, полученное в разделе 3.2, относится к популяции электронов, ответственной за гамма-излучение выше 100 МэВ. Как мы показали в разделе 3.2, эти электроны имеют $\gamma > 10^4$ и, вероятно, составляют только часть популяции нетепловых электронов. Оценка вклада всех нетепловых электронов, а не только высокоэнергетической части спектра, гораздо менее определенная. Во-первых, мы не знаем нижнего предела $\gamma_{\min}$, который может быть в диапазоне $10-10^2$ [12]. Во-вторых, спектральный индекс для популяции электронов, который может быть получен из радио наблюдений, довольно крутой, $\alpha_e \sim 3$ [12], но он может быть в основном характерен для областей активного синхротронного излучения. В реалистичном сценарии среда в пузырях неоднородна: большая часть объема заполнена слабым магнитным полем, а эмиссия в основном происходит в филаментах, где поле сильнее; электроны проводят большую часть своей жизни вне этих филаментов, и быстрое истощение популяции высокоэнергетичных электронов внутри филаментов может привести к искажениям в спектре электронов, полученном из радионаблюдений [11].

Учитывая неопределенность в спектре электронов, мы рассчитали X_e для ряда комбинаций спек-

тральных параметров. Результаты приведены в таблице. Видно, что если спектр электронов самых низких энергий не слишком крутой и/или низкоэнергичный порог больше $g > 10^2$, то общая доля электронов $X_e \leq 0.2$.

Таблица 1. Значения X_e для различных комбинаций спектрального индекса и нижнего предела спектра электронов. $\gamma = 10^4$ соответствует минимальной энергии электронов, рассеивающих фоновые фотоны от ~ 1 эВ до ~ 100 МэВ

$\alpha_e \backslash \gamma_{\min}$	10^1	10^2	10^4
2.5	0.14	0.047	0.0045
3.0	1.5	0.20	0.0055

Если взять в качестве характерной оценку для поля в пузырях $B = 10$ мкГс [11, 12] и $X_e = 0.1$, то отношение энергий будет $U_e/U_B < 2.5$, что означает, что электроны могут быть близки к равнораспределению. Однако, как обсуждалось выше, среднее значение напряженности поля может быть ниже, поскольку оценка $B = 10$ мкГс актуальна для филаментов, или X_e может быть выше. Тогда отношение U_e/U_B может достигать $\mathcal{O}(10)$, такое значение действительно предполагается для пузырей мощных галактик FR II [4].

Наши оценки можно сравнить с оценками из радионаблюдений, где полная энергия электронов оценивается с помощью предположения о равнораспределении. Такая оценка доли электронов X_e также оказалась близка к $\mathcal{O}(0.1)$, причем точное значение зависит от предполагаемого $\gamma_{\min}$ [12].

Оценить вклад протонов гораздо труднее, мы смогли ограничить его на несколько более высоком уровне, чем вклад электронов: $X_p < (0.2-0.5)$. Это несколько более слабое ограничение, чем полученное в работе [26], где общий вклад релятивистских частиц был ограничен на уровне менее 10 %.

Дальнейший прогресс в этой области будет достигнут с появлением новых наблюдательных установок. Во-первых, наблюдения на будущих телескопах в диапазоне МэВ, таких как AMEGO-X [27] с угловым разрешением на уровне одного градуса, возможно, сильно ограничат вклад протяженной компоненты в наблюдаемый сигнал от M87, тем самым сильно ужесточив ограничения на ОК эмиссию от релятивистских электронов. Во-вторых, глубокие наблюдения на СТА в диапазоне энергий > 100 ГэВ и поиск протяженного компонента может дать ценные ограничения на адронное население пузырей.

Поддержано Минобрнауки РФ в рамках программы финансирования крупных научных проек-

тов национального проекта “Наука”, грант номер 075-15-2020-778. Анализ основан на данных и программном обеспечении, предоставленных Центром научной поддержки Ферми (FSSC). В данном исследовании использовались базы данных NASA ADS и *SkyView* NASA (<http://skyview.gsfc.nasa.gov>).

1. P. Alexander and J. P. Leahy, MNRAS **225**, 1 (1987).
2. M. J. Hardcastle, M. Birkinshaw, R. A. Cameron, D. E. Harris, L. W. Looney, and D. M. Worrall, ApJ **581**(2), 948 (2002).
3. J. Kataoka and L. Stawarz, ApJ **622**(2), 797 (2005).
4. J. H. Croston, M. J. Hardcastle, D. E. Harris, E. Belsole, M. Birkinshaw, and D. M. Worrall, ApJ **626**(2), 733 (2005).
5. L. Birzan, B. R. McNamara, P. E. J. Nulsen, C. L. Carilli, and M. W. Wise, ApJ **686**(2), 859 (2008).
6. A. A. Abdo, M. Ackermann, M. Ajello, et al. (Fermi collaboration), Science **328**(5979), 725 (2010).
7. R. Z. Yang, N. Sahakyan, E. de Ona Wilhelmi, F. Aharonian, and F. Rieger, A&A **542**, A19 (2012).
8. X. Sun, R. Yang, B. McKinley, and F. Aharonian, A&A **595**, A29 (2016).
9. M. Ackermann, M. Ajello, L. Baldini et al. (Fermi collaboration), ApJ **826**(1), 1 (2016).
10. M. Persic and Y. Rephaeli, MNRAS **485**(2), 2001 (2019).
11. F. N. Owen, J. A. Eilek, and N. E. Kassim, ApJ **543**(2), 611 (2000).
12. F. de Gasperin, E. Orrú, M. Murgia et al. (LOFAR collaboration), A&A **547**, A56 (2012).
13. K. Matsushita, E. Belsole, A. Finoguenov, and H. Böhringer, A&A **386**, 77 (2002).
14. W. Forman, C. Jones, E. Churazov, M. Markevitch, P. Nulsen, A. Vikhlinin, M. Begelman, H. B. Öhringer, J. Eilek, S. Heinz, R. Kraft, F. Owen, and M. Pahre, ApJ **665**(2), 1057 (2007).
15. E. T. Million, N. Werner, A. Simionescu, S. W. Allen, P. E. J. Nulsen, A. C. Fabian, H. B. Öhringer, and J. S. Sanders, MNRAS **407**(4), 2046 (2010).
16. C. D. Dermer and Y. Rephaeli, ApJ **329**, 687 (1988).
17. M. Wood, R. Caputo, E. Charles, M. Di Mauro, J. Magill, J. S. Perkins (Fermi-LAT collaboration), in *35th International Cosmic Ray Conference (ICRC2017)*, *International Cosmic Ray Conference*, Proceedings of Science, Trieste (January 2017), v. 301, p. 824.
18. J. R. Mattox, D. L. Bertsch, J. Chiang et al. (Collaboration), ApJ **461**, 396 (1996).
19. S. Abdollahi, F. Acero, M. Ackermann et al. (Fermi collaboration), ApJS **247**(1), 33 (2020).
20. J. J. Condon, W. D. Cotton, E. W. Greisen, Q. F. Yin, R. A. Perley, G. B. Taylor, and J. J. Broderick, AJ **115**(5), 1693 (1998).
21. T. McGlynn, K. Scollick, and N. White, in *New Horizons from Multi-Wavelength Sky Surveys*, ed. by B. J. McLean, D. A. Golombek, J. J. E. Hayes, and H. E. Payne, Springer, Dordrecht (1998), v. 179, p. 465.
22. H. Andernach, J. R. Baker, A. von Kap-Herr, R. Wielebinski, A&A **74**(1), 93 (1979).
23. V. L. Ginzburg, *Theoretical physics and astrophysics. Supplementary chapters*, Nauka, Moscow (1981).
24. S. Kim, S.-C. Rey, H. Jerjen, T. Lisker, E.-C. Sung, Y. Lee, J. Chung, M. Pak, W. Yi, and W. Lee, ApJS **215**(2), 22 (2014).
25. G. B. Rybicki and A. P. Lightman, *Radiative Processes in Astrophysics*, Wiley-VCH, Weinheim (1986).
26. E. Churazov, W. Forman, A. Vikhlinin, S. Tremaine, O. Gerhard, and C. Jones, MNRAS **388**(3), 1062 (2008).
27. J. McEnery, A. van der Horst, A. Dominguez et al. (AMEGO collaboration), Bull. Am. Astron. Soc. **51**, 245 (2019).

Трансформации спектра оптического фонона, возбуждаемого в комбинационном рассеянии в объеме алмаза ультракороткими лазерными импульсами варьируемой длительности

С. И. Кудряшов⁺¹⁾, П. А. Данилов⁺, П. А. Сдвиженский*, В. Н. Леднев*, Ц. Чень⁺, С. А. Остриков[×],
Е. В. Кузьмин⁺, М. С. Ковалев⁺, А. О. Левченко⁺

⁺Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

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

[×]МГТУ им. Н. Э. Баумана, 105005 Москва, Россия

Поступила в редакцию 29 декабря 2021 г.

После переработки 11 января 2022 г.

Принята к публикации 12 января 2022 г.

При дофиламентационном возбуждении природного алмаза ультракороткими лазерными импульсами с длиной волны 515 нм, фиксированной интенсивностью и варьируемой длительностью 0.3–12 пс в спектре фотолюминесценции наблюдался сигнал спонтанного комбинационного рассеяния на частоте трехкратно вырожденного центрозонного оптического фонона алмаза. При длительностях импульса в диапазоне 0.6–1.3 пс наблюдалось неоднородное синее уширение линии, почти симметричное расщепление линии на три компоненты (2.3–6.3 пс) и, наконец, очень сильное однородное уширение всей линии (6.3–12 пс). Наблюдаемые впервые трансформации формы линии оптического фонона связываются с субпикосекундной динамикой электрон-дырочной плазмы и (суб)пикосекундной динамикой локальных механических напряжений, индуцированных плазмой и неравновесными фононами.

DOI: 10.31857/S1234567822050020

1. Возбуждение объема алмаза фокусированными интенсивными ультракороткими (фемто- и пикосекундными, УКИ) лазерными импульсами приводит к возбуждению фотолюминесценции [1, 2], сигнала комбинационного рассеяния [3], прямой лазерной записи микробитов фотолюминесцентных меток для объемной микромаркировки алмазов [4]. Тем не менее, в отличие от поверхности алмазов [5], локальная динамика электрон-дырочной плазмы, решеточная и структурно-фазовая динамика практически не исследованы в связи с неразвитостью экспериментальных подходов для динамических микроскопических исследований. В результате, для таких условий локального взаимодействия УКИ с диэлектриками в отсутствие надежных данных зондирования зоны взаимодействия предсказываются аномально высокие давления (до 1 ТПа) и температуры (до 10^6 К) [6]. В случае алмазов локальное воздействие высоких давлений и температур приводит к сильным изменениям структуры оптических центров на базе примесного азота в позициях замещения [7], поэтому локальная динамическая диагностика высоких темпе-

ратур и давлений имеет особое значение как в фундаментальном, так и прикладном отношении.

В настоящей работе в условиях возбуждения природного алмаза в дофиламентационном режиме под действием УКИ с варьируемой длительностью 0.3–12 пс, но фиксированной интенсивностью или плотностью энергии в спектре спонтанного комбинационного рассеяния наблюдались динамические трансформации формы линии трехкратно вырожденного центрозонного оптического фонона, которые можно связать с локальными механическими напряжениями в фокальной области.

2. В качестве источника возбуждения использовалась вторая гармоника (515 нм) волоконного иттербиевого фемтосекундного лазера Satsuma с длиной волны $\lambda_{\text{las}} = 1030$ нм (полуширина – 7 нм), варьируемой длительностью положительно-чирпированного импульса $\tau \approx 0.3$ –12 пс и максимальной энергией в импульсе $E_{\text{max}} = 10$ мкДж в ТЕМ₀₀-моду. Лазерное излучение фокусировалось на глубину 200 мкм под поверхность стационарного алмазного кубика (размер – $2 \times 2 \times 2$ мм) Iab-типа с помощью микро-объектива с числовой апертурой $NA = 0.25$ в пятно с измеренным радиусом

¹⁾e-mail: kudryashovsi@lebedev.ru

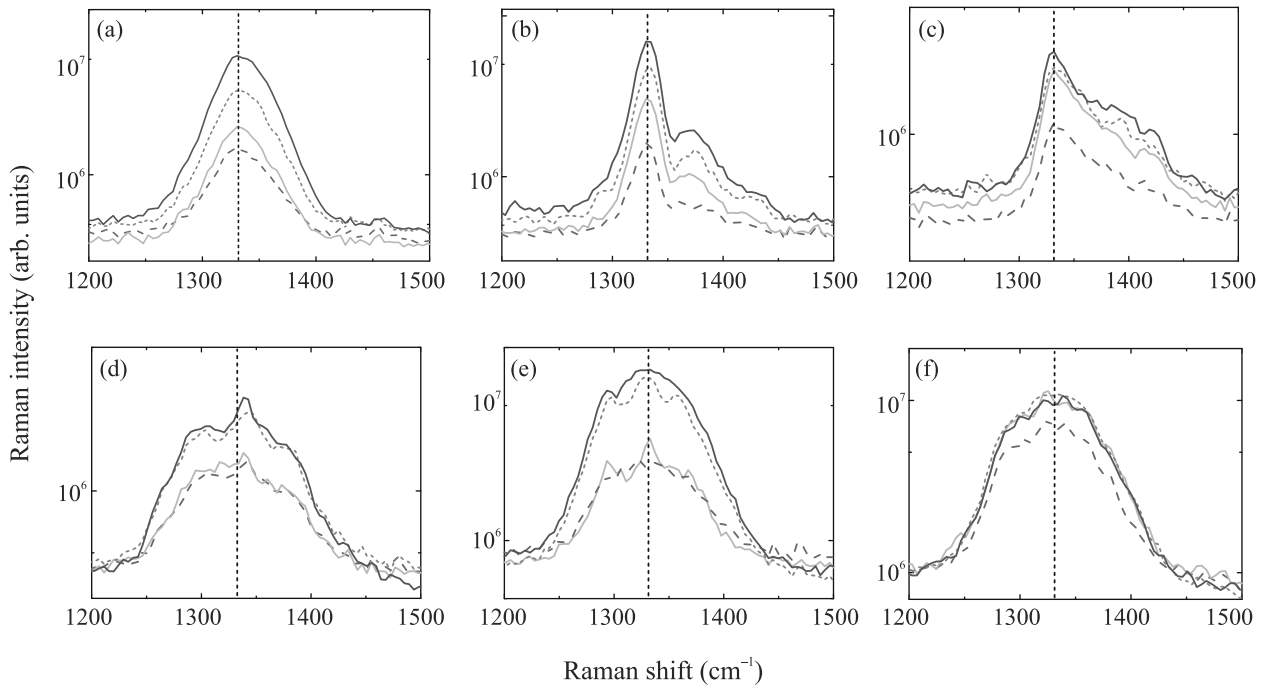


Рис. 1. (Цветной онлайн) Характерные спектры КР-сигнала центровонного оптического фотона алмаза для различных длительностей УКИ: 0.3 (а), 0.69 (b), 1.3 (c), 2.3 (d), 6.3 (e) и 12 (f) пс. Цветами показаны спектры для разных падающих пиковых интенсивностей УКИ: 0.03 (темно-серая штрихованная кривая), 0.06 (светло-серая кривая), 0.12 (оранжевая пунктирная кривая), 0.24 (бордовая кривая) ТВт/см². Пунктирная линия показывает центр линии фонона 1332 см⁻¹

$R_{1/e} \approx 1.8$ мкм, а возбужденная фотолюминесценция видимого диапазона (500–700 нм) и сигнал комбинационного рассеяния на длине волны 552 нм (отстройка около 1300 см⁻¹) собирались в схеме бокового рассеяния кварц-флюоритовым микрообъективом (NA = 0.2) и далее фокусировались на входную щель спектрометра с ПЗС-камерой Andor с электронным затвором и усилителем яркости. Зависимость интенсивности нерезонансного сигнала комбинационного рассеяния (КР) имела линейный характер по пиковой мощности лазерных импульсов и связывалась с безынерционным спонтанным рассеянием излучения накачки на оптическом фоне алмаза (волновое число 1332 см⁻¹ [8]) в каждом акте через короткоживущее (~ 1 фс) виртуальное состояние в запрещенной зоне. Для анализа динамики электронных и решеточных процессов в фокальной области алмаза спектры КР-сигнала снимались при фиксированной пиковой интенсивности положительно-чирпированных квази-монохроматических УКИ с варьируемой длительностью (0.3–12 пс) путем пропорционального увеличения энергии импульсов, а для анализа кумулятивных эффектов – при фиксированной плотности энергии (энергии) УКИ, причем в обоих случаях –

в дофиламентационном режиме распространения УКИ, где критическая мощность самофокусировки в природном алмазе на длине волны 515 нм оценивалась на уровне 0.1 МВт (пиковая интенсивность – 1 ТВт/см²) по сравнению с критической мощностью ≈ 0.5 МВт на длине волны 1030 нм [9].

3. Полученные динамические спектры центровонного оптического фонона от интенсивности УКИ 0.03, 0.06, 0.12 и 0.24 ТВт/см² в зависимости от длительности УКИ 0.3–12 пс (рис. 1а–f) показывают постепенную трансформацию формы синглетной линии. Отметим, что сама наблюдаемая полуширина линии $\Delta\omega \approx 60$ –70 см⁻¹ (рис. 1а) оказывается много больше полуширины линии этого фонона в стационарной КР-спектроскопии ($\Delta\omega \approx 1.7$ см⁻¹ [10]) и определяется шириной линии самого УКИ (1.7 нм на длине волны 515 нм, $\Delta\omega \approx 70$ см⁻¹), а не спектральным разрешением системы детектирования, в результате свертки профилей линий фонона и УКИ. Тем не менее, при длительности импульса 0.6–1.3 пс наблюдалось неоднородное синее уширение линии вплоть до отщепления отдельного “синего” пика, сдвинутого на $\Delta\nu \approx 40$ см⁻¹ (рис. 1b). Данный пик можно связать с ударным “синим” спектральным смещением линии под действием давления сжатия в

фокальной области в течение УКИ с появлением данной более слабой реплики основной синглетной линии, если уже в течение УКИ происходит генерация однородного напряжения сжатия. Это возможно, в частности, при генерации изотропных механических напряжений “электронной” природы под действием электрон-дырочной плазмы в результате электрон-фононного взаимодействия с участием центрозонных акустических фононов [11]

$$\sigma_{el}(\rho_{eh}) \approx D_{ac}\rho_{eh}, \quad (1)$$

достигающих амплитуды напряжений $\sigma_{el} \sim D_{ac}\rho_{eh} \sim 1\text{--}10\text{ ГПа}$ при величине акустического потенциала деформации $D_{ac} \approx 10\text{ эВ}$ [12] и плотности электрон-дырочной плазмы $\rho_{eh} \sim 10^{21}\text{--}10^{22}\text{ см}^{-3}$. Для сравнения, с использованием калибровочных соотношений для гидростатического давления $\Delta\nu/\sigma \propto 3.2\text{ см}^{-1}/\text{ГПа}$ [10] получается схожая величина $\sigma_{el} \sim 10\text{ ГПа}$. Альтернативно, можно рассматривать наблюдаемую на рис. 1b двух-пиковую структуру как динамическое расщепление в течение УКИ под действием анизотропных напряжений – на дублет и синглет, если под действием электрон-дырочной плазмы генерируются существенно более высокие одноосные напряжения сжатия вдоль осей [111] или [100] [13], вызывающие расщепление согласно калибровочным соотношениям [10]

$$\begin{aligned} \Delta\nu_{[111]} &\approx (2.2\text{ см}^{-1}/\text{ГПа})\sigma, \\ \Delta\nu_{[100]} &\approx (0.73\text{ см}^{-1}/\text{ГПа})\sigma. \end{aligned} \quad (2)$$

Такие напряжения могут формироваться неравновесными (“горячими”) длинноволновыми акустическими фононами при релаксации носителей, например, в низколежащих X-долинах зоны проводимости ([100]-напряжения). В частности, расщепление [111]-типа может быть вызвано “спящим” фононом (“silent” phonon), возбуждаемым как смещение подрешеток одновременно при возбуждении центрозонного оптического фотона [14]. К сожалению, поскольку эффект динамической трансформации линии оптического фонона алмаза в течение УКИ наблюдается впервые, на данном этапе более детальный анализ причин трансформации затруднителен. Тем не менее, заметим, что с ростом длительности импульса от 0.6 до 1.3 пс ударный характер спектральной трансформации становится менее выраженным, но сам сдвиг становится более сильным (с выраженным краем около 1428 см^{-1} , сдвиг $\Delta\nu \approx 96\text{ см}^{-1}$) и монотонным (рис. 1c). Этот факт указывает на еще большие динамические давления сжатия (до 30 ГПа для

изотропных напряжений или 45–130 ГПа для анизотропных напряжений), которые могут существенно трансформировать присутствующие в фокальной области оптические центры [7]. Заметим, что гидростатические давления того же порядка ($\sim 10^2\text{ ГПа}$) оценивались в работе [5] в случае поверхностной абляции алмаза фс-лазерными импульсами при интенсивностях $\sim 5\text{ ТВт}/\text{см}^2$.

При больших длительностях УКИ в диапазоне 2.3–6.3 пс наблюдается почти симметричное расщепление линии на три компоненты – два отщепленных синглета вокруг несмещенного синглета (рис. 1d, e). Подобный характер расщепления свидетельствует о генерации менее симметричных – двух- или трехмерных – напряжений, в результате ангармонического фонон-фононного распада – например, оптических фононов в акустические [15], с генерацией “горячих” фононных мод и низко-симметричных полей напряжений на временах электрон-фононной термализации в алмазе $\leq 2\text{ пс}$ [16]. Наблюдаемые расщепления линии $\Delta\nu \sim 30\text{--}40\text{ см}^{-1}$ можно связать посредством соотношений (2) с неравновесными решеточными напряжениями $\sim 20\text{--}60\text{ ГПа}$.

Наконец, для длительностей УКИ в диапазоне 6.3–12 пс наблюдается очень сильное однородное уширение всей линии с величиной полуширины $\Delta\omega \approx 100\text{ см}^{-1}$ (рис. 1f). Этот эффект только еще раз подчеркивает неравновесный характер механических анизотропных напряжений при меньших длительностях УКИ, который снимается при термализации решеточных возбуждений после 6.3 пс с генерацией поля изотропных термических напряжений.

Примечательно, что примерно аналогичную картину трансформации спектров оптического фотона можно увидеть в зависимости от фиксированной плотности энергии УКИ с величинами 0.16 и $0.32\text{ Дж}/\text{см}^2$ (рис. 2a–f), также осознанно выбранными соответствующими дофиламентационному характеру взаимодействия УКИ с алмазом. Таким образом, непосредственным сравнением спектров при фиксированной интенсивности (рис. 1) или плотности энергии (рис. 2) УКИ в зависимости от длительности chirпированных импульсов не удается однозначно установить, являются ли эффекты динамическими (зависят в первую очередь от времени) или кумулятивными (зависят от накопленной в течение УКИ плотности энергии).

В результате, для более детального анализа временных и энергетических эффектов в динамике состояния алмаза в фокальной области, отражаемого наблюдаемой на рис. 1, 2 формой линии оптического фонона, была построена диаграмма в координатах

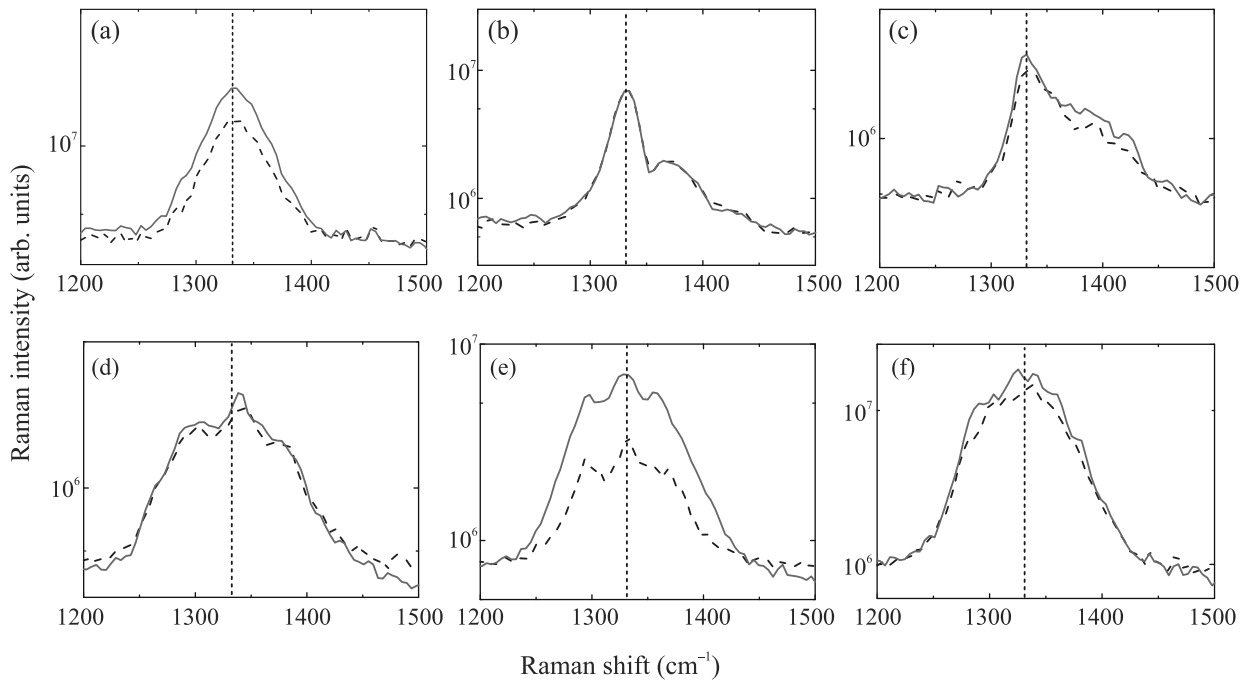


Рис. 2. (Цветной онлайн) Характерные спектры КР-сигнала центрозонного оптического фотона алмаза для различных длительностей УКИ: 0.3 (a), 0.69 (b), 1.3 (c), 2.3 (d), 6.3 (e) и 12 (f) пс. Цветами показаны спектры для разных значений пиковой плотности энергии УКИ: 0.16 (темно-синяя штриховая кривая) и 0.32 (светло-серая кривая) Дж/см². Пунктирная линия показывает центр линии фонона 1332 см⁻¹

тах “интенсивность–длительность УКИ” (рис. 3). С учетом анализа всего объема данных (лишь частично представленного на рис. 1, 2) для интенсивности УКИ < 1 ТВт/см² (интенсивность, отвечающая критической мощности самофокусировки) и длительности 0.3–12 пс, типы трансформации линии оптического фонона связаны на рисунке с физическими эффектами, природа которых обсуждалась выше применительно к рис. 1 и представленными здесь в виде соответствующих цветных областей. Интерес для анализа представляют границы областей – вертикальные в случае исключительно внутренних причин (независимость от интенсивности УКИ в данных пределах), или псевдо-гиперболические в случае кумулятивной зависимости исключительно от плотности энергии, что в обоих случаях является определенной абстракцией. Тем не менее, очевидно, что динамика реализации большинства эффектов – “синего” уширения, симметричного расщепления под действием анизотропного напряжения – определяться лишь внутренними факторами динамики релаксации вложенной энергии в алмазе, тогда как итоговое однородное тепловое уширение, связанное с нагревом фокального объема, ускоряется с ростом интенсивности УКИ, т.е. носит кумулятивный характер. К сожалению, поскольку данные динамические спектральные

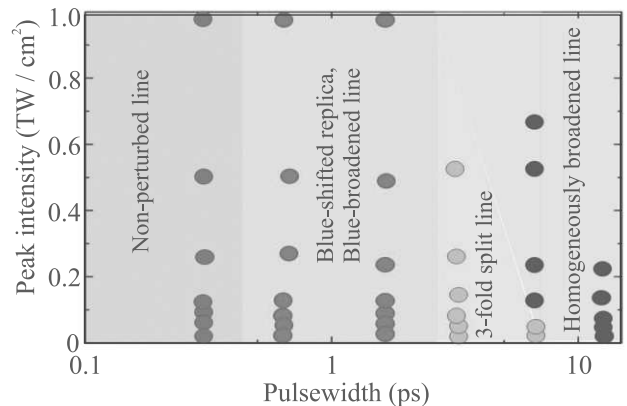


Рис. 3. (Цветной онлайн) Условная диаграмма основных эффектов в трансформации спектра оптического фонона алмаза в координатах “интенсивность–длительность УКИ”. Цветные круги представляют экспериментальные данные. Условные границы областей определены по абсциссе с ошибкой, равной половине разницы между соседними значениями длительности импульсов

трансформации линии оптического фонона в алмазе под действием УКИ наблюдаются впервые, сопоставление с предшествующими работами не представляется возможным (за исключением статических экспериментов с давлением и температурой [10, 14, 16]).

4. В заключение, в фокальной области внутри природного алмаза под действием положительно-чирпированных ультракоротких лазерных импульсов видимого диапазона с варьируемой длительностью и пиковой интенсивностью в реальном времени в течение возбуждающих импульсов генерировался сигнал спонтанного комбинационного рассеяния с участием трехкратно вырожденного оптического фонона. При субпикосекундной длительности импульса наблюдается постепенная трансформация синглетной линии в дублет с синей репликой, отражающей, по-видимому, изотропные плазма-индуцированные напряжения в решетке уровня 10 ГПа, и далее симметричное пикосекундное расщепление линии на триплет при генерации в решетке анизотропных напряжений, связанных с неравновесными акустическими фононами. Наконец, при длительности около 12 пс термализация энергии в решетке приводит к однородному уширению синглетной линии оптического фонона без сдвига. В итоге, продемонстрирован новый физический эффект, допускающий в перспективе возможность локальной динамической диагностики механических напряжений в объеме алмаза с помощью возбуждающих/зондирующих (суб)пикосекундных лазерных импульсов. Такая диагностика может пролить свет на природу локальных структурных превращений оптических центров в объеме материала под действием ультракоротких лазерных импульсов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект # 21-79-30063).

1. M. Zukerstein, F. Trojánek, M. Kozák, and P. Maly, *J. Lumin.* **231**, 117774 (2021).
2. S. I. Kudryashov, R. A. Khmel'nitskii, P. A. Danilov, N. A. Smirnov, A. O. Levchenko, O. E. Kovalchuk,

- M. V. Uspenskaya, E. A. Oleynichuk, and M. S. Kovalev, *Opt. Lett.* **46**, 1438 (2021).
3. S. M. Pimenov, I. I. Vlasov, A. A. Khomich, B. Neuenschwander, M. Muralt, and V. Romano, *Appl. Phys. A* **105**, 673 (2011).
4. S. I. Kudryashov, P. A. Danilov, N. A. Smirnov, N. G. Stsepuro, A. E. Rupasov, R. A. Khmel'nitskii, E. A. Oleynichuk, E. V. Kuzmin, A. O. Levchenko, Y. S. Gulina, S. N. Shelygina, I. V. Sozaev, M. S. Kovalev, and O. E. Kovalchuk, *Appl. Surf. Sci.* **575**, 151736 (2021).
5. D. H. Reitze, H. Ahn, and M. C. Downer, *Phys. Rev. B* **45**, 2677 (1992).
6. E. G. Gamaly, S. Juodkazis, K. Nishimura, H. Misawa, B. Luther-Davies, L. Hallo, P. Nicolai, and V. Tikhonchuk, *Phys. Rev. B* **73**, 214101 (2006).
7. I. A. Dobrinets, V. G. Vins, and A. M. Zaitsev, *HPHT-treated diamonds*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2013).
8. A. M. Zaitsev, *Optical Properties of Diamond: A Data Handbook*, Springer Publishing House, Berlin, Heidelberg, N.Y. (2001).
9. S. I. Kudryashov, A. O. Levchenko, P. A. Danilov, N. A. Smirnov, and A. A. Ionin, *Opt. Lett.* **45**(7), 2026 (2020).
10. M. H. Grimsditch, E. Anastassakis, and M. Cardona, *Phys. Rev. B* **18**, 901 (1978).
11. C. Thomsen, H. T. Grahn, H. J. Maris, and J. Tauc, *Phys. Rev. B* **34**, 4129 (1986).
12. M. Kozák, F. Trojánek, and P. Malý, *New J. Phys.* **17**, 053027 (2015).
13. M. Cardona, *Phys. Status Solidi B* **241**, 3128 (2004).
14. M. Pu, F. Zhang, S. Liu, T. Irifune, and L. Lei, *Chinese Phys. B* **28**, 053102 (2019).
15. P. G. Klemens, *Phys. Rev. B* **11**, 3206 (1975).
16. J. B. Cui, K. Amtmann, J. Ristein, and L. Ley, *J. Appl. Phys.* **83**(12), 7929 (1998).

Индукцированное мощным ИК лазером радиационно-столкновительное вовлечение молекул, не поглощающих лазерное излучение, в резонанс с лазерным полем в двухкомпонентной молекулярной среде

Г. Н. Макаров¹⁾, А. Н. Петин

Институт спектроскопии РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия

Поступила в редакцию 17 января 2022 г.

После переработки 17 января 2022 г.

Принята к публикации 17 января 2022 г.

Обнаружено эффективное радиационно-столкновительное вовлечение молекул, не поглощающих лазерное излучение, в резонанс с лазерным полем при их облучении с поглощающими излучение лазера молекулами мощным лазерным ИК излучением в двухкомпонентной молекулярной среде. Эксперименты проводились на примере смеси молекул $\text{CF}_2\text{HCl}/\text{CF}_3\text{Br}$ (при соотношении давлений 1/1), находящихся в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения (ударной волны), который формировался перед твердой поверхностью при падении на нее интенсивного импульсного газодинамически охлажденного молекулярного потока. Возбуждение молекул осуществлялось импульсным излучением CO_2 -лазера. Описан метод и приведены первые результаты исследований. Обнаружена эффективная диссоциация молекул CF_2HCl (с выходом диссоциации $\beta \geq 10\text{--}15\%$) при облучении смеси $\text{CF}_2\text{HCl}/\text{CF}_3\text{Br}$ в случае отстройки частоты CO_2 -лазера от центра полосы ИК поглощения колебательно охлажденных в скачке уплотнения молекул CF_2HCl более чем на $15\text{--}25\text{ см}^{-1}$, причем, при довольно низких плотностях энергии возбуждения ($\Phi \leq 0.5\text{--}1.0\text{ Дж/см}^2$), т.е. в условиях, когда в чистом газе CF_2HCl диссоциация молекул практически не имела место. Результаты работы могут найти практическое применение при использовании метода изотопно-селективной лазерной ИК диссоциации молекул для разделения изотопов.

DOI: 10.31857/S1234567822050032

1. Введение. Сегодня проводится много исследований, направленных на разработку низкоэнергетических методов молекулярного лазерного разделения изотопов (МЛРИ, MLIS – *molecular laser isotope separation*) [1–15], а также альтернативных им методов [1, 2, 16]. Основной целью этих исследований является поиск эффективных и экономичных методов разделения изотопов различных элементов, включая изотопы урана. Наиболее хорошо изученный метод инфракрасной (ИК) многофотонной диссоциации (МФД) молекул [17] был успешно применен на практике для разделения изотопов углерода с использованием молекул CF_2HCl [18]. Однако широкое применение этого метода для разделения изотопов сдерживается из-за высокой энергоемкости процесса [1, 2]. Кроме того, в этом методе требуются довольно высокие плотности энергии для диссоциации молекул ($\Phi \geq 3\text{--}5\text{ Дж/см}^2$) [17–20]. Это во многих случаях приводит к уменьшению изотопической селективности процесса, что особенно критично в случае се-

лективной диссоциации молекул, характеризующихся небольшими изотопическими сдвигами в спектрах ИК поглощения (WF_6 , MoF_6 , UF_6).

В недавних работах [21–24] исследовалась изотопно-селективная ИК диссоциация молекул CF_3Br и CF_2HCl в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения, который формируется при падении интенсивного импульсного газодинамически охлажденного молекулярного потока на твердую поверхность. Указанные молекулы имеют небольшие изотопические сдвиги (по отношению к изотопам брома и хлора) в спектрах ИК поглощения ($\Delta\nu_{\text{is}} \approx 0.25\text{ см}^{-1}$ в случае молекул CF_3Br [25] и $\Delta\nu_{\text{is}} \approx 0.05\text{ см}^{-1}$ в случае молекул CF_2HCl [26]), что представляет большой интерес в плане изотопно-селективной ИК многофотонной диссоциации молекул UF_6 . Показано, что при небольших плотностях энергии возбуждения можно реализовать изотопно-селективную диссоциацию указанных молекул.

В данной работе на примере CF_2HCl и CF_3Br нами представлены результаты по наблюдению эффек-

¹⁾e-mail: gmakarov@isan.troitsk.ru

тивного вовлечения молекул, не поглощающих лазерное ИК излучение, в резонанс с лазерным полем при их облучении в двухкомпонентной молекулярной среде. Описана также суть метода и рассматриваются причины наблюдаемого явления. Результаты работы демонстрируют возможность проведения изотопно-селективной ИК диссоциации молекул, находящихся первоначально вне резонанса с лазерным излучением, в смеси с поглощающими излучение лазера молекулами при сравнительно низких плотностях энергии возбуждения и значительного повышения, вследствие этого, селективности диссоциации [21, 22].

2. Эксперимент и метод. Экспериментальная установка (рис. 1) и метод исследования довольно

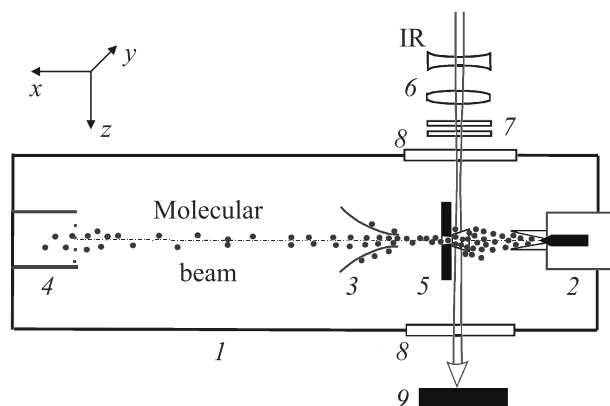


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема экспериментальной установки. 1 – высоковакуумная камера; 2 – импульсное сопло; 3 – скиммер; 4 – квадрупольный масс-спектрометр; 5 – подложка с усеченной тетраэдрической пирамидой для формирования ударной волны; 6 – цилиндрические линзы; 7 – ослабители; 8 – окна из NaCl; 9 – поглотитель

подробно описаны в недавних работах [21, 22, 24]. Здесь мы рассмотрим их кратко. В экспериментах использовались интенсивные импульсные молекулярные потоки (пучки) для формирования скачка уплотнения перед твердой поверхностью и квадрупольный масс-спектрометр для детектирования их состава до и после облучения лазером. Эксперименты проводились со смесью молекул $\text{CF}_2\text{HCl}/\text{CF}_3\text{Br}$ (при соотношении давлений 1/1), находящихся в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения [21, 22, 24]. Молекулы облучались импульсом CO_2 -лазера. Импульс излучения лазера состоял из пика длительностью на полувысоте ≈ 100 нс и хвостовой части длительностью (на полувысоте) около 500 нс, в которой содержалось примерно 50 % полной энергии импульса. С целью сопоставления ре-

зультатов, полученных со смесью молекул, проводилось также облучение молекул CF_2HCl и CF_3Br отдельно друг от друга.

Заметим, что в газодинамически охлажденном молекулярном потоке для поступательной, вращательной и колебательной температур многоатомных молекул реализуются [27] условия: $T_{1,\text{tr}} \leq T_{1,\text{rot}} \leq T_{1,\text{vib}}$. В скачке уплотнения [28], из-за разницы в скоростях поступательной, вращательной и колебательной релаксаций [29], реализуются обратные неравновесные условия, а именно: $T_{2,\text{tr}} \geq T_{2,\text{rot}} \geq T_{2,\text{vib}}$ [1, 21, 22]. При этом, из-за большого времени колебательно-поступательной релаксации молекул (например, для CF_3Br $\tau_{\text{TV-T}} \approx 135$ мкс · торр [30], для CF_2HCl $\tau_{\text{TV-T}} \approx 65$ мкс · торр [31]), колебательная температура молекул в скачке уплотнения в случае использования импульсного потока разреженного газа может практически не отличаться от колебательной температуры молекул в падающем потоке ($T_{2,\text{vib}} \approx T_{1,\text{vib}}$), в то время как поступательная и вращательная температуры молекул в скачке уплотнения значительно выше, чем в невозмущенном потоке: $T_{2,\text{tr}} > T_{1,\text{tr}}$ и $T_{2,\text{rot}} > T_{1,\text{rot}}$. Таким образом, в скачке уплотнения создаются новые неравновесные условия, которые характеризуются тем, что колебательная температура молекул существенно меньше поступательной и вращательной температур. В условиях наших экспериментов колебательная температура молекул CF_2HCl и CF_3Br в падающем на поверхность потоке, вероятно, составляла ≤ 150 К [1, 32].

Суть метода поясняется рис. 2. На нем показаны полосы ИК поглощения колебания ν_1 (частота ≈ 1084.5 см $^{-1}$ [25]) резонансно поглощающих излучение CO_2 -лазера молекул CF_3Br при низкой ($T \approx 50$ К) температуре [25], а также полосы ИК поглощения колебаний ν_3 (≈ 1100 см $^{-1}$) и ν_8 (≈ 1118 см $^{-1}$) [33] молекул CF_2HCl в жидком аргоне при температуре $T \approx 110$ К. На рисунке 2 стрелкой показано также расположение линии генерации CO_2 -лазера (9R(30), частота – 1084.635 см $^{-1}$), на которой осуществлялось облучение молекул. Частота излучения лазера находится в резонансе с полосой ИК поглощения колебания ν_1 молекул CF_3Br (попадает между Q-ветвями молекул $\text{CF}_3^{80}\text{Br}$ и $\text{CF}_3^{78}\text{Br}$), и она довольно далеко отстроена от ближайшей полосы ИК поглощения молекул CF_2HCl (отстройки от полос поглощения колебаний ν_3 и ν_8 молекул CF_2HCl составляют соответственно ≥ 15 см $^{-1}$ и ≥ 33 см $^{-1}$).

Резонансное возбуждение лазером молекул CF_3Br в смеси с молекулами CF_2HCl приводит к колебательному возбуждению молекул CF_2HCl за счет процесса колебательно-колебательного V–V

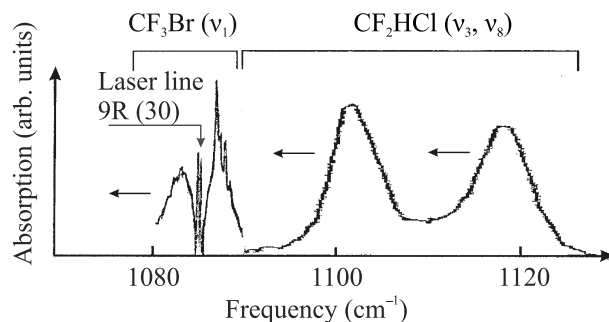


Рис. 2. (Цветной онлайн) Полоса ИК поглощения колебания ν_1 (частота $\approx 1084.5 \text{ см}^{-1}$ [25]) резонансно поглощающих излучение CO_2 -лазера молекул CF_3Br при температуре $T \approx 50 \text{ K}$ [25] и полосы ИК поглощения колебаний ν_3 ($\approx 1100 \text{ см}^{-1}$) и ν_8 ($\approx 1118 \text{ см}^{-1}$) молекул CF_2HCl в жидком аргоне при температуре $T \approx 110 \text{ K}$ [33]. Вертикальной стрелкой показано расположение линии генерации CO_2 -лазера (9R(30), частота – 1084.635 см^{-1}), на которой осуществлялось облучение молекул в экспериментах. Горизонтальными стрелками показано направление смещения полос ИК поглощения молекул в низкочастотную область при их колебательном возбуждении

обмена энергией с возбужденными молекулами CF_3Br . В результате этого полосы ИК поглощения молекул CF_2HCl смещаются из-за ангармонизма колебаний в красную область (в сторону частоты излучения лазера, возбуждающего молекулы) [17, 19]. Это приводит к тому, что изначально не поглощающие излучение лазера молекулы CF_2HCl за счет столкновений с возбужденными молекулами CF_3Br начинают вовлекаться в резонанс с лазерным полем. В дальнейшем становится возможным их радиационное резонансное возбуждение и диссоциация лазерным излучением.

При лазерной ИК диссоциации молекул CF_2HCl образуются радикалы CF_2 и молекулы HCl . В результате последующей рекомбинации радикалов CF_2 образуются молекулы C_2F_4 [34]. Энергия диссоциации молекул CF_2HCl составляет $47.9 \pm 4.0 \text{ ккал/моль}$ [35]. При диссоциации молекул CF_3Br образуются радикалы CF_3 и атомы Br , а конечными продуктами диссоциации и последующих химических реакций являются молекулы C_2F_6 и Br_2 [36]. Энергия диссоциации молекул CF_3Br значительно больше, чем у молекул CF_2HCl . Она составляет $66.9 \pm 3.0 \text{ ккал/моль}$ [35].

Выходы диссоциации β_{35} и β_{79} молекул CF_2HCl и CF_3Br при облучении в скачке уплотнения определялись на основе измерений интенсивности времяпролетных спектров соответственно молекулярного

иона $\text{CF}_2\text{H}^{35}\text{Cl}^+$ ($m/z = 86$) и ионного фрагмента $\text{CF}_2^{79}\text{Br}^+$ ($m/z = 129$). Времяпролетные спектры указанных ионов измерялись как в отсутствии возбуждения молекул в формирующемся перед поверхностью скачке уплотнения, так и при их возбуждении лазером. В случае молекул CF_2HCl :

$$S_L = S_0(1 - \beta_{35}\Gamma), \quad (1)$$

где S_0 и S_L – соответственно времяпролетные ионные сигналы $\text{CF}_2\text{H}^{35}\text{Cl}^+$ в отсутствии возбуждения молекул и при их возбуждении лазером. Γ – отношение облучаемого объема ко всему объему молекулярного потока. В экспериментах нами анализировался состав лишь облучаемой лазерным излучением части молекулярного потока. Поэтому в нашем случае реализовывалось условие $\Gamma = 1$.

3. Результаты и их обсуждение. При облучении смеси молекул $\text{CF}_2\text{HCl}/\text{CF}_3\text{Br}$ в скачке уплотнения нами наблюдалось вовлечение молекул CF_2HCl , не находящихся в резонансе с ИК излучением CO_2 -лазера, в резонанс с лазерным полем и их эффективная диссоциация. В то же время при облучении чистого газа CF_2HCl при такой же плотности энергии излучения лазера (при $\Phi \leq 0.5 \text{ Дж/см}^2$) диссоциация молекул практически не имела место. На рисунке 3 приведены зависимости выхода диссоциации β_{35} молекул $\text{CF}_2\text{H}^{35}\text{Cl}$ от плотности энергии

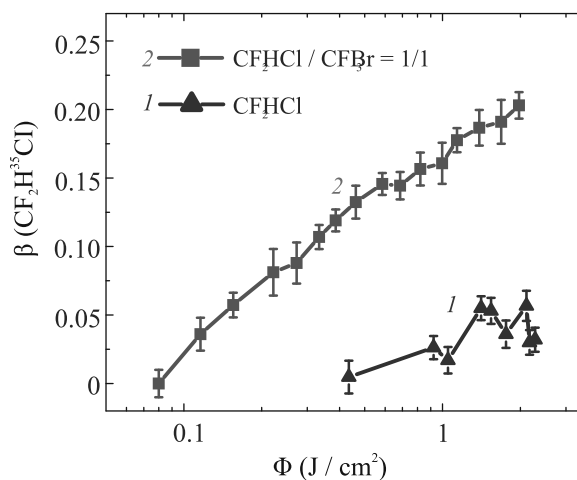


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимости выхода диссоциации молекул $\text{CF}_2\text{H}^{35}\text{Cl}$ от плотности энергии лазерного излучения в случае облучения молекул CF_2HCl в ударной волне в чистом газе (1) и в случае их облучения в смеси $\text{CF}_2\text{HCl}/\text{CF}_3\text{Br} = 1/1$ (2). Молекулы возбуждались на линии 9R(30) лазера (на частоте 1084.635 см^{-1}). В обоих случаях давление газа над соплом составляло 4 атм. Длительность импульса открывания сопла – 410 мкс

Ф возбуждающего лазерного излучения. Эти зависимости измерялись по величине молекулярного ионного сигнала $\text{CF}_2\text{H}^{35}\text{Cl}^+$ при возбуждении молекул в ударной волне в двух различных случаях. В первом случае (1) ударная волна формировалась молекулярным потоком чистого газа CF_2HCl , а во втором случае (2) – молекулярным потоком смеси газов $\text{CF}_2\text{HCl}/\text{CF}_3\text{Br}=1/1$. В обоих случаях общее давление газа над соплом составляло 4.0 атм. Видно, что в широком диапазоне плотностей энергии ($\Phi = 0.1\text{--}2.5\text{ Дж/см}^2$) выход диссоциации молекул CF_2HCl намного (в 5–8 раз) больше, когда они возбуждаются в смеси с молекулами CF_3Br , чем при возбуждении чистого газа CF_2HCl . Увеличение выхода диссоциации молекул CF_2HCl в смеси с CF_3Br обусловлено [37] эффективной передачей им колебательной энергии от молекул CF_3Br , возбужденных лазером, и дальнейшим их радиационным возбуждением.

В случае облучения молекул в смеси резонансно поглощенная молекулами CF_3Br энергия лазерного излучения за счет колебательно-колебательного обмена энергией с молекулами CF_2HCl уже в течение возбуждающего лазерного импульса приводит к колебательному возбуждению молекул CF_2HCl и довольно сильному красному смещению полос их ИК поглощения [17, 19]. Константы ангармонизма колебаний ν_3 и ν_8 CF_2HCl составляют соответственно $X_{33} = -5.0\text{ см}^{-1}$ и $X_{88} = -3.5\text{ см}^{-1}$ [33]. В результате смещения полос поглощения молекул CF_2HCl в низкочастотную область они вовлекаются в резонанс с лазерным полем. Последующее радиационно-столкновительное возбуждение молекулярной смеси приводит к эффективной ИК диссоциации преимущественно молекул CF_2HCl , поскольку они имеют более низкую энергию диссоциации, чем молекулы CF_3Br . Поэтому при небольших плотностях энергии возбуждения ($\Phi \leq 1.0\text{ Дж/см}^2$) реализуются условия, когда молекулы CF_2HCl будут диссоциировать, в то время как молекулы CF_3Br не будут подвергаться диссоциации [23, 24].

Оценки показывают [22, 32], что концентрации молекул CF_2HCl в падающем потоке и скачке уплотнения в условиях проведенных экспериментов (давление газа над соплом 4.2 атм, длительность импульса открывания сопла 410 мкс, число молекул, выходящих из сопла за импульс, $\approx 1.7 \times 10^{17}$) составляют $\approx 5.2 \times 10^{15}\text{ см}^{-3}$ и $\approx 6.3 \times 10^{16}\text{ см}^{-3}$ соответственно. Следовательно, уже при небольшом давлении газа в скачке уплотнения ($\approx 1.5\text{--}2.0$ торр) происходит довольно быстрый обмен энергией между молекулами (за времена, меньшие длительности лазерного им-

пульса $\approx 1\text{ мкс}$), приводящий к эффективному вовлечению в процесс поглощения излучения лазера нерезонансных молекул. Столь быстрый процесс обмена энергией может быть связан с довольно высокой поступательной и вращательной температурой газа в скачке уплотнения ($T_{2,\text{tr}} \approx T_{2,\text{rot}} \approx 550\text{--}620\text{ К}$ [32]) и дальнедействующим дипольно-дипольным взаимодействием колебательно-возбужденных молекул [24, 37].

4. Заключение. Обнаружено (на примере молекул CF_2HCl и CF_3Br) индуцированное мощным ИК лазером эффективное вовлечение молекул, не поглощающих излучение лазера, в резонанс с лазерным полем за счет их облучения в смеси с резонансно поглощающим газом в двухкомпонентной молекулярной среде. Можно полагать, что обнаруженный эффект распространяется также и на другие молекулы. Это особенно важно при селективной лазерной ИК диссоциации молекул, имеющих небольшие изотопные сдвиги в спектрах ИК поглощения.

Полученные результаты демонстрируют возможность проведения изотопно-селективной лазерной ИК диссоциации молекул, находящихся первоначально вне резонанса с лазерным излучением, в смеси с молекулами, поглощающими излучение лазера, при сравнительно низких плотностях энергии возбуждения и повышения, вследствие этого, селективности диссоциации.

Результаты работы представляют интерес в плане селективного воздействия лазерным излучением на молекулы и могут найти практическое применение при использовании метода изотопно-селективной лазерной ИК диссоциации молекул для разделения изотопов.

1. Г. Н. Макаров, УФН **185**, 717 (2015).
2. Г. Н. Макаров, УФН **192** (2022), в печати; <https://doi.org/10.3367/UFNr.2021.02.038942>.
3. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ **93**, 123 (2011).
4. K. A. Lyakhov, H. J. Lee, and A. N. Pechen, Separat. Purificat. Technol. **176**, 402 (2017).
5. K. A. Lyakhov and A. N. Pechen, Appl. Phys. B **126**(8), 141 (2020).
6. J. Guo, Y.-J. Li, J.-P. Ma, X. Tang, and X.-S. Liu, Chem. Phys. Lett. **773**, 138572 (2021).
7. P. M. B. Sai, A. Ghosh, T. Dwivedi, G. Chakraborty, R. C. Das, D. J. Biswas, and J. P. Nilaya, Chem. Phys. Lett. **787**, 139262 (2022).
8. В. М. Апатин, В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, Н.-Д. Д. Огурок, Е. А. Рябов, ЖЭТФ **152**, 627 (2017).

9. В. М. Апатин, В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, Н.-Д. Д. Огурок, Е. А. Рябов, Квантовая электроника **48**, 157 (2018).
10. В. М. Апатин, Г. Н. Макаров, Н.-Д. Д. Огурок, А. Н. Петин, Е. А. Рябов, ЖЭТФ **154**, 287 (2018).
11. V. N. Likhman, G. N. Makarov, A. L. Malinovskii, A. N. Petin, D. G. Poydashev, and E. A. Ryabov, Laser Phys. **28**, 105703 (2018).
12. Г. Н. Макаров, Н. Д. Д. Огурок, А. Н. Петин, Квантовая электроника **48**, 667 (2018).
13. В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Д. Г. Пойдашев, Е. А. Рябов, ЖЭТФ **155**, 216 (2019).
14. А. Н. Петин, Г. Н. Макаров, Квантовая электроника **49**, 593 (2019).
15. Г. Н. Макаров, УФН **190**, 264 (2020).
16. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Квантовая электроника **46**, 248 (2016).
17. V. N. Bagratashvili, V. S. Letokhov, A. A. Makarov, and E. A. Ryabov, *Multiple Photon Infrared Laser Photophysics and Photochemistry*, Harwood Acad. Publ., Chur (1985).
18. В. Ю. Баранов, А. П. Дядькин, В. С. Летохов, Е. А. Рябов, *Лазерное разделение изотопов углерода*, в кн. *Изотопы: свойства, получение, применение*, под ред. В. Ю. Баранова, Физматлит, М. (2005), т. I, с. 460.
19. А. В. Евсеев, А. А. Пурецкий, В. В. Тяхт, ЖЭТФ **88**, 60 (1985).
20. В. Н. Лохман, Г. Н. Макаров, Е. А. Рябов, М. В. Сотников, Квантовая электроника **23**, 81 (1996).
21. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ **111**, 361 (2020).
22. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Письма в ЖЭТФ **112**, 226 (2020).
23. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, Квантовая электроника **50**, 1036 (2020).
24. Г. Н. Макаров, А. Н. Петин, ЖЭТФ **159**, 281 (2021).
25. A. Pietropolli Charmet, P. Stoppa, P. Toninello, A. Baldacci, and S. Giorgiani, Phys. Chem. Chem. Phys. **8**, 2491 (2006).
26. M. Snels, and G. D'Amico, J. Mol. Spectrosc. **209**, 1 (2001).
27. J. B. Anderson, *Molecular beams from nozzle sources*, in *Gasdynamics, Molecular Beams and Low Density Gasdynamics*, ed. P. P. Wegener, Marcel Dekker, N.Y. (1974).
28. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*, Наука, М. (1966).
29. Е. В. Ступоченко, С. А. Лосев, А. И. Осипов, *Релаксационные процессы в ударных волнах*, Наука, М. (1965).
30. R. Kadibelban, R. Ahrensbotzong, and P. Hess, Z. Naturforsch. **37a**, 271 (1982).
31. V. Tosa, R. Bruzzese, C. De Listo, and D. Tescione, Laser Chem. **15**, 47 (1994).
32. Г. Н. Макаров, УФН **173**, 913 (2003).
33. J. G. McLaughlin, M. Poliakoff, and J. J. Turner, J. Mol. Struct. **82**, 51 (1982).
34. D. S. King, and J. C. Stephenson, Chem. Phys. Lett. **66**, 33 (1979).
35. В. Н. Кондратьев (ред.), *Энергии разрыва химических связей, потенциалы ионизации и сродство к электрону*, Наука, М. (1974).
36. M. Drouin, M. Gauthier, R. Pilon, P. A. Hackett, and C. Willis, Chem. Phys. Lett. **60**, 16 (1978).
37. R. S. Karve, S. K. Sarkar, K. V. S. Rama Rao, and J. P. Mittal, Appl. Phys. B **53**, 108 (1991).

Двухфотонная лазерная литография активных резонаторных микроструктур

А. И. Майдыковский⁺, Е. А. Мамонов^{+,*}, Н. В. Митетело⁺, С. Сориа^{×1)}, Т. В. Мурзина^{+,2)}

⁺ Физический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

^{*} Факультет физики, Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, 109028 Москва, Россия

[×] CNR-IFAC, Istituto di Fisica Applicata “Nello Carrara”, Consiglio Nazionale delle Ricerche,
via Madonna del Piano 10, I50019 Sesto Fiorentino (FI), Italy

Поступила в редакцию 26 января 2022 г.

После переработки 31 января 2022 г.

Принята к публикации 31 января 2022 г.

Создание активных флуоресцентных микроструктур с заданными параметрами является важной задачей интегральной оптики. Одним из наиболее эффективных методов изготовления таких микроструктур является метод лазерной двухфотонной литографии. Однако большинство используемых в данной технологии полимеров обладают относительно низким квантовым выходом флуоресценции. В данной работе исследованы свойства резонаторных микроструктур, полученных указанным методом из гибридных полимеров с добавлением различных красителей. Продемонстрирована возможность формирования качественных микроструктур из активированных полимеров, сохранение их люминесцентных свойств после полимеризации в поле интенсивного лазерного излучения, а также снижение экспозиции лазерной двухфотонной литографии на 2 порядка при наличии в полимере красителя Кумарин-1. Методом нелинейной оптической микроскопии показано, что в микрорезонаторных структурах на основе полимера с красителем реализуется пространственное распределение рассеяного излучения флуоресценции, соответствующее возбуждению резонаторных мод или мод шепчущей галереи.

DOI: 10.31857/S1234567822050044

Создание микроструктур с точно заданными геометрическими параметрами является важной частью таких активно развивающихся областей науки, как интегральная оптика, биофотоника и многие другие [1–4]. Двухфотонная лазерная литография (ДФЛЛ) является одним из методов формирования подобных структур, хорошо зарекомендовавшим себя при создании микрорезонаторов, оптических микроэлементов (микропризм и микролинз), волноводов и проч. [5–10]. Основным достоинством этого метода является выраженная локальность области воздействия по сравнению с другими видами оптической литографии, что позволяет обеспечить разрешение менее 50 нм при использовании в качестве излучения накачки лазера ближнего ИК-диапазона [11]. Активное развитие ДФЛЛ привело к появлению ряда способов, позволяющих более точно контролировать качество поверхности и форму получаемой микроструктуры, что особенно важно для микрорезонаторов мод шепчущей галереи (МШГ) [12].

Одним из основных ограничений технологии ДФЛЛ для формирования литографии микроструктур в качестве активных фотонных микроструктур, т.е. структур, в которых заданные эффекты происходят на частотах, отличных от частоты излучения накачки, является низкий квантовый выход флуоресценции исходного полимера. Очевидное решение этой проблемы состоит в добавлении в полимер красителей или флуоресцирующих наночастиц (например, квантовых точек), которые и будут являться активным веществом в микроструктуре. К настоящему времени с использованием такого подхода был изготовлен ряд структур, таких как полый цилиндр из акрилатного полимера с добавлением красителя Родамин Б [13] и др. [5, 14].

Аналогичный метод был применен при производстве активных микроструктур на основе полимера OrmoComp [15], относящегося к классу гибридных (органических-неорганических) полимеров и являющегося одним из наиболее перспективных для ДФЛЛ [16]. При печати данным полимером, активированным красителем Пирометен 597, уже были получены микрорезонаторы в виде дисков с диаметром около

¹⁾ S. Soria.

²⁾ e-mail: murzina@mail.ru

50 мкм и с добротностью более 10^6 [17], что является хорошим показателем для резонаторов такого размера. В данной работе методом двухфотонной лазерной литографии из полимера OrmoComp изготовлен ряд микроструктур различной формы с характерными размерами до 25 мкм с красителями Кумарин-1, смеси Родамина-640 и Родамина-590 (в дальнейшем упоминаются как микроструктуры с добавлением Родамина) в равных массовых концентрациях, выявлены особенности двухфотонной печати для полимера с различными красителями и продемонстрированы нелинейные люминесцентные свойства данных структур.

Метод ДФЛЛ был реализован при использовании в качестве накачки излучения фемтосекундного титан-сапфирового лазера Avesta Tif-DP с прямой диодной накачкой, длиной волны 780 нм, частотой повторения импульсов 80 МГц и их длительностью 60 фс. С помощью зеркал излучение накачки через телескоп с коэффициентом увеличения 0.5 направлялось на акустооптический модулятор, затем дифрагировавший луч проходил через телескоп с коэффициентом увеличения 5, совмещенный с пространственным фильтром, и попадал на X-Y гальваносканер, расположенный в фокусе 4F-системы с коэффициентом увеличения 2. Во втором фокусе этой системы находилась входная линза иммерсионного объектива Nikon Plan Apo 60x с числовой апертурой 1.4, закрепленного на пьезотрансляторе с диапазоном перемещения 40 мкм. 4F-система располагалась вертикально, оптическая система обеспечивала итоговый коэффициент увеличения, позволяющий согласовать диаметр пучка и размер входной апертуры объектива. Над объективом располагался 3-х координатный столик, перемещавшийся с помощью шаговых двигателей, на котором размещалось покровное стекло Thorlabs CG15CH с каплей или пленкой жидкого полимера для печати микроструктур. Область четкой печати с помощью гальваносканера составляла $100 \times 100 \times 40$ мкм, диаметр вокселя составлял 0.4 мкм, его высота – 1 мкм.

Смешивание красителя с полимером OrmoComp осуществлялось с помощью проявителя OrmoDev, который представляет собой смесь двух растворителей, изопропанола и изобутилметилкетона, в котором хорошо растворяются использованные в работе красители. Раствор OrmoDev с красителем смешивался с OrmoComp в соотношении 1 : 2 по массе. Покровное стекло предварительно выдерживалось 30 минут в растворе “пиранья” для очистки, затем помещалось на столик центрифуги с пленкой воды и высушивалось методом центрифугирования в инерт-

ной атмосфере. Затем на поверхность сухой подложки, вращавшейся со скоростью 3000 об/мин, наносился усилитель адгезии (праймер) OrmoPrime08; центрифугирование праймера проводилось в течение 30 с, затем структура высушивалась при 150 °C в течение 15 мин. Результирующая пленка праймера имела субмикронную толщину. После этого на покровное стекло с праймером проводилось нанесение и центрифугирование раствора полимера с красителем (также при скорости 3000 об/мин, 30 с), с последующим высушиванием при 80 °C в течение 15 мин. В результате мы получали пленку суммарной толщиной 10–15 мкм, пригодную для ДФЛЛ.

Были изготовлены пленки с концентрацией красителя в полимере OrmoComp по массе: Родамин (0.04) и Кумарин-1 (0.083). В процессе двухфотонной лазерной печати были определены дозы излучения для качественной полимеризации микроструктур, которые составили для чистого OrmoComp $4 \cdot 10^{-5}$ Дж/воксель, с красителем Родамин $4 \cdot 10^{-5}$ Дж/воксель, с красителем Кумарин-1 $5 \cdot 10^{-7}$ Дж/воксель. Печать проходила при мощности излучения накачки от 0.7 до 10 мВт в перетяжке, скорость печати составляла от 50 до 1000 мкм/с в зависимости от типа красителя, шаг печати в латеральной плоскости составлял 0.2–0.4 мкм, шаг между слоями – 0.2–0.5 мкм.

Следует отметить, что добавление в полимер OrmoComp красителя Кумарин-1 приводит к снижению примерно на два порядка по величине значения экспозиции, требуемой для двухфотонной полимеризации при ДФЛЛ, по сравнению с полимером без красителя, что можно использовать для увеличения

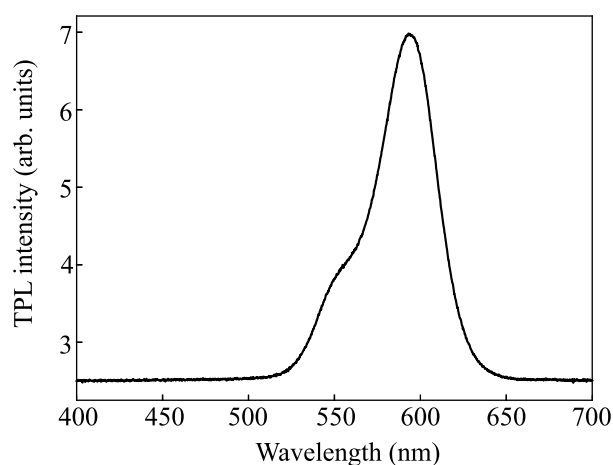


Рис. 1. Спектр двухфотонной флуоресценции микроструктур из полимера OrmoComp с добавлением Родамина при накачке лазерным излучением с длиной волны 800 нм

скорости печати структур. В присутствии других изученных красителей (Родамин, а также Кумарин-30) данный эффект не наблюдается. Следует предположить, что это связано с увеличением поглощения OrmoComp, активированного красителем Кумарин-1, полоса поглощения которого практически совпадает с полосой поглощения фотоинициатора основного полимера [18, 19]. В этом случае возможна эффективная передача оптического возбуждения от красителя к фотоинициатору, что снижает необходимую дозу облучения ДФЛЛ. Данное наблюдение перспективно для развития высокоскоростных методов двухфотонной лазерной литографии.

Для изучения линейных и нелинейных оптических свойств полученных микроструктур использовалась установка, аналогичная описанной в работе [20]. В качестве излучения накачки использовалось перестраиваемое сигнальное излучение параметрического генератора света Avesta TOPOL-1050-C на длинах волн 800 и 700 нм с длительностью импульса 150 фс и частотой повторения 70 МГц, или излучение диодного лазера с длиной волны 405 нм; таким образом, была реализована возможность двухфотонного и однофотонного возбуждения ФЛ соответственно. Фокусировка зондирующего излучения на микроструктуру в область с диаметром около 1 мкм осуществлялась объективом Mitutoyo Plan Apo 100x с числовой апертурой 0.7. Такой же объектив использовался для сбора излучения флуоресценции от исследуемой структуры. При регистрации детектировалось или все излучение интегрально фотоэлектронным умножителем, или с разрешением по спектру сигнала спектрометром. При использовании в качестве накачки диодного лазера и возбуждении в структуре однофотонной флуоресценции, перед детектором дополнительно ставились фокусирующая линза и диафрагма, обеспечивавшие сбор сигнала из области на образце диаметром около 1 мкм. Исследования проводились в схеме “на пропускание” при фокусировке зондирующего излучения на верхнюю (дальнюю от подложки и ближайшую к лучу накачки) поверхность структуры.

На рисунке 1 показан спектр двухфотонной флуоресценции (при накачке лазером с длиной волны 800 нм) микроструктур из полимера с добавлением красителя Родамин. Спектральный максимум соответствует длине волны 600 нм, аналогичные результаты наблюдаются и для однофотонной флуоресценции.

На рисунке 2 приведены карты интенсивности двухфотонной флуоресценции в микродиске и микро-пятиугольнике толщиной 5 мкм, указываю-

щие на однородность распределения красителя в структуре. Видна геометрическая правильность объектов и их соответствие изначальной модели. Форма изготовленных структур предполагает возможность возбуждения в них резонаторных мод различных видов, таких как моды шепчущей галереи, так называемые bow-tie-моды (галстук-бабочка) или аналоги, и др.

Одним из способов обнаружения таких мод является анализ распределения рассеянного излучения флуоресценции [21]. Для данных структур такое распределение было получено с использованием CCD-камеры в схеме “на пропускание”. Из рисунке 3а и б видно, что в микроцилиндре наблюдается усиление сигнала флуоресценции вблизи края структуры, что ожидаемо и типично для МШГ. В случае микро-пятиугольника (рис. 3б) следует отметить как возрастание интенсивности флуоресценции возле краев структуры, так и наличие более сложного внутреннего распределения сигнала ближе к ее центру. Отметим, что приведенные на рис. 3б карты флуоресценции получены при возбуждении центра микроструктур; изменение геометрии оптического возбуждения приводит к незначительным отличиям карт распределения флуоресценции в микропятиугольнике.

На рисунках 3с и d приведены результаты расчета распределения модуля электрического поля на частоте накачки в структурах с параметрами, соответствующими экспериментальным. Приведены два наиболее типичных расчетных распределения, так как из-за отсутствия спектральной селективности у CCD-камеры на экспериментальной фотографии в пятиугольнике видна суперпозиция возбуждаемых резонаторных мод. Можно отметить, что для микро-пятиугольника наблюдаются два основных вида резонаторных мод: (i) МШГ, распространяющиеся по периметру структуры, и (ii) моды типа bow-tie, связанные с циркуляцией излучения внутри структуры при отражении от части боковых граней пятиугольника. Одновременное возбуждение этих мод определяет вид рассеянного излучения флуоресценции.

Аналогичные исследования были выполнены для микроструктур, изготовленных из полимера OrmoComp с добавлением красителя Кумарин-1; в этом случае двухфотонные процессы изучались при накачке излучением с длиной волны 700 нм, для которого коэффициент поглощения на удвоенной частоте имеет большую величину. Соответствующий спектр двухфотонной флуоресценции представлен на рис. 4. Видно, что максимум интенсивности расположен вблизи длины волны 450 нм, результаты для однофотонной флуоресценции аналогичны.

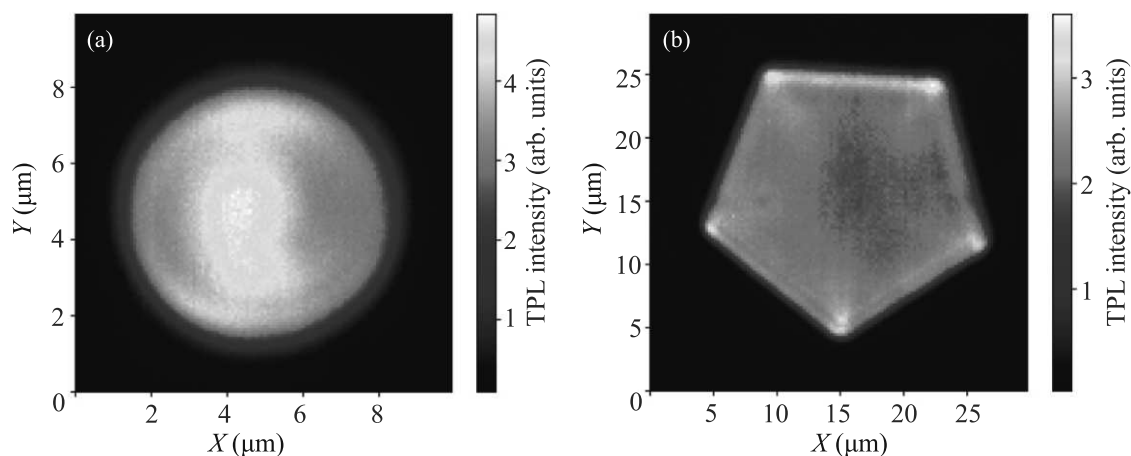


Рис. 2. (Цветной онлайн) Карты распределения интенсивности двухфотонной флуоресценции в микродиске (а) и микропятиугольнике (б) из полимера *OgmoComp* с добавлением Родамина, полученные методом нелинейно-оптической микроскопии при длине волны накачки 800 нм

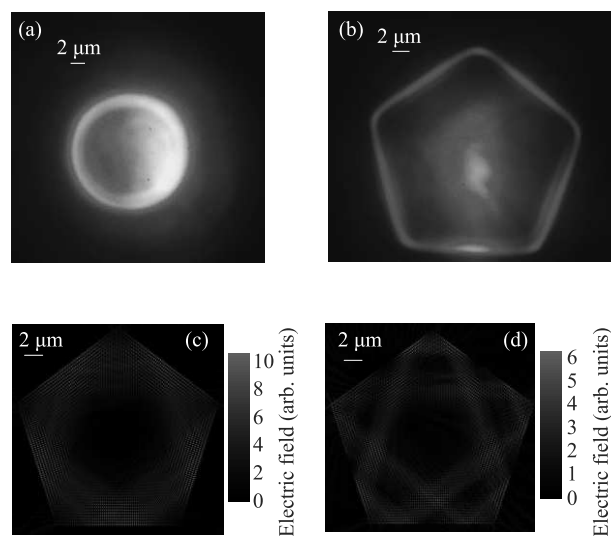


Рис. 3. (Цветной онлайн) Рассеяние излучения флуоресценции в цилиндре (точка возбуждения на краю цилиндра) и микропятиугольнике (точка возбуждения в центре) из полимера *OgmoComp* с добавлением Родамина (а), (б), рассчитанные пространственные распределения электрического поля в микропятиугольнике (с) и (д)

Из данной смеси полимера с красителем были изготовлены микроstructures различных форм: полые шестиугольники и цилиндры, пятиугольники, диски. Картирование интенсивности двухфотонной флуоресценции (рис. 5) показало однородность распределения красителя в полимеризованной структуре и соответствие полученных геометрических параметров заданным в 3D модели. Пространственные распределения рассеянного излучения однофо-

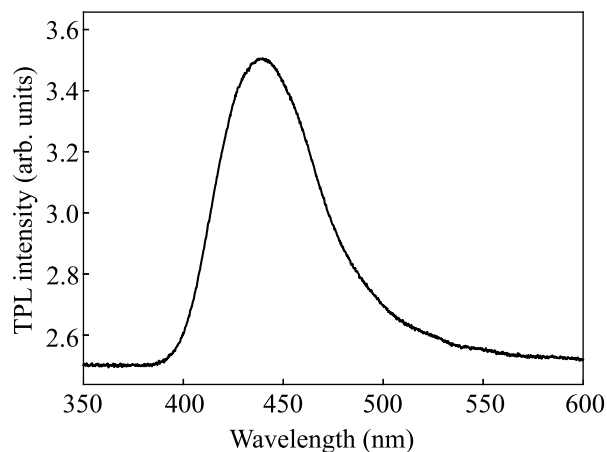


Рис. 4. Спектр двухфотонной флуоресценции микроstructures из полимера *OgmoComp* с добавлением Кумарина-1

тонной флуоресценции в микроdisках и микропятиугольнике также косвенно подтвердили возбуждение резонаторных мод (рис. 6).

Одной из особенностей структур на основе красителей является их фотовыцветание, т.е. снижение эффективности флуоресценции в присутствии мощного облучения, что ограничивает возможности применения соответствующих материалов в фотонике [22]. Для изучения одно- и двухфотонного фотовыцветания мы изучили кинетики флуоресценции изготовленных микроstructures на основе полимеров с различными красителями. Измерения проводились для трех длин волн: 405 нм для однофотонного фотовыцветания, 700 или 800 нм для двухфотонного фотовыцветания, для достижения более эффективного

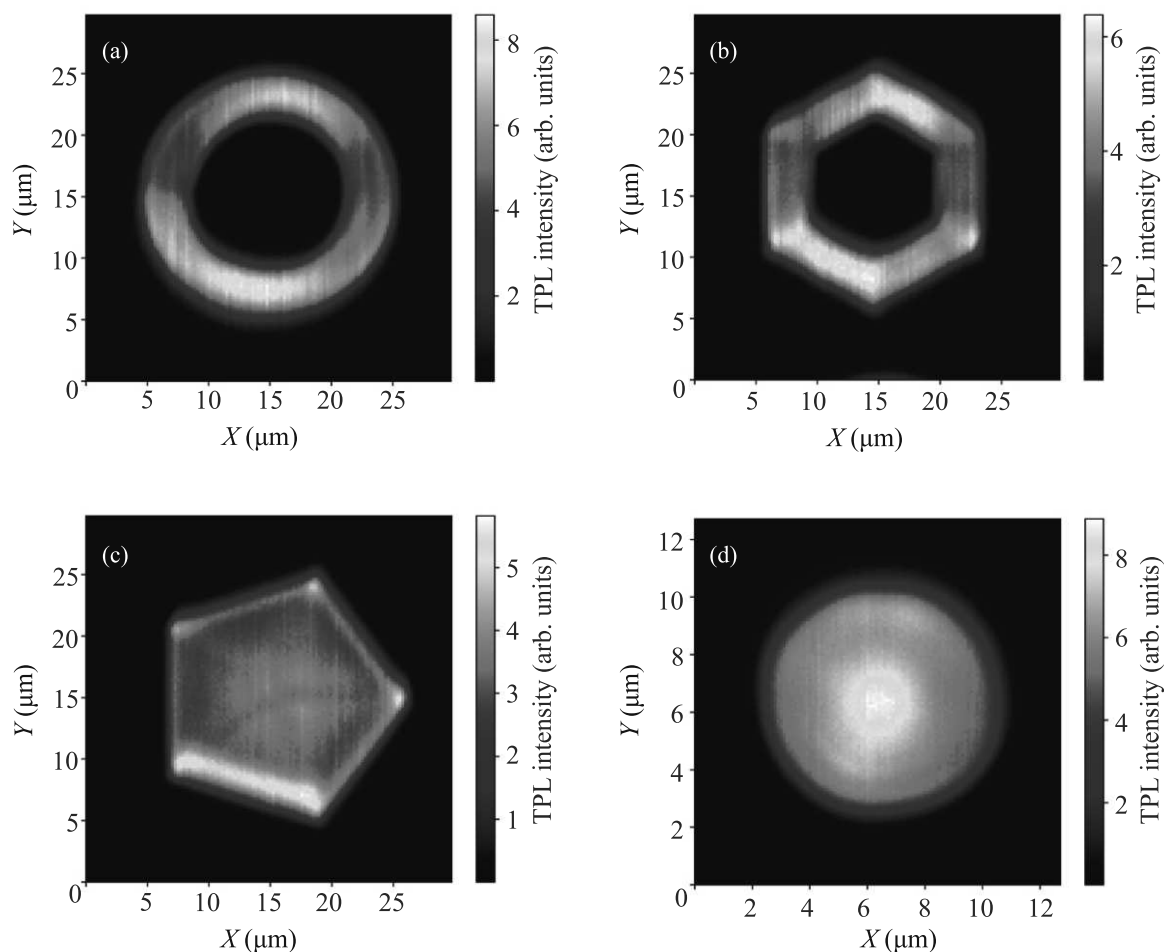


Рис. 5. (Цветной онлайн) Пространственное распределение излучения двухфотонной флуоресценции в полom цилиндре (a), полom шестиугольнике (b), пятиугольнике (c) и диске (d) из полимера OrmoComp с добавлением Кумарина-1

Таблица 1. Параметры фотовыцветания для полимера OrmoComp с Родамином

λ_{pump}	405 нм	700 нм	800 нм
B , отн. ед.	3.54	1.70	3.06
A_1 , отн. ед.	7.55	1.57	3.83
γ_1, c^{-1}	0.31	0.26	0.23
A_2 , отн. ед.	7.50	1.58	3.60
γ_2, c^{-1}	0.04	0.033	0.027

Таблица 2. Параметры фотовыцветания для полимера OrmoComp с Кумарином-1

λ_{pump}	405 нм	700 нм	800 нм
B , отн. ед.	0.4	0.5	1.44
A_1 , отн. ед.	3.12	0.44	2.85
γ_1, c^{-1}	0.47	0.23	0.29
A_2 , отн. ед.	1.79	0.9	3.46
γ_2, c^{-1}	0.055	0.026	0.034

поглощения на удвоенной частоте каждого из красителей. Типичные кривые приведены на рис. 7. Для аппроксимации экспериментальных данных была использована двухэкспонентная зависимость:

$$I(t) = B + \sum_{i=1,2} A_i e^{-\gamma_i t}, \quad (1)$$

где константы γ_i характеризуют скорость фотовыцветания.

Полученные в результате значения коэффициентов для Родамина представлены в табл. 1, для Кумарина-1 в таблице 2.

Данные аппроксимации показывают более низкую скорость фотодегradации Родамина по сравнению с Кумарином-1, а также существенно больший квантовый выход после одинакового времени экспозиции (при сходных массовых концентрациях красителей).

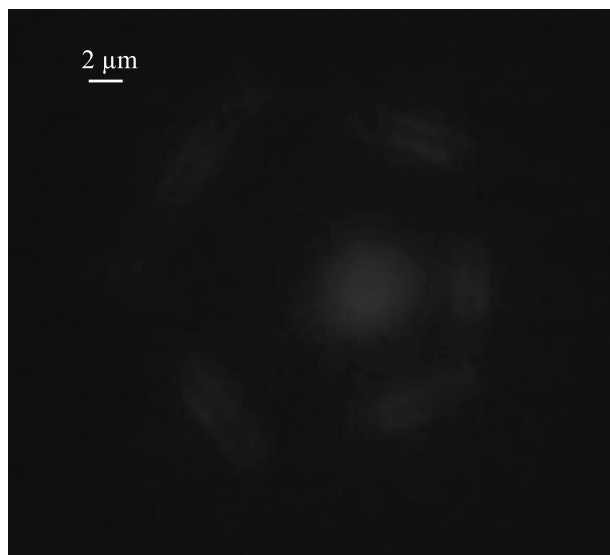


Рис. 6. (Цветной онлайн) Рассеяние излучения флуоресценции в микропятиугольнике (точка возбуждения в центре) из полимера OgmoComp с добавлением Кумарина-1

Таким образом, экспериментально продемонстрирована возможность формирования активных микроструктур на основе полимера OgmoComp с красителями Кумарин-1 и смеси Родамина-640 и Родамина-590 методом двухфотонной лазерной литографии. Экспериментально показано, что добавление в основной полимер OgmoComp красителя Кумарин-1 снижает практически на два порядка по величине экспозицию, необходимую для использования в методе ДФЛЛ для OgmoComp без добавок. Представлена реализация метода, позволяющая изготавливать резонаторные микроструктуры, в которых возбуждение резонаторных мод возможно за счет однофотонной или двухфотонной флуоресценции красителя, внедренного в полимер.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований и Национального Исследовательского Совета Италии # 20-52-7819, а также Междисциплинарной научно-образовательной школы Московского университета “Фотонные и квантовые технологии. Цифровая медицина”.

1. *Optically Induced Nanostructures: Biomedical and Technical Applications*, ed. by K. König and A. Ostendorf, De Gruyter, Berlin, Boston (2015).
2. I. I. Shishkin, M. V. Rybin, K. B. Samusev, M. F. Limonov, R. V. Kiyan, B. N. Chichkov, Yu. S. Kivshar', and P. A. Belov, JETP Lett. **99**, 531 (2014).

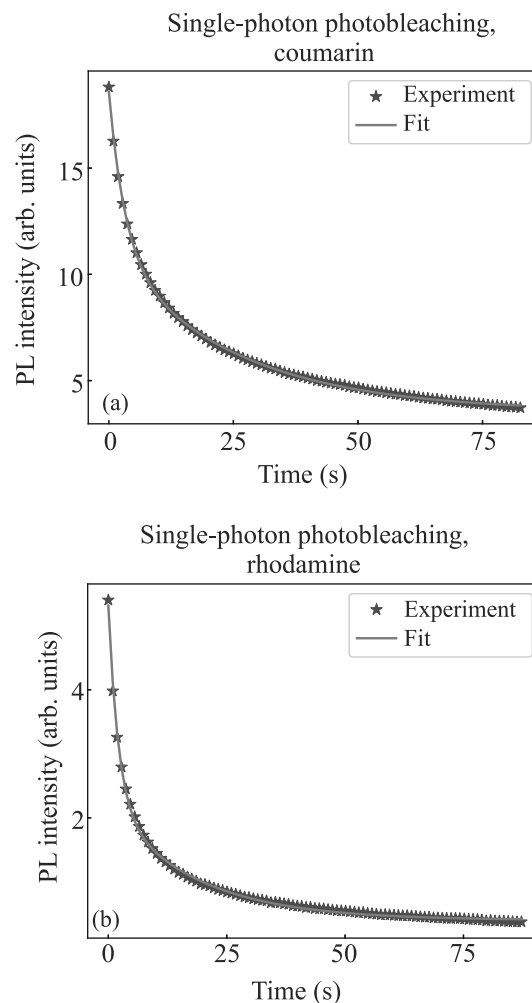


Рис. 7. (Цветной онлайн) Кривые однофотонного фото-выцветания для полимера OgmoComp с Родамином (a) и Кумарином (b) с аппроксимацией двухэкспонентной зависимостью

3. P. Tonkaev and Yu. Kivshar', JETP Lett. **112**, 615 (2020).
4. Т. Р. Волк, Я. В. Боднарчук, Р. В. Гайнутдинов, Л. С. Коханчик, С. М. Шандаров, Письма в ЖЭТФ **113**, 797 (2021).
5. A. J. G. Otuka, N. B. Tomazio, K. T. Paula, and C. R. Mendonça, Polymers **13**, 1994 (2021).
6. A. K. Nguyen and R. J. Narayan, Mater. Today **20**, 314 (2017).
7. M. Lyubomirskiy, F. Koch, K. A. Abrashitova, V. O. Bessonov, N. Kokareva, A. Petrov, F. Seiboth, F. Wittwer, M. Kahnt, M. Seyrich, A. A. Fedyanin, C. David, and C. G. Schroer, Opt. Express **27**, 8639 (2019).
8. M. I. Sharipova, T. G. Baluyan, K. A. Abrashitova, G. E. Kulagin, A. K. Petrov, A. S. Chizhov, T. B. Shatalova, D. Chubich, D. A. Kolymagin,

- A. G. Vitukhnovsky, V. O. Bessonov, and A. A. Fedyanin, *Opt. Mater. Express* **11**, 371 (2021).
9. I. Shishkin, K. Samusev, M. Rybin, M. F. Limonov, Yu. S. Kivshar', A. Gaidukeviciute, R. V. Kiyani, and B. N. Chichkov, *JETP Lett.* **95**, 457 (2012).
10. M. Tromayer, P. Gruber, A. Rosspeintner, A. Ajami, W. Husinsky, F. Plasser, L. González, E. Vauthey, A. Ovsianikov, and R. Liska, *Sci. Rep.* **8**, 17273 (2018).
11. M. Emons, K. Obata, T. Binhammer, A. Ovsianikov, B. N. Chichkov, and U. Morgner, *Opt. Mater. Express* **2**, 942 (2012).
12. X. Zhou, Y. Hou, and J. Lin, *AIP Advances* **5**, 030701 (2015).
13. N. B. Tomazio, L. D. Boni, and C. R. Mendonca, *Sci. Rep.* **7**, 8559 (2017).
14. D. S. Correa, L. De Boni, A. J. Otuka, V. Tribuzi, and C. R. Mendonca, *Two-photon polymerization fabrication of doped microstructures*, InTech, London (2012), v. 30.
15. G. Gruetzner, J. Klein, M. Vogler, and A. Schleunitz, *UV-curable hybrid polymers for optical applications: technical challenges, industrial solutions, and future developments*, in *Advanced Fabrication Technologies for Micro/Nano Optics and Photonics VII*, ed. by G. von Freymann, W. V. Schoenfeld, and R. C. Rumpf, International Society for Optics and Photonics, SPIE (2014), v. 8974, p. 19–30.
16. A. Ovsianikov, A. Gaidukeviciute, B. N. Chichkov, M. Oubaha, B. D. MacCraith, I. Sakellari, A. Giakoumaki, D. Gray, M. Vamvakaki, M. Farsari, and C. Fotakis, *Laser Chemistry* **2008**, 493059 (2008).
17. T. Grossmann, S. Schleede, M. Hauser, T. Beck, M. Thiel, G. von Freymann, T. Mappes, and H. Kalt, *Opt. Express* **19**, 11451 (2011).
18. G. Jones, W. R. Jackson, C. Y. Choi, and W. R. Bergmark, *J. Phys. Chem.* **89**, 294 (1985).
19. <https://www.microresist.de/en/produkt/ormocomp/>.
20. V. V. Pradeep, N. Mitetelo, M. Annadhasan, M. Popov, E. Mamonov, T. Murzina, and R. Chandrasekar, *Adv. Opt. Mater.* **8**, 1901317 (2020).
21. S. Butler, H. Jiang, J. Lin, and A. Neogi, *Adv. Opt. Mater.* **5**, 1600804 (2017).
22. M. Popov, E. Mamonov, N. Mitetelo, K. Zhdanova, J. Ravi, R. Chandrasekar, and T. Murzina, *Opt. Lett.* **45**, 4622 (2020).

Josephson spin-valve realization in the magnetic nodal-line topological semimetal Fe_3GeTe_2

O. O. Shvetsov, Yu. S. Barash, A. V. Timonina, N. N. Kolesnikov, E. V. Deviatov¹⁾

Institute of Solid State Physics of the Russian Academy of Sciences, 142432 Chernogolovka, Russia

Submitted 11 January 2022

Resubmitted 13 January 2022

Accepted 13 January 2022

DOI: 10.31857/S1234567822050056

Recently, Fe_3GeTe_2 (FGT) has attracted significant attention as a unique candidate for the ferromagnetic nodal line semimetal [1], hosting spin-polarized Fermi arc surface states [2]. FGT is an itinerant van der Waals ferromagnet characterized by an out-of-plane magnetocrystalline anisotropy both for three-dimensional single crystals and down to two-dimensional limit.

Usually, spin valves are realized as ferromagnetic multilayers [3] with different layers' thickness. Due to the different spin polarization of the Fermi arc surface states and ferromagnetic bulk, magnetic topological materials should also demonstrate spin-valve transport properties [4, 5], i.e. they can be regarded as natural realization of spin-valves.

In a Josephson spin valve (JSV), ferromagnetic multilayer is sandwiched between two superconducting electrodes [6]. In JSVs supercurrent is defined mainly by the relative orientation of the layers' magnetizations, while in conventional Josephson junctions it is modulated by magnetic flux. In the majority of devices the Josephson current is directed perpendicular to the layers, but the spin-valve effects can also occur in systems, where the supercurrent flows along the planes [7].

Due to the natural spin-valve realization, magnetic topological semimetals like FGT may be regarded as a platform for planar JSV investigations.

Non-trivial surface properties are only known for three-dimensional topological semimetal single crystals. Thus, we use thick ($1\,\mu\text{m}$) FGT flakes, which are obtained by a mechanical cleavage from the initial single crystal. One FGT flake is transferred to the substrate with the defined In leads pattern. We study electron transport between two neighbor In leads in a standard four-point technique, all the wire resistances are excluded, which is necessary for low-impedance samples.

$dV/dI(I)$ curves clearly demonstrate Josephson effect for two different samples, which are referred as S1

and S2. Qualitative behavior is similar, despite strongly different critical current I_c ($I_c = 0.17\,\text{mA}$ (S1) and $0.018\,\text{mA}$ (S2)) and normal resistance values. As expected, the zero-resistance state appears below some critical temperature, which is about 0.88 and 0.34 K for the devices.

Figure 1 demonstrates the influence of external in-plane and normal magnetic fields on sample resistance at $T = 30\,\text{mK}$. The result is qualitatively similar for both field orientations: the zero-resistance state is suppressed by the external field, $dV/dI(B)$ curves are not symmetric with respect to the zero field value. As a most important, the observed $dV/dI(B)$ asymmetry depends on the magnetic field sweep direction. Moreover, all the dV/dI features are mirrored for the opposite field sweeps.

There are also some features in Fig. 1, which are different in two magnetic field orientations. For the in-plane magnetic fields, $I_c(B)$ shows fast aperiodic fluctuations in Fig. 1a–c. On the contrary, no noticeable fluctuations can be observed for normal magnetic field orientation, see Figs. 1d–f.

This behavior can not be expected for usual SFS junctions with the homogeneous magnetization of the central ferromagnetic layer, where remagnetization can only shift the $I_c(B)$ pattern position in magnetic field. On the other hand, the observed behavior is a known fingerprint of Josephson spin valves [6].

In the case of FGT, the presence of spin-polarized topological Fermi arcs has been demonstrated by ARPES [1], while spin momentum locking was inferred to be responsible for anti-symmetric magnetoresistance in FGT/graphite/FGT heterostructures [2]. Thus, a FGT flake may be regarded as a spin valve, this scenario is independently verified by magnetoresistance of a single Au-FGT junction for the reference Hall bar sample, where typical spin-valve hysteresis is observed [3]. Moreover, Figure 1 shows asymmetric resistive features even at high currents, i.e. for the suppressed superconductiv-

¹⁾e-mai: dev@issp.ac.ru

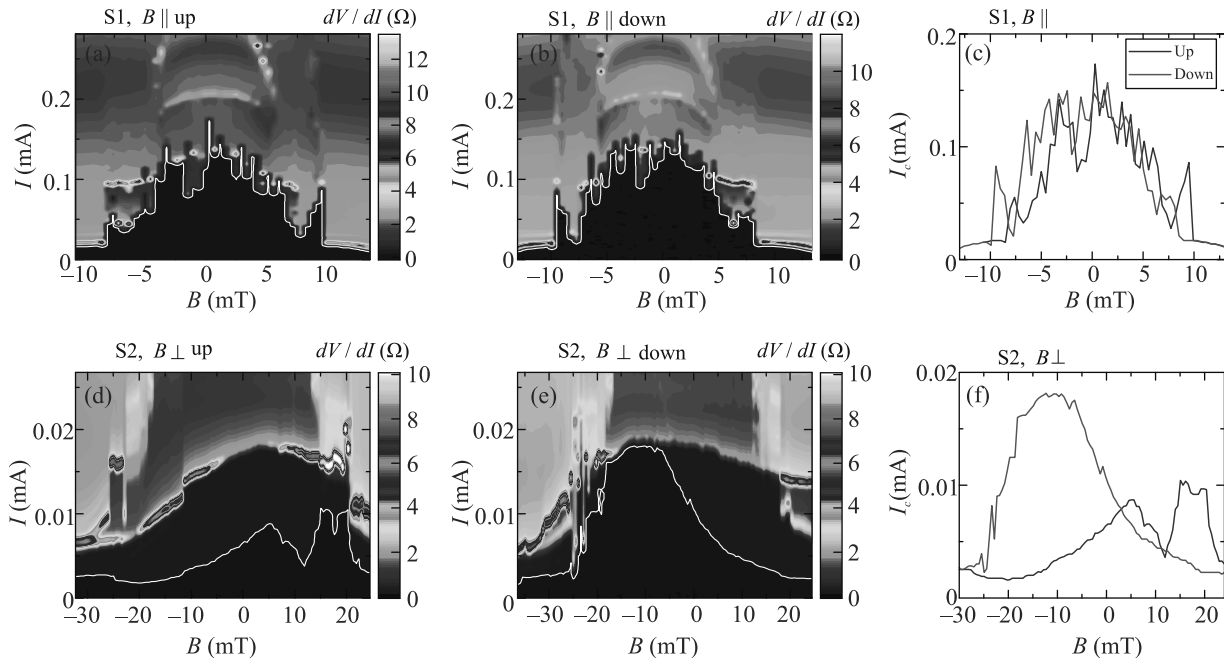


Fig. 1. (Color online) Colormaps of $dV/dI(I, B)$ for samples S1 and S2 in (a), (b) and (d), (e) respectively. The panels (a), (d) and (b), (e) differ by the magnetic field sweep direction, which is from negative to positive values in (a) and is just opposite in (b). All the data are obtained at 30 mK. To establish definite sample magnetization, every magnetic field sweep begins from high field value $B = \pm 100$ mT (the sign depends on the sweep direction). The colormaps are obtained from $dV/dI(I)$ curves at fixed magnetic field values, which are changed point-by-point in up or down directions. To establish definite sample magnetization state, every magnetic field sweep cycle begins from high field value $B = \pm 100$ mT. The $dV/dI(B)$ reversal can be clearly seen, e.g., by the asymmetric black feature at ± 9 mT in (a), (b). The reversal effect is even more pronounced in (d), (e) for normal magnetic fields. (c), (f) $I_c(B)$ dependencies for the in-plane and normal magnetic field orientations, respectively. The general $I_c(B)$ shapes are asymmetric in both cases, the asymmetry is reversed for the up (blue) and down (red) field sweeps. For the in-plane magnetic fields, $I_c(B)$ shows well-reproducible aperiodic fluctuations in (c). On the contrary, no noticeable fluctuations can be observed in (f). In normal magnetic fields, there is an interplay between maximum and minimum in $I_c(B)$ at ± 12 mT, which is well known for the Josephson spin valves [6]. The data are obtained at 30 mK

ity. These features are also reversed for two magnetic field directions, which confirms spin-valve behavior in FGT. Thus, our experimental results can be regarded as demonstration of the JSV, which is realized in the magnetic nodal-line topological semimetal FGT.

This is an excerpt of the article “Josephson spin-valve realization in the magnetic nodal-line topological semimetal Fe_3GeTe_2 ”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022100101

1. K. Kim, J. Seo, E. Lee, K.-T. Ko, B. S. Kim, Bo G. Jang, J. M. Ok, J. Lee, Y. J. Jo, W. Kang, J. H. Shim, C. Kim, H. W. Yeom, B. I. Min, B.-J. Yang, and J. S. Kim, *Nat. Mater.* **17**, 794 (2018).

2. S. Albarakati, C. Tan, Z. Chen, J.G. Partridge, G. Zheng, L. Farrar, E.L.H. Mayes, M.R. Field, C. Lee, Y. Wang, Y. Xiong, M. Tian, F. Xiang, A.R. Hamilton, O.A. Tretiakov, D. Culcer, Y. Zhao, and Y. Wang, *Sci. Adv.* **5**, eaaw0409 (2019); <https://doi.org/10.1126/sciadv.aaw0409>.
3. E. B. Myers, D. C. Ralph, J. A. Katine, R. N. Louie, and R. A. Buhrman, *Science* **285**, 867 (1999).
4. V. D. Esin, D. N. Borisenko, A. V. Timonina, N. N. Kolesnikov, and E. V. Deviatov, *Phys. Rev. B* **101**, 155309 (2020).
5. J. Tian, I. Miotkowski, S. Hong, and Y. P. Chen, *Sci. Rep.* **5**, 14293 (2015).
6. O. M. Kapran, A. Iovan, T. Golod, and V. M. Krasnov, *Phys. Rev. Research* **2**, 013167 (2020).
7. T. Yu. Karminskaya, M. Yu. Kupriyanov, and A. A. Golubov, *JETP Lett.* **87**, 570 (2008).

Vortices in polar and β phases of ^3He

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 18 January 2022
Resubmitted 18 January 2022
Accepted 18 January 2022

DOI: 10.31857/S1234567822050068

At the moment the most interesting topics in the condensed matter physics are related to topological materials: topological insulators, topological superconductors, Dirac and Weyl topological semimetals, etc. Superfluid phases of liquid ^3He [1–3] are the best representatives of the topological matter. Each phase has its unique topological property. Recently, the new phases have been discovered, which are also unique: the polar phase [4, 5] and the β -phase [6]. These superfluid phases were obtained by confinement of liquid ^3He in nematic aerogels with nearly parallel strands. The polar phase has Dirac nodal line in the fermionic spectrum in bulk liquid and the flat band (drumhead states) on the surface [7, 8], which is similar to that in the semimetals with nodal lines [9, 10].

In the β phase the superfluid pairing takes place only for single spin projection. Thus the spin degeneracy of the flat band is lifted, and the surface contains the non-degenerate Majorana fermions. Also, similar to the polar phase the β phase in aerogel is robust to disorder owing to the extension of the Anderson theorem to superconductors with columnar defects [7, 11, 12]. Here we consider the vortex states, which appear in the rotating polar and β phases, and their evolution in the process of transformation of the polar phase to β phase.

The spin-triplet p -wave order parameter, $A_{\alpha i} \equiv \mathbf{A}_i$, in the polar phase, in the spin-polarized polar phase, and in the β -phase has the following form:

$$\mathbf{A}_i = \hat{z}_i (\Delta_{\uparrow\uparrow}(\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}})e^{i\Phi_{\uparrow}} + \Delta_{\downarrow\downarrow}(\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}})e^{i\Phi_{\downarrow}}), \quad (1)$$

where $\Delta_{\uparrow\uparrow} = \Delta_{\downarrow\downarrow}$ in the polar phase, $\Delta_{\downarrow\downarrow} < \Delta_{\uparrow\uparrow}$ in the spin-polarized polar phase in the magnetic field along z -axis, and $\Delta_{\downarrow\downarrow} = 0$ in the β -phase.

In rotating vessel there is the competition between the energy of a single-quantum vortex (SQV) and the energy of two half-quantum vortices (HQVs) [13, 14]. In SQV $\Phi_{\uparrow} = \Phi_{\downarrow} = \phi$, where ϕ is the azimuthal angle in cylindrical coordinates. In the HQVs either $\Phi_{\uparrow} = \phi$ and $\Phi_{\downarrow} = 0$, or $\Phi_{\uparrow} = \phi$ and $\Phi_{\downarrow} = 0$:

$$\mathbf{A}_i = e^{i\frac{\phi}{2}} \hat{z}_i \left(\Delta_{\uparrow\uparrow}(\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}})e^{i\frac{\phi}{2}} + \Delta_{\downarrow\downarrow}(\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}})e^{-i\frac{\phi}{2}} \right), \quad (2)$$

$$\mathbf{A}_i = e^{i\frac{\phi}{2}} \hat{z}_i \left(\Delta_{\uparrow\uparrow}(\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}})e^{-i\frac{\phi}{2}} + \Delta_{\downarrow\downarrow}(\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}})e^{i\frac{\phi}{2}} \right). \quad (3)$$

They correspond to the single-quantum vortex in the spin-up component and to the single-quantum vortex in the spin-down component, see also [15]. When two HQVs are combined, they form the SQV (the phase vortex):

$$\mathbf{A}_i = e^{i\phi} \hat{z}_i (\Delta_{\uparrow\uparrow}(\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}}) + \Delta_{\downarrow\downarrow}(\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}})). \quad (4)$$

The energy of superflow in the cryostat rotating with angular velocity $\boldsymbol{\Omega} \parallel \hat{\mathbf{z}}$ is:

$$F = \frac{1}{2}\rho_{s\uparrow}(\mathbf{v}_{s\uparrow} - \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})^2 + \frac{1}{2}\rho_{s\downarrow}(\mathbf{v}_{s\downarrow} - \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})^2 + \quad (5)$$

$$+ \rho_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{v}_{s\uparrow} - \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r})(\mathbf{v}_{s\downarrow} - \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}), \quad (6)$$

where $\mathbf{v}_{s\uparrow} = (\hbar/2m)\nabla\Phi_{\uparrow}$ and $\mathbf{v}_{s\downarrow} = (\hbar/2m)\nabla\Phi_{\downarrow}$. Eq. (6) is the Andreev–Bashkin term [16] which mixes spin components and stabilizes the HQVs [17]. The energy of two separated HQVs is proportional to $(\rho_{s\uparrow} + \rho_{s\downarrow})$, while the energy of SQV is proportional to $(\rho_{s\uparrow} + \rho_{s\downarrow} + 2\rho_{\uparrow\downarrow})$. For $\rho_{\uparrow\downarrow} > 0$ the SQV splits into two HQVs, and the vortex lattice splits in two sublattices of spin-up and spin-down vortices in Fig. 1 with densities:

$$n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = \frac{2m\Omega}{\pi\hbar}. \quad (7)$$

Figure 1a demonstrates the lattice of HQVs in zero magnetic field, where $\Delta_{\downarrow\downarrow} = \Delta_{\uparrow\uparrow}$ and $\rho_{s\downarrow} = \rho_{s\uparrow}$. The elementary cell of the lattice contains two vortices: the spin-up and spin-down HQVs. They have opposite circulations of spin current and their spin currents are compensated.

When the polar phase is spin-polarized by the non-zero magnetic field $\mathbf{H} \parallel \hat{\mathbf{z}}$ in Fig. 1b, the balance between spin-up and spin-down vortices is violated, though their densities are the same as in Eq. (7). Vortices in the spin-down component have smaller superfluid density, $\rho_{s\downarrow} < \rho_{s\uparrow}$. The spin currents of spin-up and spin-down vortices are not compensated leading to the global spin current, which is proportional to $\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}$. This is similar to the mechanism of the formation of the global spin currents discussed in [18, 19].

¹⁾e-mail: grigori.volovik@aalto.fi

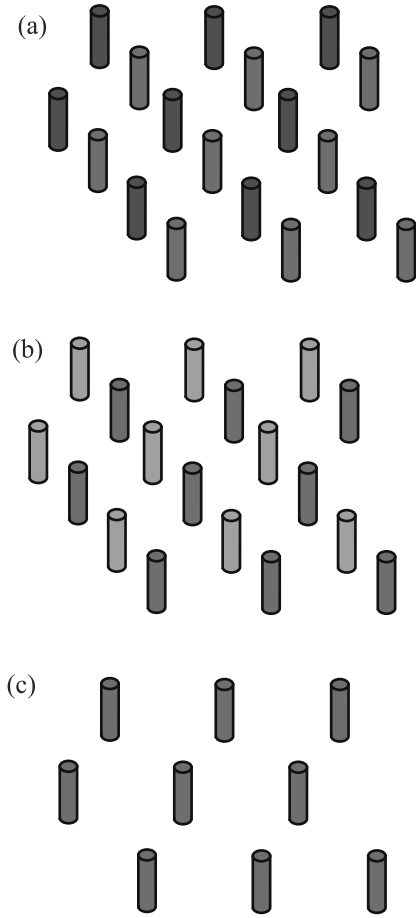


Fig. 1. (Color online) Illustration of vortices in (a) – polar phase, (b) – spin-polarized phase and (c) – β -phase in rotating cryostat

With increasing field the spin-down vortices are gradually evaporated, and spin-down lattice fades away at the transition to the β -phase in Fig. 1c, where $\rho_{s\downarrow} = \rho_{\uparrow\downarrow} = 0$, and only spin-up vortices remain:

$$\mathbf{A}_i = e^{i\phi} \Delta_{\uparrow\uparrow} \hat{z}_i (\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}}). \quad (8)$$

The lattice of these vortices has the same vortex density $n_{\uparrow}$ in Eq. (7) as in the polar phase.

The pinning of vortices by aerogel strands is strong [13, 14]. This leads to the formation of different vortex glasses [20] and to stabilization of different exotic structures [14, 21], including Bogoliubov Fermi surface [7, 8] and analogs of cosmic walls bounded by strings [22], see review paper [23]. The pinning may produce different routes in the transition from the polar phase to the β -phase under rotation. For example, instead of the two HQVs, the elementary cell in the spin polarized polar phase may contain SQV, which continuously transforms to the singly quantized vortex in the β phase.

In the other possible configuration, the elementary cell contains 3 objects: 2 spin-down HQVs and the spin vortex (SV) with the order parameter:

$$\mathbf{A}_i = \hat{z}_i (\Delta_{\uparrow\uparrow} (\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}}) e^{i\phi} + \Delta_{\downarrow\downarrow} (\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}}) e^{-i\phi}). \quad (9)$$

The total energy of three objects is proportional to $(\rho_{s\uparrow} + 3\rho_{s\downarrow} - 2\rho_{\uparrow\downarrow})$. Approaching the β -phase, two spin-down vortices fade away, while the SV continuously transforms to the SQV in Eq. (8).

I thank V. V. Dmitriev for discussions.

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 “Vortices in polar and β phases of ^3He ”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364022100071

1. D. Vollhardt and P. Wölfle, *The Superfluid Phases of Helium 3*, Taylor and Francis, London (1990).
2. G. E. Volovik, *The Universe in a Helium Droplet*, Clarendon Press, Oxford (2003).
3. T. Mizushima, Ya. Tsutsumi, T. Kawakami, M. Sato, M. Ichioka, and K. Machida, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 022001 (2016).
4. V. V. Dmitriev, A. A. Senin, A. A. Soldatov, and A. N. Yudin, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 165304 (2015).
5. W. P. Halperin, J. M. Parpia, and J. A. Sauls, *Phys. Today* **71**, 30 (2018).
6. V. V. Dmitriev, M. S. Kutuzov, A. A. Soldatov, and A. N. Yudin, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 265301 (2021).
7. V. B. Eltsov, T. Kamppinen, J. Rysti, and G. E. Volovik, arXiv:1908.01645.
8. S. Autti, J. T. Mäkinen, J. Rysti, G. E. Volovik, V. V. Zavjalov, and V. B. Eltsov, *Phys. Rev. Research* **2**, 033013 (2020).
9. T. T. Heikkilä, N. B. Kopnin, and G. E. Volovik, *JETP Lett.* **94**, 233 (2011).
10. N. B. Kopnin, T. T. Heikkilä, and G. E. Volovik, *Phys. Rev. B* **83**, 220503(R) (2011).
11. I. A. Fomin, *JETP* **127**, 933 (2018).
12. T. Hisamitsu, M. Tange, and R. Ikeda, *Phys. Rev. B* **101**, 100502 (2020).
13. 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).
14. J. T. Mäkinen, V. V. Dmitriev, J. Nissinen, J. Rysti, G. E. Volovik, A. N. Yudin, K. Zhang, and V. B. Eltsov, *Nat. Commun.* **10**, 237 (2019).
15. R. C. Regan, J. J. Wiman, and J. A. Sauls, *Phys. Rev. B* **104**, 024513 (2021).
16. A. F. Andreev and E. P. Bashkin, *JETP* **42**, 164 (1976).
17. V. Vakaryuk and A. J. Leggett, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 057003 (2009).
18. T. Brauner and S. Moroz, *Phys. Rev. B* **99**, 214506 (2019).
19. G. E. Volovik, *JETP Lett.* **111**, 582 (2020).
20. G. E. Volovik, J. Rysti, J. T. Mäkinen, and V. B. Eltsov, *J. Low Temp. Phys.* **196**, 82 (2019).
21. G. E. Volovik and K. Zhang, *Phys. Rev. Research* **2**, 023263 (2020).
22. T. W. B. Kibble, G. Lazarides, and Q. Shafi, *Phys. Rev. D* **26**, 435 (1982).
23. K. Zhang, arXiv:2107.01023.

Упругие диполи в кристаллических и стеклообразных алюминии и высокоэнтропийном сплаве $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{20}\text{Cr}_{20}\text{Co}_{20}\text{Cu}_{20}$

Р. А. Кончаков⁺¹⁾, А. С. Макаров⁺, А. С. Аронин^{+*}, Н. П. Кобелев^{*}, В. А. Хоник⁺

⁺ Воронежский государственный педагогический университет, 394043 Воронеж, Россия

^{*} Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 12 января 2022 г.

После переработки 26 января 2022 г.

Принята к публикации 26 января 2022 г.

Посредством молекулярно-динамического моделирования показано, что в некристаллических структурах Al и FeNiCrCoCu имеются анизотропные локальные атомные конфигурации, представляющие по существу упругие диполи. Аргументируется утверждение о том, что эти упругие диполи, схожие по своим колебательным характеристикам с межузельными гантелями в соответствующих кристаллах, формируют дефектную подсистему стеклообразного состояния. На этой основе предложен новый подход к решению задачи идентификации дефектов в модельных некристаллических структурах.

DOI: 10.31857/S123456782205007X

Введение. Проблема описания структуры стекол является, пожалуй, одной из наиболее интригующих в физике конденсированного состояния. Часто реализуемый подход заключается в выделении двух подсистем – аморфной матрицы и дефектов. Неоднозначное и порой противоречивое место такого подхода состоит в конкретной геометрической идентификации структурных дефектов в стекле. В литературе можно найти не один десяток различных представлений разной степени эффективности о том, что считать структурными дефектами стекол (см., например, ссылки в работах [1, 2]). Можно утверждать, что проблема идентификации дефектов некристаллического состояния до сих пор не имеет общепринятого решения.

Перспективный, на наш взгляд, подход к решению этой проблемы может дать межузельная теория (МТ) [3, 4], в основе которой лежат специфические представления о микроскопическом механизме плавления. Согласно МТ, вблизи температуры плавления начинается лавинообразный рост концентрации межузельных дефектов в гантельной конфигурации – межузельных гантелей [3, 4, 5]. При этом энергетически выгодным оказываться процесс кластеризации межузельных гантелей [6]. Кластеры межузельных гантелей сохраняют, в определенном смысле, свою идентичность как в жидком состоянии в виде групп атомов, осуществляющих струноподоб-

ное движение [7], так и в твердом стеклообразном состоянии, получаемом закалкой расплава.

Межузельные гантели и их кластеры являются частным случаем упругих диполей, которые в кристаллическом состоянии определяются как локальные нарушения точечной симметрии [8]. Понижение локальной точечной симметрии приводит к частичному снятию вырождения фононных состояний, что проявляется в виде характерных низкочастотных (около 2 ТГц) и высокочастотных (выше дебаевской частоты) пиков в локальном спектре колебательной плотности состояний атомов, формирующих ядро межузельной гантели [9]. Низкочастотные особенности колебательных спектров как кристаллов, так и стекол имеют важнейшее значение для описания релаксационных процессов, связанных с дефектами типа упругих диполей [10].

Попытки использования представлений об упругих диполях ранее предпринимались, например, для объяснения флуктуаций плотности [11] и некоторых низкотемпературных свойств стекол [12]. Однако потенциал таких представлений удалось раскрыть относительно недавно в рамках МТ, объяснив, в частности, взаимосвязь изменений модуля сдвига металлических стекол с тепловыделением при их структурной релаксации и кристаллизации [13, 14, 4]. При этом конкретная процедура определения упругих диполей в компьютерных моделях некристаллической структуры оставалась неясной. Цель настоящей работы состоит в разработке способа идентификации упругих диполей в стеклообразном состоянии

¹⁾ e-mail: konchakov.roman@gmail.com

и, на этой основе, выделения дефектной подсистемы стекла.

Методика моделирования. Универсальной характеристикой дефектов любого типа, в том числе упругих диполей, является дипольный тензор P_{ij} , который в общем случае определяется как производная тензора механических напряжений σ_{ij} по числу n дефектов в единице объема при постоянной деформации ε [15, 16, 17],

$$P_{ij} = \left. \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial n} \right|_{\varepsilon}. \quad (1)$$

Величина $\partial \sigma_{ij}$ характеризует изменение напряжений, вызванное дефектами.

В случае компьютерной модели кристалла дипольные тензоры как отдельных дефектов, так и их кластеров, можно вычислять по приближенной формуле

$$P_{ij} \approx V_0(\sigma_{ij}^{N+n^{def}} - \sigma_{ij}^N)/n^{def}, \quad (2)$$

где N – число атомов в идеальной кристаллической решетке, n^{def} – число дефектов, V_0 – объем модельной системы. В этой формуле σ_{ij}^N (тензор напряжений в бездефектном кристалле) играет роль референсного тензора напряжений.

Для стеклообразной системы ситуация значительно усложняется, так как не существует корректного определения “идеального” (бездефектного) состояния стекла. Мы предлагаем каждому m -му атому модельной системы сопоставить дипольный тензор

$$P_{ij}^m = V_0(\sigma_{ij}^{Ng} - \sigma_{ij}^m), \quad (3)$$

где σ_{ij}^{Ng} – тензор напряжений в исходной стеклообразной системе, а σ_{ij}^m – тензор напряжений после удаления из системы m -го атома [18]. Перед вычислением тензора σ_{ij}^{Ng} осуществляется оптимизация структуры с изменением объема модельной системы. После удаления из системы m -го атома выполняется оптимизация структуры без изменения объема (сохраняя $\varepsilon = \text{const}$, согласно формуле (1)) и вычисляется тензор σ_{ij}^m . Таким образом, в качестве референсного состояния используется само исходное стеклообразное состояние.

Безразмерной характеристикой симметрии деформационного поля упругого диполя является λ -тензор [8],

$$\lambda_{ij} = \frac{1}{\Omega} S_{ijkl} P_{kl}, \quad (4)$$

где Ω – объем в расчете на атом, S_{ijkl} – тензор упругой податливости.

Рассчитанные нами тензоры P_{ij} и λ_{ij} для дальнейшего анализа приводились к диагональному виду

и представлялись в виде суммы шаровой и девиаторной компонент,

$$\lambda_{ij} = \frac{1}{3} \delta_{ij} \lambda_{ll} + \left(\lambda_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \lambda_{ll} \right), \quad (5)$$

где δ_{ij} – символ Кронекера.

Модельные расчеты выполнялись в пакете LAMMPS [19]. Размер модельной системы для Al и Fe₂₀Ni₂₀Cr₂₀Co₂₀Cu₂₀ (ат. %) составлял 4000 атомов, т.е. $10 \times 10 \times 10$ трансляций ГЦК решетки. Системы достаточно маленькие, но в первом приближении можно пренебречь взаимодействием дефектов со своими “зеркальными отражениями”, возникающими вследствие использования периодических граничных условий, так как поля упругих напряжений дефектов хоть и являются дальнедействующими, но по абсолютной величине достаточно быстро убывают обратно пропорциональной третьей степени расстояния от ядра дефекта.

Многочастичные межатомные потенциалы типа *eam* для Al и FeNiCrCoCu были взяты из работ [21, 22] соответственно. Межатомный потенциал для алюминия ранее нами уже был использован в работах [2, 5], он удовлетворительно описывает характеристики точечных дефектов, упругие модули и особенности спектра колебательной плотности состояний. С потенциалом для FeNiCrCoCu ситуация чуть сложнее. Нам известно, что получаемые с помощью него результаты скорее качественные, чем количественные. Тем не менее, мы полагаем, что для грубой иллюстрации предлагаемого нами метода идентификации дефектов его вполне можно использовать.

Визуализация модельной системы выполнялась в программе OVITO [20]. Колебательная плотность состояний (VDoS) $g(\nu)$ вычислялась как квадрат модуля преобразования Фурье автокорреляционной функции скорости. При этом для каждой конфигурации модельной системы проводилось усреднение 100 колебательных спектров VDoS. Для расчета колебательных спектров система предварительно уравнивалась при $T = 30$ К и нулевом внешнем давлении.

Мы исследовали простейшие варианты упругих диполей в кристалле – межузельные гантели и их небольшие кластеры. Межузельные гантели вносились в систему при нулевой температуре. При расчете дипольных тензоров выполнялась релаксация системы методом сопряженных градиентов. Объем в расчете на атом вычислялся путем разбиения системы на многогранники Вороного.

Стеклообразное состояние модели получалось путем закалки расплава от 3000 К до близкой к нулю температуры со скоростью охлаждения $5 \cdot 10^{13}$ К/с.

Выбор такой высокой скорости охлаждения обусловлен тем, что сплавы системы FeNiCrCoCu и чистые металлы плохо стеклуются при более низких скоростях закалки.

Результаты моделирования и обсуждение.

В первую очередь мы оценили адекватность использования формулы (3) при оценке дипольного тензора упругого диполя. Косвенным обоснованием предложенного метода может служить следующее. Частным случаем упругого диполя является межузельный дефект в гантельной конфигурации – межузельная гантель. Было установлено, что если формулу (3) применить к кристаллу с межузельной гантелью, то значения P_{ij}^m совпадают с P_{ij} , вычисленными по формуле (2).

На рисунке 1 показан фрагмент модельной системы вблизи межузельной гантели ориентации [001] в монокристаллическом алюминии. Стрелками показаны направления главных осей дипольных тензоров P_{ij}^m , вычисленных по формуле (3). Длины стрелок нормированы на значения максимальных компонент соответствующих дипольных тензоров P_{ij}^m , приведенных к диагональному виду, а направления совпадают с осями, соответствующими максимальным компонентам. В случае высокоэнтропийного сплава FeNiCrCoCu ось дипольного тензора, в отличие от алюминия, не параллельна оси межузельной гантели, а для каждого узла решетки зависит от комбинации сортов атомов ближайшего окружения.

Из рисунка 1 видно, что для ядра дефекта (пара атомов, формирующих собственно гантель) и для атомов из первой и второй координационных сфер величина и направление осей дипольных тензоров практически совпадают. На микроскопическом уровне это означает, что независимо от того, удаляется ли атом из ядра дефекта или из его ближайшего окружения, система все равно в результате оптимизации структуры принимает конфигурацию идеальной решетки.

Как отмечено выше, значения компонент дипольных тензоров межузельных гантелей, вычисленные по формулам (2) и (3), одинаковы. Для алюминия значения $P_{11} = P_{22} = 14.2$ эВ, $P_{33} = 14.9$ эВ согласуются с более ранними оценками для меди и алюминия [15, 23, 18]. Для сплава FeNiCrCoCu, где усреднение дипольного тензора проводилось по всем узлам модельной решетки, $P_{11} = P_{22} = 19.9$ эВ, $P_{33} = 20.2$ эВ. Какие-либо соответствующие литературные значения для этого или похожего по составу сплава нам неизвестны. В случае вакансий $P_{ii} = -4.6$ эВ для FeNiCrCoCu и $P_{ii} = -4.0$ эВ для алюминия.

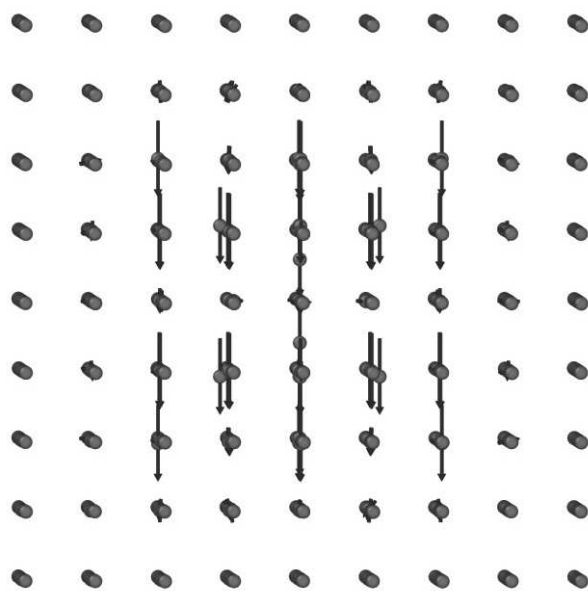


Рис. 1. (Цветной онлайн) Фрагмент монокристалла Al вблизи межузельной гантели ориентации [001]. Стрелками показаны направления главных осей дипольных тензоров P_{ij}^m , вычисленных по формуле (3). Длины стрелок нормированы на значения максимальных компонент дипольных тензоров P_{ij}^m , приведенных к диагональному виду

Преимуществом формулы (3) по сравнению с формулой (2) является то, что можно сопоставить дипольный тензор не только дефекту, как целому, а любому атому модельной системы, в том числе из ядра дефекта или его ближайшего окружения. Это может дать дополнительную полезную информацию о свойствах дефектов. Например, можно оценить размер дефекта, как будет показано ниже.

Еще одним косвенным способом проверки адекватности формулы (3) может служить реакция системы на возвращение обратно удаленного из нее атома. Соответствующая процедура состоит в следующем. Выполняется релаксация системы с изменением объема, запоминается радиус-вектор m -го атома $\mathbf{r}_1^m$, атом удаляется из системы, выполняется релаксация структуры без изменения объема, атом возвращается в исходную точку $\mathbf{r}_1^m$, снова выполняется релаксация структуры (уже без изменения объема), запоминается конечное положение возвращенного атома $\mathbf{r}_2^m$ и вычисляется величина смещения $\Delta r^m = |\mathbf{r}_2^m - \mathbf{r}_1^m|$.

На рисунке 2 показаны гистограммы распределения величин Δr^m в кристаллических Al и FeNiCrCoCu с одним межузельным атомом ориентации [001] в структуре. Видно, что лишь несколько десятков атомов заметно смещаются при

вышеописанной процедуре возврата. Это атомы, формирующие ближайшее окружение межузельной гантели. Число таких атомов составляет 32 для Al и ≈ 39 для FeNiCrCoCu (может варьироваться в зависимости от комбинации сортов атомов ближайшего окружения). Эти несколько десятков атомов можно считать грубой оценкой размера межузельной гантели в кристалле.

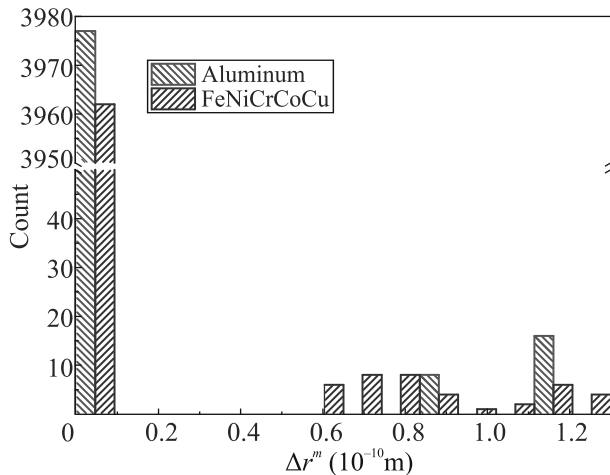


Рис. 2. (Цветной онлайн) Гистограммы распределений Δr^m в кристаллах Al и FeNiCrCoCu

Как было упомянуто выше, кластеризация дефектов является энергетически выгодным процессом. При этом есть основания предполагать, что кластеризация упругих диполей типа межузельных гантелей может играть важную роль в механизме формирования структурных элементов жидкого и стеклообразного состояния [2]. На рисунке 3 показана зависимость максимальных девиаторных компонент дипольного тензора и λ -тензора от числа n^{def} межузельных дефектов в кластере. Анализ девиаторных компонент дипольных тензоров представляет особый интерес, потому что, как известно, упругие диполи эффективно взаимодействуют именно с полем сдвиговых напряжений.

Как видно из рис. 3, наибольшие значения P_{ij} и λ_{ij} имеют место для кластеров из 2-х или 3-х межузельных гантелей, что вполне объяснимо с точки зрения изменения локальной точечной симметрии. Действительно, идеальная ГЦК решетка имеет точечную группу симметрии O_h . Формирование дефектов типа упругих диполей приводит к снижению локальной точечной симметрии. В частности, одиночная межузельная гантель в наиболее устойчивой ориентации [001] имеет точечную группу симметрии D_{4h} . Снижение локальной симметрии, как уже упоминалось ранее, проявляется в виде выраженных низкочастот-

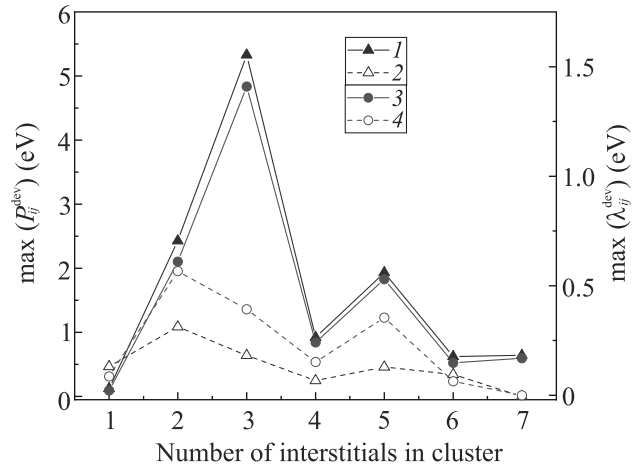


Рис. 3. (Цветной онлайн) Максимальные девиаторные компоненты дипольных тензоров межузельных кластеров в кристаллах FeNiCrCoCu (1) и Al (2), а также λ -тензоров в кристаллах FeNiCrCoCu (3) и Al (4)

ных и высокочастотных пиков в локальном спектре колебательной плотности состояний атомов, формирующих ядро упругого диполя типа межузельной гантели [9].

Кластеризация межузельных гантелей приводит к кардинальному снижению локальной точечной симметрии. Так, кластер из двух межузельных гантелей имеет группу симметрии C_s . В случае трех межузельных гантелей их наиболее устойчивая конфигурация имеет примитивную группу симметрии C_1 , содержащую только элемент идентичности. Дальнейшая кластеризация гантелей приводит к повышению локальной симметрии кластера и для 7-ми межузельных дефектов их наиболее устойчивая конфигурация представляет собой идеальный икосаэдр [2]. В последнем случае соответствующая атомная конфигурация имеет изотропный дипольный тензор, т.е. его девиаторная компонента, согласно рис. 3, близка к нулю.

Данные, показанные на рис. 3, согласуются с нашим предыдущим анализом колебательных спектров и диаэластической поляризуемости межузельных кластеров в алюминии [2], по результатам которого была высказана гипотеза о межузельном механизме формирования дефектов и аморфной матрицы стеклообразного состояния. В частности, было показано, что дефекты в стеклообразном алюминии могут формироваться на основе малых кластеров из 2–3 межузельных гантелей.

На рисунке 4 показаны распределения максимальных девиаторных и сферических компонент тензоров P_{ij}^m , рассчитанных по формуле (3) для каждого атома модельного стекла FeNiCrCoCu. Из их срав-

нения видно, что распределение сферических компонент близко к нормальному, тогда как для девиаторных компонент имеется выраженный “хвост” в области больших значений и распределение близко к логнормальному. Для стеклообразного алюминия наблюдается аналогичная закономерность. Мы полагаем, что именно атомы с большими девиаторными компонентами дипольных тензоров и формируют дефектную подсистему стекла.

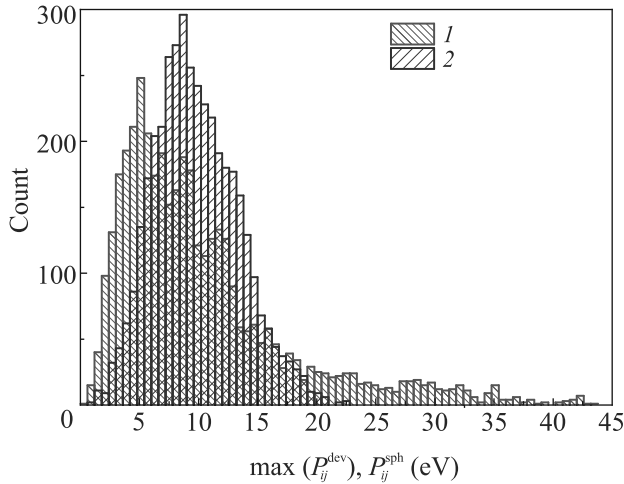


Рис. 4. (Цветной онлайн) Распределение максимальных девиаторных (1 – $\max(P_{ij}^{\text{dev}})$) и сферических (2 – P_{ij}^{sph}) компонент дипольных тензоров P_{ij}^m в стекле FeNiCrCoCu

Справедливость такого вывода можно оценить путем анализа спектров VDoS. На рисунке 5 приведены спектры колебательной плотности состояний $g(\nu)$ стекол Al и FeNiCrCoCu, как для всей системы (зеленые символы), так и для отдельных ее частей с наибольшими значениями девиаторных компонент дипольных тензоров P_{ij}^m (красные символы). Красные кривые, соответствующие атомам с большими значениями девиаторных компонент P_{ij}^m , имеют выраженные пики в области низких частот. Это может служить подтверждением нашей гипотезы о принадлежности атомов с большими значениями девиаторных компонент дипольных тензоров к дефектной подсистеме стекла, так как низкочастотные особенности колебательного спектра являются характерным свойством упругих диполей [9].

Для того, чтобы определить, относится ли данный атом к дефектной подсистеме, выполнялось сравнение максимальных девиаторных компонент дипольных тензоров P_{ij}^m с определенным граничным значением. Мы предположили, что в качестве граничного можно использовать значение, совпадающее

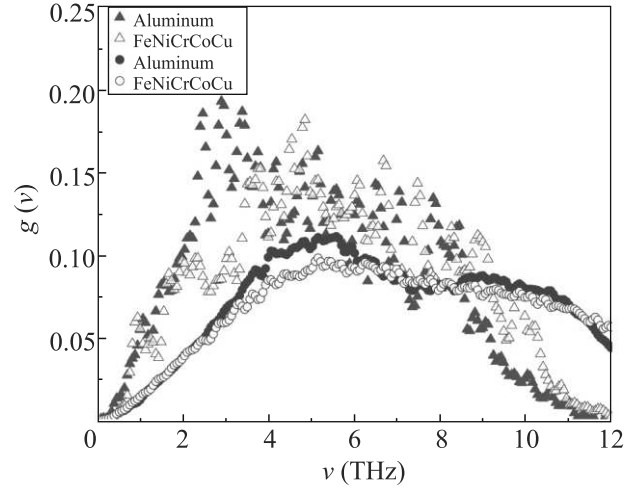


Рис. 5. (Цветной онлайн) Спектры колебательной плотности состояний для стеклообразных Al и FeNiCrCoCu. Кругами показаны колебательные спектры для всей модельной системы, треугольниками – для ее дефектной подсистемы

с окончанием распределения сферических компонент (см. рис. 4). Это значение примерно в 2.5 раза превышает среднее значение девиаторной компоненты. Оказалось, что в этом случае для FeNiCrCoCu оценка концентрации дефектов в стекле, полученная из анализа дипольных тензоров, практически совпадает с оценкой концентрации дефектов по формуле Гранато [3]

$$c = \ln(G^{\text{cryst}}/G^{\text{glass}})/\beta, \quad (6)$$

где β – сдвиговая восприимчивость упругих диполей типа межузельных гантелей, G^{cryst} и G^{glass} – модули сдвига кристалла и стекла, соответственно, определенные в работе [24]. То же самое справедливо и для алюминия.

На рисунке 6 показана реакция подсистемы дефектов в стекле FeNiCrCoCu на сдвиговую деформацию модельной системы. В качестве дефектной подсистемы были выбраны атомы, у которых девиаторная компонента в 2.5 раза превышает ее среднее значение. Стрелками показаны проекции направлений осей дипольных тензоров упругих диполей на плоскость рисунка. Как и выше, под осью диполя понимается главная ось с максимальной амплитудой. Длины стрелок пропорциональны максимальным компонентам соответствующих дипольных тензоров. Для удобства восприятия атомы разных сортов показаны одним цветом. Для стеклообразного алюминия качественно наблюдается аналогичная картина.

Как видно из рис. 6, при наложении сдвиговой деформации (в плоскости рисунка), а также при изме-

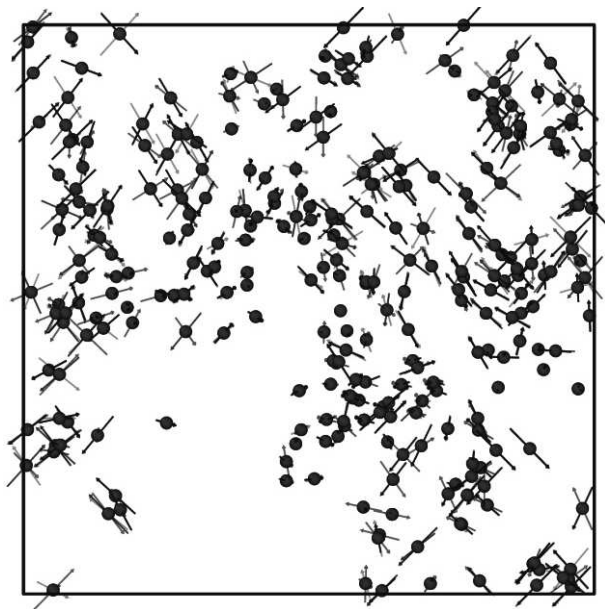


Рис. 6. (Цветной онлайн) Реакция упругих диполей дефектной подсистемы стеклообразного FeNiCrCoCu на сдвиговую деформацию в плоскости рисунка. Синие стрелки – ориентация осей упругих диполей при отсутствии деформации. Красные и зеленые стрелки соответствуют деформациям $\varepsilon = +10^{-3}$ и $\varepsilon = -10^{-3}$ соответственно

нении ее знака, оси дипольных тензоров большинства атомов дефектной подсистемы заметно меняют направление. Такая реакция дефектной подсистемы свидетельствует о том, что ее можно рассматривать как распределенную сеть упругих диполей, эффективно взаимодействующих с приложенным сдвиговым напряжением. Следует отметить, что нами не обнаружена какая-либо корреляция между распределением упругих диполей в стекле и распределениями областей пониженной или повышенной плотности.

Исходя из вышеизложенного, можно предложить следующий относительно простой способ выделения в модельной аморфной системе тех групп атомов, которые являются частью дефектной подсистемы. По формуле (3) каждому атому системы ставится в соответствие тензор P_{ij}^m , для которого выделяется девиаторная компонента. Строится распределение максимальных девиаторных компонент дипольных тензоров и выделяются атомы, формирующие “хвост” распределения, в котором значения девиаторных компонент в некоторое число раз и более превышают их среднее значение (процедура оценки этого числа проиллюстрирована выше). Концентрация таких атомов для рассмотренных примеров стеклообразных Al и

FeNiCrCoCu оказывается равной нескольким процентам, как и предсказывает межузельная теория [3].

Заключение. Методами молекулярной динамики и статистики вычислены дипольные тензоры межузельных дефектов и их кластеров в кристаллах Al и FeNiCrCoCu. Наибольшие значения девиаторных компонент дипольных тензоров наблюдаются в случае кластеров из 2–3 межузельных гантелей.

Для стекол Al и FeNiCrCoCu установлена корреляция больших значений девиаторных компонент дипольных тензоров атомов с низкочастотными особенностями спектров их локальной колебательной плотности состояний. Это может свидетельствовать о принадлежности указанных атомов к дефектной подсистеме стекол. Какая-либо корреляция девиаторных компонент дипольных тензоров упругих диполей с локальной плотностью структуры не обнаружена.

Предложен новый подход к проблеме выделения дефектной подсистемы в модельных стеклах, основанный на вычислении компонент дипольных тензоров атомов. Показано, что выделенная предложенным методом дефектная подсистема представляет собой разветвленную сеть упругих диполей.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда 20-62-46003.

1. H. Fan, Z. Fan, X. Liu, Z. Lu, and E. Ma, *Mater. Horiz.* **8**, 2359 (2021).
2. R. A. Konchakov, A. S. Makarov, N. P. Kobelev, A. M. Glezer, G. Wilde, and V. A. Khonik, *J. Phys.: Condens. Matter* **31**, 385703 (2019).
3. A. V. Granato, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 974 (1992).
4. V. Khonik and N. Kobelev, *Metals* **9**, 605 (2019).
5. Р. А. Кончаков, А. С. Макаров, А. С. Аронин, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 341 (2021).
6. W. Ingle, R. C. Perrin, and H. R. Schober, *J. Phys. F: Met. Phys.* **11**, 1161 (1981).
7. C. Donati, J. F. Douglas, W. Kob, S. J. Plimpton, P. H. Poole, and S. C. Glotzer, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2338 (1998).
8. A. S. Nowick and B. S. Berry, *Anelastic Relaxation in Crystalline Solids*, Academic, N.Y. (1972).
9. P. H. Dederichs, C. Lehman, H. R. Schober, A. Scholz, and R. Zeller, *J. Nucl. Mater.* **69–70**, 176 (1978).
10. A. Makarov, G. Afonin, K. Zakharov, A. Vasiliev, J. Qiao, N. Kobelev, and V. Khonik, *Intermetallics* **141**, 107422 (2022).
11. J. Jäckle and K.-L. Jüngst, *Z. Phys. B* **30**, 243 (1978).
12. E. R. Grannan, M. Randeria, and J. P. Sethna, *Phys. Rev. B* **41**, 7784 (1990).

13. N.P. Kobelev, V.A. Khonik, A.S. Makarov, G.V. Afonin, and Yu.P. Mitrofanov, *J. Appl. Phys.* **115**, 033513 (2014).
14. N.P. Kobelev, V.A. Khonik, G.V. Afonin, and E.L. Kolyvanov, *J. Non-Cryst. Solids* **411**, 1 (2015).
15. V. Spiric, L.E. Rehn, K.-H. Robrock, and W. Schilling, *Phys. Rev. B* **15**, 672 (1977).
16. D.A. Freedman, D. Roundy, and T.A. Arias, *Phys. Rev. B* **80**, 064108 (2009).
17. J.S. Wrobel, M.R. Zemła, D. Nguyen-Manh, P. Olsson, L. Messina, C. Domain, T. Wejrzanowski, and S.L. Dudarev, *Comput. Mater. Sci.* **194**, 110435 (2021).
18. Р. А. Кончаков, В. А. Хоник, Н. П. Кобелев, *ФТТ* **57**, 844 (2015).
19. J. Plimpton, *J. Comp. Phys.* **117**, 1 (1995).
20. A. Stukowski, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18**, 015012 (2010).
21. Y. Mishin, D. Farkas, M.J. Mehl, and D.A. Papaconstantopoulos, *Phys. Rev. B* **59**, 3393 (1999).
22. D. Farkas and A. Caro, *J. Mater. Res.* **33**, 3218 (2018).
23. W. Schilling, *J. Nucl. Mater.* **69–70**, 465 (1978).
24. М. А. Кретьова, Р. А. Кончаков, Н. П. Кобелев, В. А. Хоник, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 806 (2020).

Электронная структура магнитных топологических изоляторов серии $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ при изменении концентрации атомов Sb

Д. А. Глазкова^{a,1)}, Д. А. Естюнин^a, И. И. Климовских^{a,b}, Т. П. Макарова^a, О. Е. Терещенко^{c,d,e}, К. А. Кох^{e,f,g},
В. А. Голяшов^{c,d,e}, А. В. Королева^a, А. М. Шикин^a

^a Санкт-Петербургский государственный университет, 198504 С.-Петербург, Россия

^b Национальный исследовательский технологический институт МИСиС, 119049 Москва, Россия

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

^d ЦКП “СКИФ”, Институт катализа им. Г. К. Борескова Сибирского отделения РАН, 630559 Кольцово, Россия

^e Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

^f Институт геологии и минералогии им. В. С. Соболева Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

^g Кемеровский государственный университет, 650000 Кемерово, Россия

Поступила в редакцию 3 февраля 2022 г.

После переработки 3 февраля 2022 г.

Принята к публикации 3 февраля 2022 г.

Собственный магнитный топологический изолятор MnBi_2Te_4 представляет собой многообещающую платформу для реализации квантового аномального эффекта Холла при повышенных температурах и других уникальных топологических эффектов. Однако для этого запрещенная зона в точке Дирака должна располагаться на уровне Ферми. Одним из широко используемых способов сдвига точки Дирака в область уровня Ферми является частичное замещение атомов Bi атомами Sb. В данной работе представлены результаты исследований электронной структуры основных уровней и валентной зоны для соединений $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ при изменении концентрации (x) атомов Sb (от 0 до 1). Показано, что с увеличением концентрации атомов Sb точка Дирака сдвигается в сторону уровня Ферми с локализацией на уровне Ферми при $x \approx 0.3$. При этом наблюдается “жесткий” сдвиг валентной зоны, включая уровень $\text{Mn } 3d$, без видимых изменений структуры валентной и зоны проводимости. Концентрационная зависимость сдвига точки Дирака аппроксимируется корневой функцией, что соответствует линейному возрастанию плотности носителей заряда.

DOI: 10.31857/S1234567822050081

В последнее время исследования магнитных топологических изоляторов (ТИ) привлекают повышенное внимание благодаря уникальной комбинации топологических и магнитных свойств в данных материалах. Такая комбинация позволяет реализовывать многие теоретически предсказанные эффекты, такие как состояние квантового аномального эффекта Холла (КАЭХ), состояние аксионного изолятора, топологическое сверхпроводящее состояние и состояние полуметалла Вейля [1–8]. Однако для успешной реализации таких состояний необходимо внедрение магнетизма в ТИ, как в материалы исходно немагнитные, для открытия энергетической запрещенной зоны (ЭЗЗ) в точке Дирака в электронной структуре топологических поверхностных состояний.

Первоначальные способы введения магнетизма в ТИ были основаны на легировании ТИ магнитными примесями или на эффекте близости в магнитных гетероструктурах [9–15]. Повышение концентрации магнитных примесей приводит к увеличению обменного взаимодействия и величины ЭЗЗ в точке Дирака, но при этом зачастую увеличивает дефектность, снижает качество образца и уменьшает подвижность электронов [12]. Вследствие этого многие квантовые эффекты, включая КАЭХ, реализуемые в магнитно-легированных ТИ, наблюдаются только при чрезвычайно низких температурах (0.1–1 К) [11].

Избежать такого увеличения дефектности удалось с открытием собственного стехиометрического магнитного ТИ MnBi_2Te_4 , благодаря тому, что в данном материале магнитные атомы включены непосредственно в структуру в качестве слоя [16]. Это

¹⁾ e-mail: daria.a.glazkova@gmail.com

позволило увеличить открываемую в точке Дирака ЭЗЗ, а так же существенно поднять температуру КАЭХ [17], приблизив ее к температуре магнитного перехода (для легированных ТИ температура КАЭХ ниже температуры магнитного перехода на несколько порядков).

Монокристаллы MnBi_2Te_4 характеризуются сильным электронным легированием: точка Дирака имеет энергию связи 0.25–0.28 эВ, а уровень Ферми располагается в области зоны проводимости [16–20]. Однако для реализации КАЭХ точка Дирака и соответствующая ЭЗЗ должны быть локализованы на уровне Ферми. Одним из хорошо известных и широко применяемых способов энергетического сдвига конуса Дирака для ТИ на основе Bi_2Te_3 [21] является замещение некоторой части атомов Bi атомами Sb, которые вносят дырочный характер проводимости в ТИ. При этом соединение $(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_3$ сохраняет свои топологические свойства во всем диапазоне концентраций легированных атомов Sb (x от 0 до 1). С повышением концентрации атомов Sb тип носителей заряда в ТИ меняется на дырочный, и точка Дирака сдвигается в сторону уровня Ферми. При некотором значении x происходит переход через точку компенсированного полупроводника от n -типа легирования к p -типу. Для магнитных ТИ дробной стехиометрии $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ при замещении атомов Bi атомами Sb концентрация носителей заряда изменяется схожим образом [22–24].

При этом было выявлено, что дробная стехиометрия вносит и другие изменения. Меняется магнитная структура [22] и транспортные свойства материала, понижается температура Нееля [23]. Была показана возможность изменения запрещенной зоны в топологических состояниях [24]. При этом в целом по работам нет общего согласия по уровню концентрации Sb, при котором точка Дирака находится на уровне Ферми [22–27]. В работе [23] было выявлено, что на необходимый уровень концентрации атомов Sb могут влиять способ и детали синтеза исследуемых образцов.

Данная работа посвящена детальному изучению изменений электронной структуры остовных уровней и валентной зоны объемных кристаллов дробной стехиометрии $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ с вариацией уровня концентраций атомов Sb во всем диапазоне от $x = 0$ и до $x = 1$. Измерения структуры валентной зоны и остовных уровней проводились методами фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) с использованием синхротронного излучения. Для однозначной

взаимосвязи измеренных спектров остовных уровней и валентной зоны измерения проводились в одной и той же точке и одних и тех же условиях. Тем самым было получено однозначное соответствие между стехиометрией образца и энергетическим сдвигом точки Дирака при вариации концентрации атомов Sb.

Экспериментальные результаты и обсуждение. В работе исследовалась серия образцов со стехиометрией $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ при вариации концентрации атомов Sb с заложенным при росте содержанием Sb $x = 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ и 1.

Образцы выращивались методом Бриджмена, для которого возможна некоторая неоднородность стехиометрии по объему. Таким образом, для детальной характеристики образца (концентрации Sb, Bi, Te, Mn и положения точки Дирака) фотоэмиссионные измерения для каждого образца проводились в одной точке при изменении энергии фотонов (см. Методы).

Структурное качество образцов проверялось методом дифракции медленных электронов (ДМЭ). На рисунке 1а представлена картина, полученная методом ДМЭ, снятая при энергии электронов 75 эВ для образца $\text{Mn}(\text{Bi}_{0.6}\text{Sb}_{0.4})_2\text{Te}_4$. Картина ДМЭ характеризуется гексагональным расположением рефлексов. Голубыми линиями на рис. 1а отмечена элементарная ячейка в обратном пространстве. Подобные картины ДМЭ характерны для материалов с кристаллической структурой $R\bar{3}m$, которой обладают материалы $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$. Картины ДМЭ такого типа сохранялись для всех измеренных образцов, что свидетельствует об одинаковой кристаллической структуре, а резкость наблюдаемых рефлексов свидетельствует о высоком качестве полученных образцов.

Для изучения изменений электронной структуры образцов $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ в зависимости от уровня легирования атомами Sb были одновременно использованы методы РФЭС и ФЭСУР.

На рисунке 1b показаны спектры остовных уровней, измеренные методом РФЭС, для образцов с различной концентрацией атомов Sb. Спектры представлены в диапазоне энергий связи 20–50 эВ, что позволяет одновременно анализировать дублеты пиков остовных уровней Bi 5d, Sb 4d, Te 4d, и Mn 3p – т.е. всех элементов, которые должны содержаться в образце. На основе данных спектров была вычислена концентрация атомов Sb (и остальных элементов) для исследуемых областей для образцов. Полученные значения концентрации атомов Sb представлены над соответствующими спектрами. Можно видеть, как с увеличением концентрации атомов Sb плавно

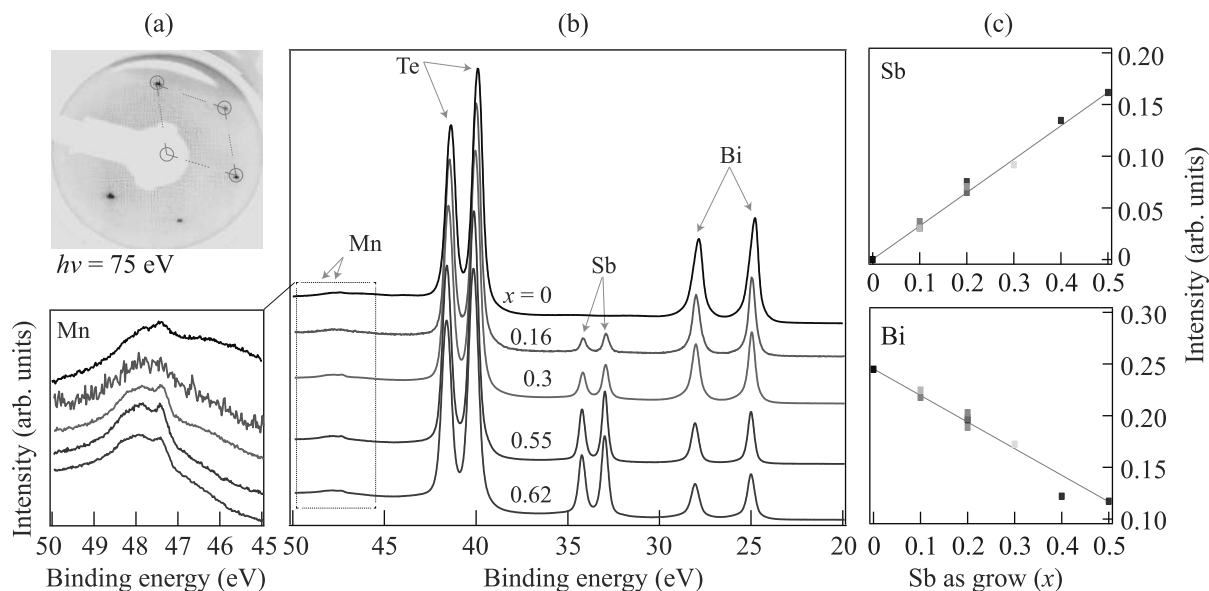


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Картина ДМЭ с гексагональным расположением рефлексов, характерным для всех образцов $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$. Голубыми пунктирными линиями отмечена элементарная ячейка. (b) – Изменение структуры и интенсивности основных уровней Bi, Te, Sb и Mn в РФЭС спектрах, измеренных при $h\nu = 120 \text{ эВ}$ при изменении концентрации атомов Sb. Вставка слева снизу показывает подробнее структуру уровней Mn 3p. (c) – Измеренное методом РФЭС изменение относительной интенсивности пиков Sb (сверху) и Bi (снизу) от заложенной при росте образца доли атомов Sb. Различные цвета соответствуют различным образцам

снижается интенсивность пика Bi и увеличивается интенсивность пика Sb.

На вставке слева снизу на рис. 1b показаны спектры линии Mn 3p для разных концентраций Sb. При их рассмотрении видно, что ни интенсивность пика, ни его форма значительно не меняются для всех стехиометрий измеряемых образцов, что указывает на приблизительно постоянную концентрацию атомов Mn в исследуемых образцах и, косвенно, на стабильность магнитных свойств материала.

На рисунке 1c приведена измеренная методом РФЭС зависимость относительной интенсивности пиков Sb (сверху) и Bi (снизу) от концентрации атомов Sb, заложенной при росте. Различные цвета точек соответствуют различным измеренным образцам. Относительная нормировка интенсивности пиков выполнена таким образом, чтобы сумма интенсивностей представленных пиков Bi 5d, Sb 4d, Te 4d и Mn 3p была равна 1. Представленная зависимость демонстрирует линейное увеличение относительной интенсивности пика Sb, с некоторым разбросом для различных образцов, что указывает на ожидаемое линейное возрастание доли Sb в стехиометрии. На нижнем рисунке 1c представлена аналогичная зависимость для изменений интенсивности основных уровней Bi. Видно, что относительная интенсивность пика Bi линейно уменьшается.

Для оценки концентраций атомов из анализа интенсивности соответствующих пиков в РФЭС спектрах (в конкретных точках образца) была использована база данных сечений фотоионизации основных уровней Тржасковской [28]. Анализ с использованием этой базы данных показал следующие результаты для величины x : ~ 0.16 вместо 0.1, ~ 0.3 вместо 0.2, ~ 0.38 вместо 0.3, ~ 0.55 вместо 0.4, ~ 0.62 вместо 0.5. Как видно, для всех исследованных образцов измеренные концентрации оказались выше заложенных при росте.

Эффект превышения расчетной концентрации атомов Sb относительно заложенной при росте отмечался ранее в работе [29]. Это может быть вызвано как особенностью роста, так и особенностью оценки. Рост кристалла проводился не из расплава, а из растворителя на основе $(\text{Bi}, \text{Sb})_2\text{Te}_3$. Таким образом, данные химического анализа свидетельствуют о преимущественном вхождении сурьмы в кристалл относительно растворителя. Анализ образцов из разных частей слитка показал сохранение Bi/Sb соотношения в процессе кристаллизации $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$. В свою очередь, оценка концентраций зависит от используемых баз данных.

Для того чтобы определить изменения уровня легирования образцов $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ и сдвига точки Дирака относительно уровня Ферми при измене-

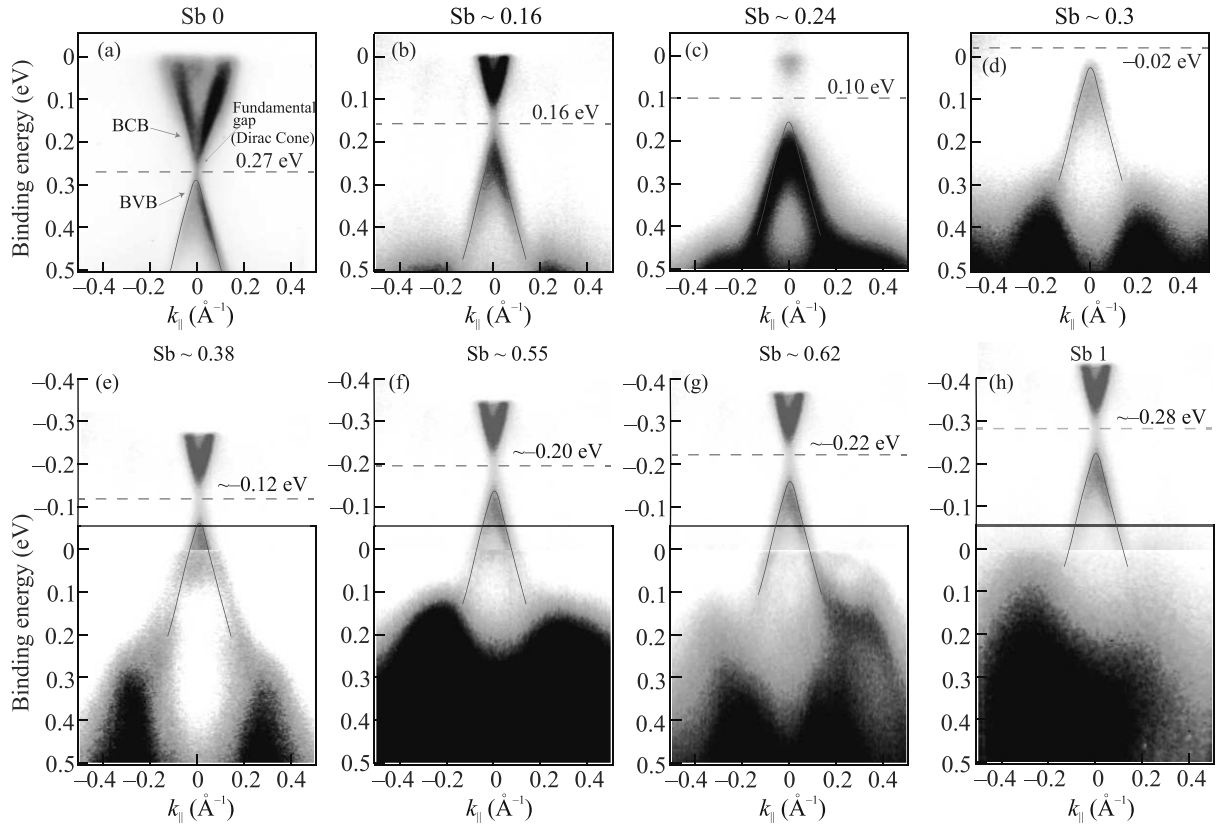


Рис. 2. (Цветной онлайн) Изменение структуры валентных состояний и положения точки Дирака в зависимости от концентрации атомов Sb. Для концентраций выше $x = 0.3$ положение точки Дирака оценивается посредством наложения спектра, измеренного при концентрации $x = 0.16$ (представлен полупрозрачным, черно-белым). Положение точки Дирака отмечено горизонтальной голубой пунктирной линией

нии концентрации атомов Sb, методом ФЭСУР были измерены спектры валентной зоны и зоны проводимости в диапазоне, близком к уровню Ферми. Данные спектры для различных величин оцененных концентраций атомов Sb (в тех же точках образца) представлены на рис. 2а–h. На рисунке 2а отмечены объемная валентная зона (BVB), объемная зона проводимости (BCB) и фундаментальная запрещенная зона между ними, в которой находится часть конуса Дирака (оставшаяся часть смещена с BVB и BCB) и ЭЗЗ, открываемая в точке Дирака. Валентная зона также отмечена на всех картинках голубой кривой. По мере увеличения концентрации атомов Sb точка Дирака сдвигается к уровню Ферми, и для Sb $x \sim 0.3$ располагается на уровне Ферми. Синими пунктирными линиями обозначены положения точки Дирака. Для концентраций, превышающих $x = 0.3$, в спектрах видна только валентная зона, поэтому явно определить положение точки Дирака возможно только для образцов $x = 0, 0.16, 0.24$ и 0.3 .

Для определения положения точки Дирака в случае $x > 0.3$ было сделано предположение об идентичности деталей электронной структуры для раз-

личных x , и на рис. 2е–h выше уровня Ферми добавлены спектры образца с $x = 0.16$ со сдвигом, сделанным таким образом, чтобы состояния наложенного спектра (представлены полупрозрачными, черно-белыми) продолжали исследуемые состояния. Точка для $x = 0.24$ снята на другой установке и при другой энергии возбуждающих фотоэмиссию фотонов, но тем не менее не выбивается из зависимости.

Зависимость, сопоставляющая концентрации атомов Sb, вычисленные из анализа интенсивностей основных уровней, и оцененные положения точки Дирака на различных образцах $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$, представлена на рис. 3а (левая шкала). Мы аппроксимировали данную зависимость функцией вида $\sqrt{x}$ (черная пунктирная линия). Как видно из рис. 3а, экспериментальные точки хорошо ложатся на данную зависимость. Для состояний конуса Дирака справедливо следующее соотношение волнового вектора на уровне Ферми с плотностью состояний на уровне Ферми [21]:

$$\frac{Dk_f^2}{4\pi} = |n_{ss}|. \quad (1)$$

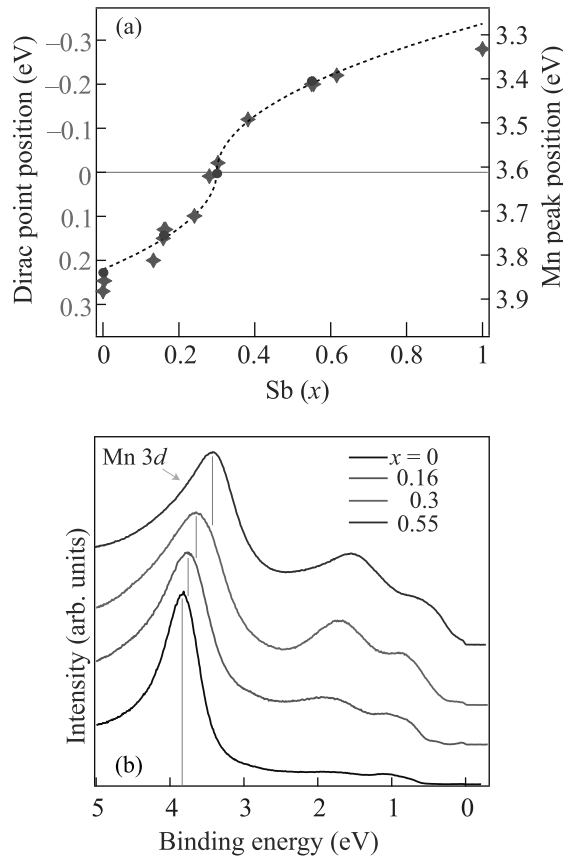


Рис. 3. (Цветной онлайн) (a) – Оценка изменений положения точки Дирака для $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ при изменении концентрации атомов Sb (шкала слева, показано красными точками). Синими точками представлено изменение энергетического положения пика Mn 3d (шкала справа). (b) – Экспериментально измеренное энергетическое положение Mn 3d профиль плотности электронных состояний валентной зоны в точке Г (в диапазоне $k_{\parallel} = \pm 0.5 \text{ \AA}^{-1}$) в резонансных фотоэлектронных спектрах ($h\nu = 50 \text{ эВ}$) при изменении концентрации атомов Sb

Здесь D – вырождение фермиона Дирака (константа) и $|n_{ss}|$ – плотность носителей заряда на поверхности. В случае линейной дисперсии дираковских электронов волновой вектор на уровне Ферми прямо пропорционален положению точки Дирака. Хорошее совпадение аппроксимирующей функции свидетельствует о том, что вблизи концентрации атомов Sb $x = 0.3$ на уровне Ферми находятся топологические состояния без вкладов, обусловленных состояниями валентной зоны и зоны проводимости. Подобное поведение точки Дирака от концентрации атомов Sb наблюдалось для образцов Bi_2Te_3 [30], MnBi_2Te_4 [23], $\text{MnBi}_6\text{Te}_{10}$ [31].

Стоит отметить, что на концах зависимости положение точек отклоняется от корневой аппроксима-

ции, что может быть связано с вкладом в плотность состояний на уровне Ферми состояний зоны проводимости или валентной зоны. Кроме того, для чистого MnSb_2Te_4 оценка положения точки Дирака используемым методом затруднена из-за большого энергетического расстояния между точкой Дирака и уровнем Ферми.

В нашем исследовании переход точки Дирака через уровень Ферми наблюдается при концентрации Sb $x \sim 0.3$. Это согласуется с рядом других исследований, выполненных различными методами [22, 23]. Однако существуют и другие работы [23, 25–27], в которых переход через уровень Ферми наблюдается при других концентрациях атомов Sb. Подобное различие может быть вызвано особенностями в используемых методах выращивания образцов и соответствующих концентрациях дефектов. Частично это подтверждается в работе [23], где обнаружено, что уровень Ферми ближе к точке Дирака для тонких пленок, чем в случае объемных образцов.

Для исследования сдвига валентной зоны, не относящегося напрямую к сдвигу конуса Дирака, в данной работе проведены исследования энергетического сдвига пика Mn 3d, локализованного в области валентной зоны. На рисунке 3b показан экспериментально измеренный энергетический сдвиг пика Mn 3d при изменении концентрации атомов Sb. Спектры для различных концентраций атомов Sb обозначены разными цветами. Спектры нормировались на высоту пика Mn 3d.

Для выделения пика Mn 3d в валентной зоне использовалась резонансная ФЭС с энергией 50 эВ, соответствующая переходу Mn 2p–3d [32].

Положения пика Mn 3d по энергии связи нанесены на рис. 3a синими точками (правая шкала). Величина деления левой шкалы совпадает с величиной деления правой шкалы. Таким образом, явно видно, что сдвиг пика Mn 3d происходит ровно на то же энергетическое расстояние, что и сдвиг точки Дирака. Это подтверждает справедливость оценки точки Дирака при условии, что валентная зона сдвигается жестким образом.

С повышением концентрации атомов Sb наблюдается понижение интенсивности резонансного пика Mn 3d относительно валентной зоны. С одной стороны, это можно связать с ослаблением интенсивности магнитного резонанса (и магнитных свойств в целом) для соединений $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ с увеличением x . Но с другой стороны, исходя из представленных данных можно предположить, что так как сдвиг валентной зоны больше, чем сдвиг остовных уровней (примерно в два раза), меняется энергетиче-

ческое расстояние между уровнями, участвующими в резонансе, и энергия резонанса несколько сдвигается. При этом измерение при энергии фотонов 50 эВ уже приходится на спад резонансного пика, причем тем дальше, чем больше концентрация Sb.

Закключение. В работе представлены и проанализированы изменения структуры валентной зоны, топологических состояний и остоновых уровней для серии магнитных топологических изоляторов со стехиометрией $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ при изменении заложенной при росте концентрации атомов Sb в широком диапазоне $x = 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ и 1. Обнаружено, что оцененные из данных РФЭС величины концентраций стабильно превышают заложенные при росте. Показан постепенный сдвиг точки Дирака в сторону уровня Ферми при увеличении концентрации атомов Sb. При $x \sim 0.3$ точка Дирака локализована на уровне Ферми. При дальнейшем увеличении концентрации атомов Sb точка Дирака сдвигается выше уровня Ферми. При увеличении концентрации атомов Sb происходит “жесткий” сдвиг валентной зоны без видимых изменений структуры состояний и величины фундаментальной запрещенной зоны между состояниями валентной зоны и зоны проводимости. Зависимость сдвига точки Дирака (и всей структуры валентных состояний) от уровня концентрации атомов Sb представляет собой кривую, которую можно аппроксимировать корневой зависимостью, что коррелирует с соответствующим линейным возрастанием плотности носителей заряда. Такое поведение характерно для чистых состояний конуса Дирака на уровне Ферми.

Методы. Измерения структуры валентной зоны и остоновых уровней проводились методами ФЭСУР и РФЭС в центре синхротронного излучения SOLARIS (Польша) на установке UARPES при энергии излучения $h\nu = 28$ эВ и $h\nu = 120$ эВ соответственно. Измерения проводились в одной и той же точке. Для анализа структуры уровня Mn 3d использовалась энергия излучения $h\nu = 50$ эВ, соответствующая резонансному усилению интенсивности уровня Mn 3d. Спектры измерялись при температуре $T = 10\text{--}12$ К. Совершенство кристаллической структуры определялось методом дифракции медленных электронов (ДМЭ).

Также дополнительные измерения проводились в ИФП СО РАН (Новосибирск) на установке SPECS ProvenX-ARPES при $h\nu = 21.22$ эВ для ФЭСУР и $h\nu = 1486.7$ эВ для РФЭС.

Предварительные измерения проводились в РЦ ФМИП СПбГУ на установке ESCALAB 250Xi.

Монокристаллы $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ были синтезированы вертикальным методом Бриджмена в Новосибирском государственном университете.

Чистые поверхности образцов получали сколом в сверхвысоком вакууме. Базовое давление в процессе эксперимента было на уровне $3 - 5 \times 10^{-11}$ мбар.

Работа выполнена в рамках финансовой поддержки Министерством науки и высшего образования РФ (грант #075-15-2020-797 (13.1902.21.0024)).

Авторы выражают благодарность проекту Министерства образования и науки Польши: “Поддержка исследований и разработок с использованием исследовательской инфраструктуры Национального центра синхротронного излучения SOLARIS” по контракту #1/SOL/2021/2, а также центру SOLARIS за доступ к установке UARPES, где проводились измерения. Д. Естюнин выражает признательность G-RISC program за поддержку.

1. R. Yu, W. Zhang, H.-J. Zhang, S.-C. Zhang, X. Dai, and Z. Fang, *Science* **329**, 5987 (2010).
2. K. Nomura and N. Nagaosa, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 166802 (2011).
3. K. He, Y. Wang, and Q. Xue, *Natl. Sci. Rev.* **1**, 38 (2013).
4. C. Liu, S. Zhang, and X. Qi, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **7**, 301 (2016).
5. J. Wang, B. Lian, and S. Zhang, *Phys. Scr. T* **164**, 014003 (2015).
6. X.-L. Qi, R. Li, J. Zang, and S.-C. Zhang, *Science* **323**, 1184 (2009).
7. R. Li, J. Wang, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Nature Phys.* **6**, 284 (2010).
8. X. Wan, A. Turner, A. Vishwanath, and S. Savrasov, *Phys. Rev. B* **83**, 205101 (2011).
9. W. Luo and X.-L. Qi, *Phys. Rev. B* **87**, 085431 (2013).
10. S. Eremeev, V. Men'shov, V. Tugushev, P. Echenique, and E. Chulkov, *Phys. Rev. B* **88**, 144430 (2013).
11. C.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng et al. (Collaboration), *Science* **340**, 167 (2013).
12. M. Mogi, R. Yoshimi, A. Tsukazaki, K. Yasuda, Y. Kozuka, K. Takahashi, M. Kawasaki, and Y. Tokura, *Appl. Phys. Lett.* **107**, 182401 (2015).
13. A. Shikin, D. Estyunin, Yu. Surnin, A. Koroleva, E. Shevchenko, K. Kokh, O. Tereshchenko, S. Kumar, E. Schvier, K. Shimada, T. Yoshikawa, Y. Saitoh, Y. Takeda, and A. Kimura, *Sci. Rep.* **18**, 4813 (2019).
14. S. Filnov, Yu. Surnin, A. Koroleva, I. Klimovskikh, D. Estyunin, A. Varykhalov, K. Bokai, K. Kokh, O. Tereshchenko, V. Golyashov, E. Shevchenko, and A. Shikin, *JETP* **156**, 483 (2019).

15. A. Shikin, D. Estyunin, A. Koroleva, D. Glazkova, T. Makarova, and S. Filnov, *Phys. Solid State* **62**, 338 (2020).
16. M. Otrokov, I. Klimovskikh, H. Bentmann et al. (Collaboration), *Nature* **576**, 416 (2019).
17. Y. Deng, Y. Yu, M. Shi, Z. Guo, Z. Xu, J. Wang, X. Chen, and Y. Zhang, *Science* **367**(6480), 895 (2020).
18. D. Estyunin, I. Klimovskikh, A. Shikin, E. Schwier, M. Otrokov, A. Kimura, S. Kumar, S. Filnov, Z. Aliev, M. Babanly, and E. Chulkov, *APL Mater.* **8**, 021105 (2020).
19. A. Shikin, D. Estyunin, I. Klimovskikh et al. (Collaboration), *Sci. Rep.* **10**, 13226 (2020).
20. A. Shikin, D. Estyunin, N. Zaitsev et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **104**, 115168 (2021).
21. J. Zhang, C.-Z. Chang, Z. Zhang, J. Wen, X. Feng, K. Li, M. Liu, K. He, L. Wang, X. Chen, Q.-K. Xue, X. Ma, and Y. Wang, *Nat. Commun.* **2**, 574 (2011).
22. S. Riberolles, Q. Zhang, E. Gordon, N. Butch, L. Ke, J.-Q. Yan, and R. McQueeney, *Phys. Rev. B* **104**, 064401 (2021).
23. B. Chen, F. Fei, D. Zhang et al. (Collaboration), *Nat. Commun.* **10**, 4469 (2019).
24. X. Ma, Y. Zhao, K. Zhang et al. (Collaboration), *Phys. Rev. B* **103**, L121112 (2021).
25. J.-Q. Yan, S. Okamoto, M. McGuire, A. May, R. McQueeney, and B. Sales, *Phys. Rev. B* **100**, 104409 (2019).
26. S. Wimmer, J. Sanchez-Barriga, P. Kupperts et al. (Collaboration), *Adv. Mater.* **33**, 2102935 (2021).
27. W. Ko, M. Kolmer, J. Yan, A. Pham, M. Fu, F. Lupke, S. Okamoto, Z. Gai, P. Ganesh, and A.-P. Li, *Phys. Rev. B* **102**, 115402 (2020).
28. I. Band, Yu. Kharitonov, and M. Trzhaskovskaya At. Data Nucl. Data Tables **23**, 443 (1979).
29. C. Hu, S.-W. Lien, E. Feng, S. Mackey, H.-J. Tien, I. Mazin, H. Cao, T.-R. Chang, and N. Ni, *Phys. Rev. B* **104**, 054422 (2021).
30. H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, *Nat. Phys.* **5**, 438 (2009).
31. H. Xie, F. Fei, F. Fang, B. Chen, J. Guo, Y. Du, W. Qi, Y. Pei, T. Wang, M. Saher, S. Zhang, M. Zhang, X. Wang, and F. Song, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **55**, 104002 (2021).
32. A. Shikin, A. Rybkina, D. Estyunin et al. (Collaboration), *Sci. Rep.* **11**, 23332 (2021).

Карта двумерных соединений халькогенидов вольфрама (W-S, W-Se, W-Te) на основе эволюционного поиска USPEX

Е. В. Суханова⁺, А. Г. Квашнин^{*,+}, М. А. Агамалян[×], А. А. Захарян[×], З. И. Попов⁺¹⁾

⁺Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля РАН, 119334 Москва, Россия

^{*}Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Россия

[×]Ереванский государственный университет, 0025 Ереван, Республика Армения

Поступила в редакцию 10 февраля 2022 г.

После переработки 10 февраля 2022 г.

Принята к публикации 11 февраля 2022 г.

В работе было проведено предсказание новых двумерных наноструктур состава W-X (X = S, Se, Te) при помощи эволюционного алгоритма, реализованного в программном пакете USPEX. По результатам проведенного поиска были предложены две новые термодинамически и динамически стабильные 2D структуры: W₃S₅ и W₅Te₂. Методами DFT было проведено исследование электронных и оптических свойств данных монослоев. Было показано, что предсказанные структуры W₃S₅ и W₅Te₂ проявляют полупроводниковые свойства с шириной запрещенной зоны 0.62 и 0.40 эВ соответственно, а рассчитанный спектр экстинкции указывает на широкую полосу поглощения в видимом диапазоне спектра, что делает эти материалы перспективными кандидатами для применения в фотовольтаике и солнечной энергетике.

DOI: 10.31857/S1234567822050093

1. Введение. Поиск новых перспективных наноматериалов для применения в областях оптоэлектроники, спинтроники и наноэлектроники привел к детальному исследованию свойств монослоев дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ) [1–3] и различных гетероструктур на их основе [4–6]. В частности, объектами пристального исследования являются дихалькогениды вольфрама, которые демонстрируют ряд интересных физико-химических свойств. Они характеризуются сильным спин-орбитальным взаимодействием [7], благодаря чему перспективны для применения в спинтронике и валитронике [8], а также обладают уникальными оптическими свойствами, например, сильно связанными экситонами [9, 10] и наибольшим значением квантового выхода фотолюминесценции среди всех 2D полупроводников [11].

Как и многие другие ДПМ монослои дихалькогенидов вольфрама могут существовать в нескольких аллотропных модификациях: это гексагональная H-фаза, в которой атомы вольфрама находятся в тригональнопризматическом координационном окружении атомов серы, а также тетрагональные T и T' (или Td) фазы, в которых атомы вольфрама находятся в октаэдрическом окружении [12]. Монослои дисульфида и диселенида вольфрама в основном состоянии существуют в гексагональной H фазе,

в отличие от дителлурида вольфрама, для которого основным состоянием является фаза T'. H-WS₂ и H-WSe₂ являются прямозонными полупроводниками с шириной запрещенной зоны ~2 эВ [7, 13]. Несмотря на то, что T фазы дисульфида и диселенида вольфрама не являются энергетически выгодными, они могут быть экспериментально получены, например, в качестве границ раздела [14, 15], выращены методом CVD [16] или при пост-обработке образцов [17, 18]. Напротив, монослой T'-WTe₂ является полуметаллом и топологическим изолятором [19], проявляет спиновый квантовый эффект Холла [20], а также обладает сверхпроводимостью и анизотропным магнетосопротивлением [21]. Ранее теоретически была предложена еще одна гексагональная фаза – H' фаза, которая может встречаться в качестве границы раздела в двумерных кристаллах [22]. Помимо гексагональных фаз, теоретически было предсказано существование и других двумерных соединений состава WX₂ (X = S, Se, Te), например обладающих квадратной решеткой [23, 24] (S-WX₂). Проведенные теоретические исследования доказывают динамическую стабильность предсказанных структур, а также показывают, что такие монослои также являются топологическими изоляторами [23, 24]. Более того, в работе [25] было проведено теоретическое предсказание новых 2D фаз ДПМ стехиометрии

¹⁾e-mail: zipcool@bk.ru

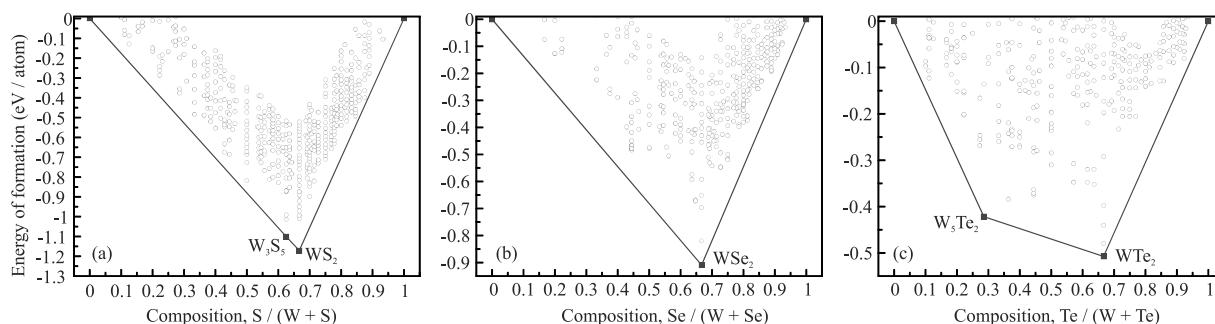


Рис. 1. (Цветной онлайн) Рассчитанные фазовые диаграммы в координатах состав – энергия образования для систем: (a) – W-S; (b) – W-Se; (c) – W-Te

MS_2 ($M = \text{Mo}, \text{W}, \text{Re}$), в которой было предложено несколько новых динамически стабильных структур.

Изменение стехиометрии двумерных наноматериалов может привести к появлению структур, обладающих новыми свойствами [26]. Так, например, при определенных условиях нарушение стехиометрии может произойти во время синтеза образцов [27, 28]. Кроме того, такое изменение может произойти как спонтанно под действием окружающей среды [29], так и контролируемо, например, под действием облучения высокоэнергетическими ионами [30, 31] или электронами [32, 33]. Ранее была экспериментально продемонстрирована возможность получения монослоев нестехиометрического состава – W_2S_3 [32]. Теоретическое исследование стабильности и свойств монослоев M_2X_3 ($M = \text{Mo}, \text{W}$; $X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$), показало, что сульфиды и селениды проявляют полупроводниковые свойства, а теллуриды – металлические, кроме того, из всех исследованных структур только W_2Te_3 не является динамически стабильной. Следует отметить, что ранее не проводилось комплексных теоретических исследований по поиску стабильных двумерных материалов в системах W-X ($X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) с использованием методов глобальной оптимизации.

В данной работе было проведено теоретическое предсказание атомной структуры новых двумерных монослоев в системах W-S, W-Se и W-Te при помощи эволюционного алгоритма, а также с использованием методов теории функционала электронной плотности было проведено изучение электронных и оптических свойств предсказанных наноструктур.

2. Методы исследования. Поиск термодинамически стабильных двумерных структур проводился с использованием комбинации эволюционного алгоритма предсказания кристаллических структур USPEX [34–36] с теорией функционала электронной плотности, которая использовалась для расчета полной энергии структур-кандидатов в процессе поиска.

Первое поколение структур для эволюционного поиска состояло из 120 структур и было сгенерировано операторами произвольной симметрии [37] и топологии [38]. Последующие поколения (120 структур) состояли из 20 % произвольных структур, 40 % генерировалось оператором наследственности, 20 % – оператором мутации мягких мод и 20 % – оператором трансмутации. В процессе поиска генерировались структуры с количеством атомов в элементарной ячейке от 8 до 16. В ходе проведенного поиска были рассмотрены структуры, толщина которых составляла не более 6 Å, что соответствует значению удвоенной длины связи W-Te.

Релаксация структур проводилась методом теории функционала электронной плотности (DFT) [39, 40] с применением обобщенного градиентного приближения (Generalized Gradient Approximation, GGA) в параметризации Пердю–Бурке–Эрнзерхофа (Perdew–Burke–Ernzerhof, PBE) для обменно-корреляционного функционала [41]. Расчеты проводились в программном пакете VASP [42–44]. Для атомов вольфрама, теллура, серы и селена в расчете рассматривались электронные конфигурации $6s^2 5d^4$, $5s^2 5p^4$, $3s^2 3p^4$ и $4s^2 4p^4$, соответственно. Энергия обрезания плоских волн выбиралась равной 500 эВ. Разбиение первой зоны Бриллюэна на сетку из k -точек проводилось с использованием метода Монкхорста–Пака [45] с разрешением $2\pi \times 0.04 \text{ \AA}^{-1}$. Величина вакуумного промежутка, т.е. расстояние между периодически расположенными слоями исследуемых структур, составляла не менее 15 Å, что исключает влияние слоев друг на друга в неперiodическом направлении. Колебательные характеристики рассчитывались с помощью метода конечных смещений (VASP и PHONOPY [46, 47]). Для точного описания фононов в двумерных системах были учтены трансляционные и вращательные инварианты [48, 49], для этого была использована программа Nhiphive [50].

Оптические свойства были рассчитаны с использованием суперпозиции осцилляторов Лоренца. Вещественная часть комплексной диэлектрической функции была найдена с помощью соотношения Крамерса–Кронига, а мнимая часть была найдена с помощью суммирования по незаполненным состояниям [51].

3. Результаты. Результаты эволюционного поиска стабильных двумерных соединений в системах W-S, W-Se и W-Te приведены на рис. 1. Отметим, что поскольку монослои состава WX_2 хорошо изучены в литературе, в данной работе рассмотрение их стабильности и свойств не проводилось.

В системе W-S были предсказаны две термодинамически стабильные структуры, имеющие состав W_3S_5 и WS_2 . Структура WS_2 соответствует известной структуре H- WS_2 и является хорошо изученной в литературе как с экспериментальной [7], так и с теоретической точки зрения [13, 52]. Энергия известных фаз T- и T'- WS_2 несколько выше, чем энергия H фазы ($\Delta E_{H-T} = 0.30$ эВ/атом, $\Delta E_{H-T'} = 0.18$ эВ/атом), они являются метастабильными и находятся выше линии выпуклой оболочки. В системе W-Se термодинамически стабильной, помимо чистых веществ, является только известная структура монослоя WSe_2 в H фазе [52]. T и T' фазы WSe_2 лежат несколько выше линии выпуклой оболочки ($\Delta E_{H-T} = 0.26$ эВ/атом, $\Delta E_{H-T'} = 0.09$ эВ/атом). Проведенный эволюционный поиск новых 2D структур в системе W-Te показал наличие двух термодинамически стабильных фаз: W_5Te_2 и WTe_2 (рис. 1с). Полученная структура монослоя WTe_2 соответствует известной в литературе T' фазе [19–21]. Фазы H- и T- WTe_2 лежат выше линии выпуклой оболочки ($\Delta E_{H-T'} = 0.03$ эВ/атом, $\Delta E_{T-T'} = 0.22$ эВ/атом), что согласуется с литературными данными [53].

В ходе проведенного поиска были предсказаны две новые структуры: W_3S_5 и W_5Te_2 . Монослой W_3S_5 является новым соединением, его структура может быть представлена в виде дефектного монослоя T'- WS_2 , в котором отсутствует 1/3 атомов серы на одной из поверхностей (рис. 2а). Структуру W_5Te_2 можно рассматривать как слой атомов вольфрама в характерной для чистого металла ОЦК упаковке, терминированный с двух сторон атомами теллура. Для оценки динамической стабильности предсказанных структур были рассчитаны фононные спектры (рис. 2), в которых отсутствуют мнимые частоты колебаний. Анализ электронных зонных структур показал, что обе структуры являются непрямозонными полупроводниками с шириной запрещенной зоны, равной 0.62 и 0.40 эВ у моносло-

ев W_3S_5 и W_5Te_2 , соответственно (рис. 2). Для оценки перспектив применения предсказанных структур в качестве элементов оптоэлектронных устройств были изучены оптические свойства W_3S_5 и W_5Te_2 на примере рассмотрения коэффициента экстинкции (рис. 2). С помощью зависящей от длины волны света комплексной диэлектрической функции $\varepsilon(\lambda) = \varepsilon_1(\lambda) + i\varepsilon_2(\lambda)$ был найден коэффициент экстинкции, позволяющий оценить способность структур поглощать излучение:

$$K(\lambda) = \left[\frac{\sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} - \varepsilon_1}{2} \right]^{1/2}.$$

Были рассмотрены продольные и поперечные компоненты диэлектрической проницаемости: $\varepsilon_i^{\parallel}$ (параллельно плоскости монослоя) и $\varepsilon_i^{\perp}$ (перпендикулярно плоскости монослоя). В случае облучения монослоя W_3S_5 излучением, поляризованным нормально к поверхности, в ультрафиолетовой области спектра наблюдается два максимума поглощения (~ 130 нм и 200 нм). При облучении излучением, поляризованным в продольном направлении к поверхности монослоя, основной пик поглощения наблюдается в видимой области спектра (~ 670 нм), также интенсивный пик наблюдается в ближней ИК области спектра (~ 840 нм). Тем самым можно сделать вывод о возможности применения данной структуры в качестве детектора ультрафиолетового и инфракрасного излучения. В случае облучения монослоя W_5Te_2 излучением, поляризованным нормально к поверхности структуры, в ультрафиолетовой области спектра также наблюдается максимумы поглощения в области длин волн ~ 190 нм и 260 нм, что свидетельствует о перспективности использования W_5Te_2 в качестве датчика ультрафиолетового излучения. При облучении излучением, поляризованным в продольном направлении к поверхности структуры, основной пик поглощения наблюдается на границе ультрафиолетового излучения и видимой области спектра (~ 290 нм), также несколько интенсивных пиков наблюдается в видимой области спектра. Высокие значения коэффициентов экстинкции в видимом диапазоне позволяют рассматривать эти материалы в качестве элементов солнечной энергетики, при этом перспектива синтеза данных структур путем удаления легких элементов из известных дихалькогенидов вольфрама электронным пучком была продемонстрирована на примере монослоев селенида молибдена [33] и обсуждена в нашей предыдущей работе [26].

4. Заключение. В работе представлен результат поиска новых двумерных структур в системах

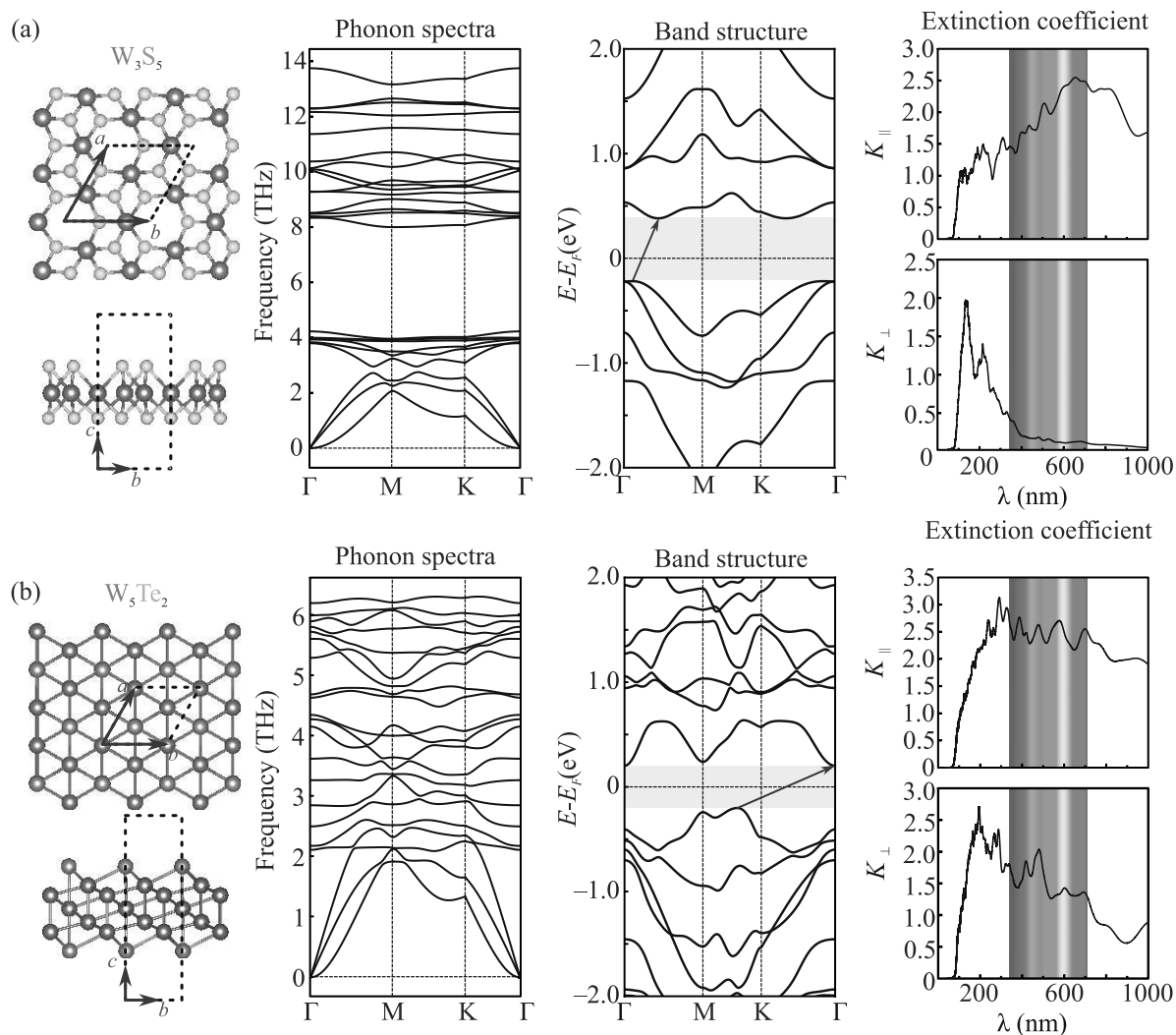


Рис. 2. (Цветной онлайн) Атомная структура, электронная зонная структура, спектр фоновых колебаний и коэффициент экстинкции монослоя: (a) – W_3S_5 ; (b) – W_5Te_2 . Атомы вольфрама, серы и теллура изображены серым, желтым и коричневым цветами, соответственно

халькогенидов вольфрама W-X ($X = S, Se, Te$). Были предложены две новые термодинамически стабильные структуры: W_3S_5 и W_5Te_2 . Анализ фоновых спектров подтвердил динамическую стабильность рассмотренных структур. Данные 2D слои являются непрямозонными полупроводниками с шириной запрещенной зоны 0.62 и 0.40 эВ, соответственно. Расчет коэффициентов экстинкции показал перспективность применения предложенных структур в качестве материалов устройств фотовольтаики, способных поглощать излучение в широком оптическом диапазоне, в частности W_5Te_2 и W_3S_5 могут найти возможное применение в качестве датчиков ультрафиолетового излучения, а W_3S_5 также как материал для датчиков инфракрасного излучения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ) и Комитета по науке министерства образования, науки, культуры и спорта Республики Армения (КН РА) в рамках научного проекта # 20-53-05009 (20RF-185).

Авторы благодарят межведомственный суперкомпьютерный центр РАН и Информационно-вычислительный центр Новосибирского государственного университета за предоставление вычислительных ресурсов.

1. Д. Г. Квашнин, Л. А. Чернозатонский, ЖЭТФ **105**(4), 230 (2017).
2. М. М. Глазов, Е. Л. Ивченко, Письма в ЖЭТФ **113**(1), 10 (2021).

3. М. М. Махмудиан, А. В. Чаплик, Письма в ЖЭТФ **114**(9), 620 (2021).
4. М. А. Акмаев, М. В. Кочиев, А. И. Дулебо, М. В. Пугачев, А. Ю. Кунцевич, В. В. Белых, Письма в ЖЭТФ **112**(10), 650 (2020).
5. Е. В. Суханова, З. И. Попов, Д. Г. Квашнин, Письма в ЖЭТФ **111**(11), 743 (2020).
6. П. Л. Пех, П. В. Ратников, А. П. Силян, Письма в ЖЭТФ **111**(2), 80 (2020).
7. H. Zeng, G. B. Liu, J. Dai, Y. Yan, B. Zhu, R. He, L. Xie, S. Xu, X. Chen, W. Yao, and X. Cui, *Sci. Rep.* **3**(1), 1 (2013).
8. W. H. Lin, P. C. Wu, H. Akbari, G. R. Rossman, N. C. Yeh, and H. A. Atwater, *Adv. Mater.* **34**(3), 2104863 (2022).
9. К. А. Брехов, К. А. Гришунин, Н. А. Ильин, А. П. Шестакова, С. Д. Лавров, Е. Д. Мишина, Письма в Журнал технической физики **43**(24), 46 (2017).
10. Y. You, X. X. Zhang, T. C. Berkelbach, M. S. Hybertsen, D. R. Reichman, and T. F. Heinz, *Nature Phys.* **11**(6), 477 (2015).
11. L. Yuan and L. Huang, *Nanoscale* **7**(16), 7402 (2015).
12. D. Pasquier and O. V. Yazyev, *2D Mater.* **6**(2), 025015 (2019).
13. H. Terrones, F. López-Urías, and M. Terrones, *Sci. Rep.* **3**(1), 1549 (2013).
14. W. Chen, X. Xie, J. Zong, T. Chen, D. Lin, F. Yu, S. Jin, L. Zhou, J. Zou, J. Sun, X. Xi, and Y. Zhang, *Sci. Rep.* **9**(1), 2685 (2019).
15. M. M. Ugeda, A. Pulkin, S. Tang, H. Ryu, Q. Wu, Y. Zhang, D. Wong, Z. Pedramrazi, A. Martin-Recio, Y. Chen, F. Wang, Z.-X. Shen, S.-K. Mo, O. V. Yazyev, and M. F. Crommie, *Nat. Commun.* **9**(1), 3401 (2019).
16. W. Chen, M. Hu, J. Zong, X. Xie, Q. Meng, F. Yu, L. Wang, W. Ren, A. Chen, G. Liu, X. Xi, F.-S. Li, J. Sun, J. Liu, and Y. Zhang, *Adv. Mater.* **33**(7), 2004930 (2021).
17. W. Ding, L. Hu, J. Dai, X. Tang, R. Wei, Z. Sheng, C. Liang, D. Shao, W. Song, Q. Liu, M. Chen, X. Zhu, S. Chou, X. Zhu, Q. Chen, Y. Sun, and S. X. Dou, *ACS Nano* **13**(2), 1694 (2019).
18. Y. Ma, B. Liu, A. Zhang, L. Chen, M. Fathi, C. Shen, A. N. Abbas, M. Ge, M. Mecklenburg, and C. Zhou, *ACS Nano* **9**(7), 7383 (2015).
19. S.-Y. Xu, Q. Ma, H. Shen, V. Fatemi, S. Wu, T. R. Chang, G. Chang, A. M. M. Valdivia, C.-K. Chan, Q. D. Gibson, J. Zhou, Z. Liu, K. Watanabe, T. Taniguchi, H. Lin, R. J. Cava, L. Fu, N. Gedik, and P. Jarillo-Herrero, *Nature Phys.* **14**(9), 900 (2018).
20. S. Wu, V. Fatemi, Q. D. Gibson, K. Watanabe, T. Taniguchi, R. J. Cava, and P. Jarillo-Herrero, *Science* **359**(6371), 76 (2018).
21. M. N. Ali, J. Xiong, S. Flynn, J. Tao, Q. D. Gibson, L. M. Schoop, and T. Liang, *Nature* **514**(7521), 205 (2014).
22. Y. Ma, L. Kou, X. Li, Y. Dai, and T. Heine, *Phys. Rev. B* **93**(3), 035442 (2016).
23. W. Li, M. Guo, G. Zhang, and Y. W. Zhang, *Phys. Rev. B* **89**(20), 205402 (2014).
24. Y. Sun, C. Felser, and B. Yan, *Phys. Rev. B* **92**(16), 165421 (2015).
25. Z. Chen and L.-W. Wang, *Chem. Mater.* **30**(18), 6242 (2018).
26. T. Joseph, M. Ghorbani-Asl, A. G. Kvashnin, K. V. Larionov, Z. I. Popov, P. B. Sorokin, and A. V. Krasheninnikov, *J. Phys. Chem. Lett.* **10**(21), 6492 (2019).
27. Z. Zhou, T. Xu, C. Zhang, S. Li, J. Xu, L. Sun, and L. Gao, *Nano Res.* **14**(6), 1704 (2021).
28. J. Zhang, Y. Xia, B. Wang, Y. Jin, H. Tian, W. kin Ho, H. Xu, C. Jin, M. Xie, *2D Mater.* **8**(1), 015006 (2020).
29. J. C. Kotsakidis, Q. Zhang, A. L. Vazquez de Parga, M. Currie, K. Helmerson, D. K. Gaskill, and M. S. Fuhrer, *Nano Lett.* **19**(8), 5205 (2019).
30. L. Ma, Y. Tan, M. Ghorbani-Asl, R. Boettger, S. Kretschmer, S. Zhou, Z. Huang, A. V. Krasheninnikov, and F. Chen, *Nanoscale* **9**(31), 11027 (2017).
31. B. Huang, F. Tian, Y. Shen, M. Zheng, Y. Zhao, J. Wu, Y. Liu, S. J. Pennycook, and J. T. Thong, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **11**(27), 24404 (2019).
32. X. Wang, X. Guan, X. Ren, T. Liu, W. Huang, J. Cao, and C. Jin, *Nanoscale* **12**(15), 8285 (2020).
33. X. Zhao, J. Dan, J. Chen, Z. Ding, W. Zhou, K. P. Loh, and S. J. Pennycook, *Adv. Mater.* **30**(23), 1707281 (2018).
34. A. R. Oganov and C. W. Glass, *J. Chem. Phys.* **124**, 244704 (2006).
35. A. R. Oganov, Y. Ma, A. O. Lyakhov, M. Valle, and C. Gatti, *Rev. Mineral Geochem.* **71**(1), 271 (2010).
36. A. R. Oganov, A. O. Lyakhov, and M. Valle, *Acc. Chem. Res.* **44**, 227 (2011).
37. A. O. Lyakhov, A. R. Oganov, H. T. Stokes, and Q. Zhu, *Comput. Phys. Commun.* **184**, 1172 (2013).
38. P. V. Bushlanov, V. A. Blatov, and A. R. Oganov, *Comput. Phys. Commun.* **236**, 1 (2019).
39. P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**(3B), B864 (1964).
40. W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140**(4), A1133 (1965).
41. J. P. Perdew and K. Burke, *Phys. Rev. Lett.* **77**(18), 3865 (1996).
42. G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B* **47**(1), 558 (1993).

43. G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **49**(20), 14251 (1994).
44. G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**(16), 11169 (1996).
45. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, Phys. Rev. B **13**(12), 5188 (1976).
46. A. Togo and I. Tanaka, Scr. Mater. **108**, 1 (2015).
47. A. Togo, F. Oba, and I. Tanaka, Phys. Rev. B **78**, 134106 (2008).
48. A. S. Nissimagoudar, A. Manjanath, and A. Singh, Phys. Chem. Chem. Phys. **18**(21), 14257 (2016).
49. Y. D. Kuang, L. Lindsay, S. Q. Shi, and G. P. Zheng, Nanoscale **8**(6), 3760 (2016).
50. F. Eriksson, E. Fransson, and P. Erhart, Advanced Theory and Simulations **2**(5), 1800184 (2019).
51. M. Gajdos, K. Hummer, G. Kresse, J. Furthmüller, and F. Bechstedt, Phys. Rev. B **73**(4), 045112 (2006).
52. C. Ataca, H. Sahin, and S. Ciraci, J. Phys. Chem. C **116**(16), 8983 (2012).
53. H. H. Huang, X. Fan, D. J. Singh, H. Chen, Q. Jiang, and W. T. Zheng, Phys. Chem. Chem. Phys. **18**(5), 4086 (2016).

Эффект бабочки в системе квантовых точек в модели Сачдева–Йе–Китаева

А. В. Лункин¹⁾

Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 119334 Москва, Россия

Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Россия

Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”, 101000 Москва, Россия

Поступила в редакцию 3 февраля 2022 г.

После переработки 3 февраля 2022 г.

Принята к публикации 3 февраля 2022 г.

В работе предложен способ вычисления аномально упорядоченного во времени коррелятора в обобщении модели Сачдева–Йе–Китаева с ненулевой пространственной размерностью. Наш результат применим не только на малых временах, когда хаотичные свойства системы развиты слабо, но и на больших – порядка времени Эренфеста. Мы показали, что информация о приложенном возмущении, которую описывает данный коррелятор, распространяется баллистически в виде фронта. Нами впервые была вычислена скорость фронта для моделей данного типа.

DOI: 10.31857/S123456782205010X

1. Введение. Чувствительность системы к начальным условиям была отмечена А. Пуанкаре при изучении неустойчивости в задаче трех тел. Позднее эта задача изучалась А. Ляпуновым. Термин “Эффект бабочки” был предложен Э. Лоренцом, который обнаружил подобную неустойчивость при моделировании атмосферных явлений. Эффект выражен в том, что расстояние между изначально очень близкими траекториями системы со временем растет экспоненциально, т.е.

$$\{q(t), p(0)\} = \frac{\partial q(t)}{\partial q(0)} \sim e^{\lambda_L t}. \quad (1)$$

Выше $\{\dots, \dots\}$ – скобка Пуассона для данной системы, p и q – канонически сопряженные импульс и координата соответственно. Показатель λ_L называют экспонентой Ляпунова. Эта формула также может быть обобщена на случай квантовых систем. В таком случае экспонента Ляпунова может быть получена, по аналогии, из коррелятора следующего вида:

$$\langle [q(t), p(0)]^2 \rangle \sim e^{\lambda_L t}. \quad (2)$$

Из формулы (2) следует, что для вычисления экспоненты Ляпунова нам необходимо вычислять корреляторы, аномально упорядоченные во времени. В английской литературе их называют *out-of-time ordered*

correlator (ОТОС). Связь подобных корреляторов с хаотичным поведением системы была впервые отмечена в работе [1]. В общем случае мы можем рассматривать не только сопряженные пары операторов, но и корреляторы вида

$$F(t_1, t_2, t_3, t_4) = \langle X_1(t_1)X_2(t_2)X_3(t_3)X_4(t_4) \rangle, \quad (3)$$

где X_i – произвольные операторы. Мы будем полагать, что $t_1 \approx t_3 > t_2 \approx t_4$. Изучение таких корреляторов позволяет характеризовать хаотичные свойства системы, а также понять распространение информации в квантовой системе [2–4].

Для экспериментального изучения ОТОС нам нужно “переместиться” в прошлое, создать возмущение и посмотреть, к чему оно приведет по сравнению с тем, что мы видели до этого. Подобный опыт, для классической системы, был описан в рассказе Р. Брэдли “И грянул гром”, главные герои которого, отправившись в далекое прошлое и убив там бабочку, увидели разительное отличие в их мире по возвращению назад. Современные управляемые квантовые системы, имеющие большое число степеней свободы, позволяют изучать подобные корреляторы. Полностью контролируя систему, мы можем изменить знак гамильтониана, определяющего эволюцию. После такой замены система эффективно начнет двигаться назад во времени. Подобный эксперимент был поставлен группой Google Quantum Ai [5].

¹⁾e-mail: alunkin@itp.ac.ru

Для достаточно большого класса систем указанный коррелятор (3) обладает универсальным поведением. А именно:

$$\frac{F(t_1, t_2, t_3, t_4)}{\langle X_1(t_1)X_3(t_3) \rangle \langle X_2(t_2)X_4(t_4) \rangle} \approx 1 - \frac{1}{C} e^{\lambda_L(t_1-t_2)}, \quad (4)$$

где, как и раньше, параметр λ_L – экспонента Ляпунова данной квантовой системы. При этом $C \gg 1$. Для таких систем можно получить общую оценку на экспоненту Ляпунова (далее $\hbar = 1$):

$$\lambda_L \leq 2\pi T. \quad (5)$$

Это оценка была получена в работе [6]. Одним из примеров, для которой эта оценка насыщается, является модель Сачдева-Йе-Китаева (SYK), [7], гамильтониан которой будет введен далее.

Следующий вопрос, который естественно задать: как ведет себя этот коррелятор в случае $t_1 - t_2 \sim \sim \lambda_L^{-1} \ln C$? Время $t_E = \lambda_L^{-1} \ln C$ называют временем Эренфеста. В случае модели SYK ответ на этот вопрос был получен в работе [8], в которой было показано, что при $t - t_E \gg \lambda_L^{-1}$ коррелятор F стремится к 0. В работе [9] было рассмотрено поведение ОТОС для нульмерных фермионных систем на временах, больших чем время Эренфеста. В работе было показано, что такой коррелятор может быть вычислен универсальным способом, исходя из поведения коррелятора на малых временах (4) и парных корреляционных функций.

В общем случае для нульмерных систем мы можем отметить, что на временах $t \ll t_E$ коррелятор изменяется экспоненциально, но этот рост подавлен фактором C^{-1} , таким образом система слабо демонстрирует хаотичное поведение. На временах $t - t_E \gg \lambda_L^{-1}$ хаотичные свойства проявляются полностью.

Что следует ожидать для системы с ненулевой пространственной размерностью? Предположим, что операторы X_2 и X_4 приложены в точке $\mathbf{r}_2$. Точку $\mathbf{r}_1$ и время приложения операторов X_1 и X_3 мы будем менять, вычисляя при этом ОТОС. В результате при фиксированной разнице времени $t_1 - t_2$ мы можем разделить систему на две области: 1) область неразвитого хаоса с $F = \text{const}$; 2) область развитого хаоса с $F \rightarrow 0$. В частности, точки на достаточно большом удалении относятся к области 1. Область 2 появляется только при $t_1 - t_2 \geq t_E$. Эти области разделяет граница (фронт), которая со временем движется, что приводит к увеличению области 2. Скорость этого движения, вообще говоря, зависит от направления, так как информация о возмущении в системе распространяется баллистически. Подобный сценарий распространения информации для систем с локальным

гамильтонианом был описан в [2], при этом наличие подобного фронта встречалось и в других моделях, например, [10, 11].

В данной работе мы исследуем поведение системы, состоящей из гранул, динамика в каждой из них описывается гамильтонианом модели SYK; при этом существует туннелирование между гранулами. Мы покажем, что сценарий, упомянутый выше, применим для описания поведения ОТОС в нашей системе. Нами также впервые вычислена скорость распространения фронта в обобщении модели SYK. Предложенный способ вычисления может быть также применен и к другим моделям, основанным на модели SYK.

Отметим, что поведение ОТОС в обобщении модели SYK обсуждалось в работе [12]. Однако в указанной работе не исследовано поведение коррелятора на больших временах, соответственно понятие фронта было не определено. Также в работе [12] исследовался лишь случай длинноволновых возбуждений, при этом, в ситуации общего положения, распространение фронта – баллистическое, т.е. результаты работы применимы лишь в ограниченной области параметров. Методы, предложенные авторами этой работы, существенно опираются на форму взаимодействия между фермионами из разных гранул, которое так же, как и гамильтониан, описывающий динамику внутри гранул – четвертого порядка по фермионным операторам.

Структура нашей работы следующая. В разделе 2 будет введена изучаемая модель и получено действие для ее описания. В разделе 3 будут описаны основные свойства модели SYK. В разделе 4 будет вычислен ОТОС, а также описаны основные его свойства.

2. Модель и основные свойства. Гамильтониан нашей модели имеет следующий вид:

$$H = \sum_{\mathbf{r}} \left\{ H_{\mathbf{r}} + i \sum_{\delta \mathbf{r}} \sum_{i,j} w_{\mathbf{r},i;\mathbf{r}+\delta \mathbf{r},j} \chi_{\mathbf{r},i} \chi_{\mathbf{r}+\delta \mathbf{r},j} \right\},$$

$$H_{\mathbf{r}} = \frac{1}{4!} \sum_{i,j,k,l}^N J_{i,j,k,l;\mathbf{r}} \chi_{\mathbf{r},i} \chi_{\mathbf{r},j} \chi_{\mathbf{r},k} \chi_{\mathbf{r},l}. \quad (6)$$

Здесь $\chi_{\mathbf{r}}$ – майорановские фермионы, коммутационные соотношения которых имеют вид: $\{\chi_{\mathbf{r},i}, \chi_{\mathbf{r}',i'}\} = \delta_{i,i'} \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}$. Индекс i принимает значения от 1 до $N \gg 1$. Гамильтониан (6) описывает решетку из квантовых точек, имеющих радиус вектор $\mathbf{r}$, $\delta \mathbf{r}$ – вектор между произвольной точкой и одним из ее соседей. Член $H_{\mathbf{r}}$ описывает динамику внутри точки, второй член в первой строчке описывает туннелирование частиц между соседними точками.

Гамильтониан $H_{\mathbf{r}}$ является гамильтонианом мо-

дели SYK [7]. Качественно мы можем сказать, что этот гамильтониан описывает систему, в которой есть N вырожденных уровней, в таком случае эффекты взаимодействия становятся сильными и приводят к неферми-жидкостному поведению, которое было описано, например, в работах [13, 14].

Тензоры w и J антисимметричны по индексам и являются случайными гауссовыми независимыми величинами с нулевым средним и дисперсией, определяемой выражением:

$$\langle J_{i,j,k,l;\mathbf{r}}^2 \rangle = \frac{3!J^2}{N^3}, \quad \langle w_{\mathbf{r},i;\mathbf{r}+\delta\mathbf{r},j}^2 \rangle = \frac{w^2}{N}. \quad (7)$$

Мы предполагаем, что характерный масштаб взаимодействия внутри гранул много больше, чем характерная амплитуда туннелирования, т.е. $J \gg w$.

Для вычисления ОТОС нам придется воспользоваться двойным контуром Келдыша (рис. 1). Технические детали вычисления описаны в работах [2, 8, 15].

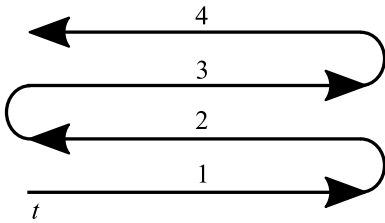


Рис. 1. Контур интегрирования для действия состоит из четырех частей, две из которых идут вперед во времени, а две назад

Нам также понадобится различать поля, определенные на разных частях контура, для этого мы введем индекс $\sigma \in \{1, 2, 3, 4\}$. Например, фермионное поле, определенное на части контура с номером σ , мы обозначим как $\chi_{\mathbf{r},i}^{(\sigma)}$. Тогда коррелятор, который нас интересует будет иметь вид:

$$F(t_1, t_2, t_3, t_4) = \frac{1}{N^2} \sum_{i,i'} \langle T_C \chi_{\mathbf{r}_1,i}^{(1)}(t_1) \chi_{\mathbf{r}_2,i'}^{(2)}(t_2) \chi_{\mathbf{r}_1,i}^{(3)}(t_3) \chi_{\mathbf{r}_2,i'}^{(4)}(t_4) \rangle. \quad (8)$$

Здесь символ T_C обозначает упорядочение операторов вдоль контура. Действие на контуре имеет вид:

$$S = \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma} \int dt \left\{ \sum_{\mathbf{r},i} \frac{1}{2} \chi_{\mathbf{r},i}^{(\sigma)}(t) \partial_t \chi_{\mathbf{r},i}^{(\sigma)}(t) - H^{(\sigma)}(t) \right\}. \quad (9)$$

Здесь $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 1 = -\varepsilon_2 = -\varepsilon_4$ — знак “направления времени” соответствующей части двойного контура. После усреднения по беспорядку действие примет вид:

$$\begin{aligned} S = & \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma} \int dt_1 dt_0 \delta'(t_1 - t_0) \times \\ & \times \left\{ \sum_{\mathbf{r},i} \frac{1}{2} \chi_{\mathbf{r},i}^{(\sigma)}(t_1) \chi_{\mathbf{r},i}^{(\sigma)}(t_0) \right\} + \\ & + \frac{i}{2} \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma_1} \varepsilon_{\sigma_0} \int dt_1 dt_0 \times \\ & \times \left\{ \frac{J^2}{4N^3} \left[\sum_i \chi_{\mathbf{r},i}^{(\sigma_1)}(t_1) \chi_{\mathbf{r},i}^{(\sigma_0)}(t_0) \right]^4 + \right. \\ & + \sum_{\delta\mathbf{r}} \sum_{i,j} \frac{w^2}{2N} \chi_{\mathbf{r},i}^{(\sigma_1)}(t_1) \chi_{\mathbf{r},i}^{(\sigma_0)}(t_0) \times \\ & \times \left. \chi_{\mathbf{r}+\delta\mathbf{r},j}^{(\sigma_1)}(t_1) \chi_{\mathbf{r}+\delta\mathbf{r},j}^{(\sigma_0)}(t_0) \right\}. \end{aligned}$$

Определим поле G следующим образом:

$$G_{\sigma_1\sigma_0}(t_1, t_0|\mathbf{r}) = -i \frac{1}{N} \sum_k \chi_{\mathbf{r},k}^{(\sigma_1)}(t_1) \chi_{\mathbf{r},k}^{(\sigma_0)}(t_0). \quad (10)$$

Нам также потребуется ввести поле Σ , определенное как множитель Лагранжа для поля G , тем самым сделав последнее поле не обремененным никаким соотношением, кроме симметрий, связанных с перестановкой $t_1 \leftrightarrow t_0$.

Поскольку амплитуда туннелирования между гранулами много меньше энергетического масштаба взаимодействия внутри гранул, мы можем рассмотреть член с туннелированием как возмущение. А значит, мы можем ограничиться полями G , которые зависят только от одной координаты, так как в невозмущенной задаче гранулы никак друг с другом не связаны. Также введем следующее обозначение для удобства:

$$\Sigma_{\sigma_1\sigma_0}^{(\text{free})}(t_1, t_0) = -\varepsilon_{\sigma_1} \delta_{\sigma_1, \sigma_0} \delta'(t_1 - t_0). \quad (11)$$

Используя новые поля и обозначение, запишем действие в виде:

$$\begin{aligned} S = & - \sum_{\mathbf{r}, \sigma_1, \sigma_0} \frac{iN}{2} \int dt_1 dt_0 \Sigma_{\sigma_1\sigma_0}^{(\text{free})}(t_1, t_0) G_{\sigma_1\sigma_0}(t_1, t_0|\mathbf{r}) + \\ & + \frac{iN}{2} \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma_1} \varepsilon_{\sigma_0} \int dt_1 dt_0 \left\{ \frac{J^2}{4} G_{\sigma_1\sigma_0}^4(t_1, t_0|\mathbf{r}) - \right. \\ & - \sum_{\delta\mathbf{r}} \frac{w^2}{2} G_{\sigma_1\sigma_0}(t_1, t_0|\mathbf{r}) G_{\sigma_1\sigma_0}(t_1, t_0|\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}) \left. \right\} + \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\sigma_1, \sigma_0} \int dt_1 dt_0 \Sigma_{\sigma_1\sigma_0}(t_1, t_0|\mathbf{r}) \times \\ & \times \left\{ iN G_{\sigma_1\sigma_0}(t_1, t_0|\mathbf{r}) - \sum_k \chi_{\mathbf{r},k}^{(\sigma_1)}(t_1) \chi_{\mathbf{r},k}^{(\sigma_0)}(t_0) \right\}. \quad (12) \end{aligned}$$

Используя эти переменные, мы можем также переписать наш коррелятор (8), который нужно перенормировать, в результате он примет вид:

$$\begin{aligned} \tilde{F}(t_1, t_2, t_3, t_4) = \\ = \frac{\langle T_C G_{13}(t_1, t_3 | \mathbf{r}_1) G_{24}(t_2, t_4 | \mathbf{r}_2) \rangle}{\langle T_C G_{13}(t_1, t_3 | \mathbf{r}_1) \rangle \langle G_{24}(t_2, t_4 | \mathbf{r}_2) \rangle}. \end{aligned} \quad (13)$$

Именно в таком виде коррелятор вычислен в работах [8, 9].

Как мы видим, действие стало квадратичным относительно фермионных операторов, а значит, мы можем взять по ним интеграл и перейти к действию, записанному в терминах полей G и Σ . Однако перед этим нам удобнее перейти к безразмерной переменной $u \equiv 2\pi T t$, где T – температура системы, а также мы перемасштабируем поля следующим образом:

$$\begin{aligned} \Sigma(t_1, t_0) &\equiv J^2 \left(\frac{2\pi T}{J} \right)^{3/2} \Sigma(u_1, u_0), \\ G(t_1, t_0) &\equiv \left(\frac{2\pi T}{J} \right)^{1/2} G(u_1, u_0). \end{aligned} \quad (14)$$

В новых переменных действие будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \frac{2S}{iN} = \\ = - \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\sigma_1, \sigma_0} \int du_1 du_0 \left\{ - \frac{\varepsilon_{\sigma_1} \varepsilon_{\sigma_0}}{4} G_{\sigma_1 \sigma_0}^4(u_1, u_0 | \mathbf{r}) \times \right. \\ \times \left[\Sigma_{\sigma_1 \sigma_0}^{(\text{free})}(u_1, u_0) + \Sigma_{\sigma_1 \sigma_0}(u_1, u_0 | \mathbf{r}) \right] G_{\sigma_1 \sigma_0}(u_1, u_0 | \mathbf{r}) + \\ \left. + \sum_{\delta \mathbf{r}} \frac{\varepsilon_{\sigma_1} \varepsilon_{\sigma_0}}{2} \left(\frac{w^2}{2\pi T J} \right) \times \right. \\ \left. \times G_{\sigma_1 \sigma_0}(u_1, u_0 | \mathbf{r}) G_{\sigma_1 \sigma_0}(u_1, u_0 | \mathbf{r} + \delta \mathbf{r}) \right\} - \\ - \text{Tr} \ln(\Sigma). \end{aligned} \quad (15)$$

При достаточно низкой температуре $T \ll T_{FL} \sim \frac{w^2}{J}$ последний член действия (15) становится доминирующим и поведение системы описывается обычной теорией ферми-жидкости. Мы будем работать при $T \gg T_{FL}$. В таком предположении, член с туннелированием можно рассматривать по теории возмущений. Пренебрегая им, мы приходим к действию модели SYK, ниже мы остановимся на его свойствах.

3. Основные свойства модели SYK. Вместо вычисления функционального интеграла по полям G и Σ мы можем воспользоваться седловым приближением, так как $S \propto N$, при этом $N \gg 1$. Как было отмечено выше, членом с w мы можем пренебречь при $T \gg T_{FL}$ при выводе седловых уравнений. Член с $\Sigma^{(\text{free})}$ важен при температурах порядка J и на малых временах. Полагая $J \gg T \gg T_{FL}$, мы можем

использовать седловые уравнения для полей G и Σ в виде:

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} \int du \Sigma_{\sigma_1 \sigma}(u_1, u | \mathbf{r}) G_{\sigma \sigma_0}(u, u_0 | \mathbf{r}) = \\ = \delta_{\sigma_1, \sigma_0} \delta(u_1 - u_0), \\ \Sigma_{\sigma_1 \sigma_0}(u_1, u_0 | \mathbf{r}) = \varepsilon_{\sigma_1} \varepsilon_{\sigma_0} G_{\sigma_1 \sigma_0}^{q-1}(u_1, u_0 | \mathbf{r}). \end{aligned} \quad (16)$$

Тут мы ввели параметр $q = 4$, в конкретных вычислениях бывает полезным рассматривать этот параметр произвольным для размерной регуляризации. Поэтому мы выпишем решения седловых уравнений в общем виде.

Уравнения выше имеют огромную группу симметрий. Чтобы это увидеть, рассмотрим произвольный набор монотонных функций $f_{\sigma, \mathbf{r}}(u)$, тогда мы можем сделать преобразование по правилу:

$$\begin{aligned} G_{\sigma_1 \sigma_0}(u_1, u_0 | \mathbf{r}) \mapsto [f'_{\sigma_1, \mathbf{r}}(u_1) f'_{\sigma_0, \mathbf{r}}(u_0)]^{\Delta} \times \\ \times G_{\sigma_1 \sigma_0}(f_{\sigma_1, \mathbf{r}}(u_1), f_{\sigma_0, \mathbf{r}}(u_0) | \mathbf{r}), \end{aligned} \quad (17)$$

где $\Delta = \frac{1}{q}$. После подстановки новой функции G мы получим тождество. Однако мы знаем, что исходный гамильтониан не зависит от времени, а значит, функция Грина, которую мы ищем, должна зависеть только от разности времен. При этом матричные элементы поля G не являются независимыми, так как связаны некоторыми соотношениями, одно из которых – флуктуационно-диссипационная теорема (связывающая келдшевскую функцию Грина с запаздывающей и опережающей). Поскольку мы работаем с системой, которая находится в равновесии, мы можем указать значение матричных элементов поля G лишь на первой части нашего двойного контура (соответственно в формуле ниже $\sigma \in \{1, 2\}$). С учетом этого комментария, трансляционно-инвариантное решение седловых уравнений имеет вид:

$$\begin{aligned} G_{\sigma_1 \sigma_0}^{(0)}(u_1, u_0 | \mathbf{r}) = b^{\Delta} g_{\sigma_1 \sigma_0}(u_1 - u_0), \\ g_{\sigma_1 \sigma_0}(u > 0) \equiv i \left[\frac{s'_{(0)}(u_1) s'_{(0)}(u_0)}{(s_{(0)}(u_1) - s_{(0)}(u_0))^2} \right]^{\Delta} \times \\ \times \begin{pmatrix} -e^{-i\pi\Delta} & e^{i\pi\Delta} \\ -e^{-i\pi\Delta} & e^{i\pi\Delta} \end{pmatrix}_{\sigma_1 \sigma_0}, \end{aligned} \quad (18)$$

где $b = \frac{(1-2\Delta)\tan(2\pi\Delta)}{2\pi}$. Тут функция $s_0(u) = e^u$, такая форма записи обусловлена дальнейшими выкладками. Решение при $u < 0$ может быть восстановлено, используя свойства симметрии функции Грина: $g_{\sigma_1 \sigma_0}(u) = -g_{\sigma_0 \sigma_1}(-u)$. Группа симметрий уравнений превосходит группу симметрий данного решения, которая задана преобразованиями вида:

$$s_0(u) \mapsto s(u) = \frac{as_0(u) + b}{cs_0(u) + d}. \quad (19)$$

Обычно такое поведение свидетельствует о наличии мягкой (Голдстоуновской) моды. Однако наши уравнения являются приближенными, даже при $w = 0$ мы пренебрегли членом $\Sigma^{(\text{free})}$, а значит, симметрия, которую мы обнаружили, является асимптотической, подобное встречается при работе с σ -моделями [16]. В нашем случае это означает, что вместо взятия всего функционального интеграла по полям G и Σ нам требуется проинтегрировать только по полям, которые являются решением седловых уравнений. Многообразие таких полей можно задать следующим образом: все такие поля получены с помощью преобразования симметрии (17), которое применили к седловому решению (18). Переход от интегрирования по всем полям к интегрированию по полям, лежащим на определенном многообразии не точен, он верен в силу того, что флуктуации в направлении, перпендикулярном многообразию подавлены в βJ раз [7].

Это многообразие параметризовано функциями $f_{\sigma, \mathbf{r}}(u)$. Действие [7] на этом многообразии имеет вид

$$S = -C_J \sum_{\mathbf{r}, \sigma} \varepsilon_{\sigma} \int du \text{Sch}\{e^{f_{\sigma, \mathbf{r}}}, u\} - C_w \sum_{\delta \mathbf{r}, \mathbf{r}, \sigma_1, \sigma_0} \int du_1 du_0 \varepsilon_{\sigma_1} \varepsilon_{\sigma_0} \times g_{\sigma_1 \sigma_0}^{(f)}(u_1, u_0 | \mathbf{r}) g_{\sigma_1 \sigma_0}^{(f)}(u_1, u_0 | \mathbf{r} + \delta \mathbf{r}), \quad (20)$$

где $C_J = \alpha_S N \frac{2\pi T}{J}$ и $C_w = \frac{Nw^2}{4\pi JT}$ – теплоемкость модели SYK и вклада в теплоемкость от возмущения соответственно, $\alpha_S \approx 0.05$. Поле $g^{(f)}$ (при $u_1 - u_2 > 0$) определено как:

$$g_{\sigma_1, \sigma_2}^{(f)}(u_1, u_0 | \mathbf{r}) = [f'_{\sigma_1, \mathbf{r}}(u_1) f'_{\sigma_0, \mathbf{r}}(u_0)]^{\Delta} \times g_{\sigma_1 \sigma_0}(f_{\sigma_1, \mathbf{r}}(u_1) - f_{\sigma_0, \mathbf{r}}(u_0)). \quad (21)$$

Символ $\text{Sch}\{s(u), u\}$ обозначает производную Шварца, которая определена как:

$$\text{Sch}\{s(u), u\} \equiv \left(\frac{s''}{s'}\right)' - \frac{1}{2} \left(\frac{s''}{s'}\right)^2. \quad (22)$$

Одно из важных свойств производной Шварца следующее: при замене s на дробно-линейное преобразование от s величина производной не изменится. Коррелятор, который мы планируем вычислять, имеет следующий вид, с учетом введенных обозначений:

$$\tilde{F}(u_1, u_2, u_3, u_4) = \frac{\langle T_C g_{1,3}^{(f)}(u_1, u_3 | \mathbf{r}_1) g_{2,4}^{(f)}(u_2, u_4 | \mathbf{r}_2) \rangle}{\langle g_{1,3}^{(f)}(u_1, u_3 | \mathbf{r}_1) \rangle \langle g_{2,4}^{(f)}(u_2, u_4 | \mathbf{r}_2) \rangle}. \quad (23)$$

Мы будем работать с квадратичным действием, которое применимо при $w \gg \frac{N}{J}$ [17, 18]. В против-

ном случае наше рассмотрение ограничено временами $t \ll \frac{N}{J}$ [19]. Далее мы займемся вычислением ОТОС.

4. Поведение ОТОС на больших временах.

Основная идея статьи состоит в рассмотрении следующего анзаца для поля $f(u)$:

$$e^{f(u)} = \frac{e^u + a(u)}{b(u)e^u + 1}, \quad (24)$$

где $a(u)$ и $b(u)$ – медленные функции. Используя такую подстановку, мы можем написать выражение для поля g , которое следует из выражения ниже (мы пренебрегаем производными полей a и b в силу предположения об их медленности):

$$4 \sinh^2 \left(\frac{u_1 - u_0}{2} \right) \frac{f'_{\sigma_1, \mathbf{r}}(u_1) f'_{\sigma_0, \mathbf{r}}(u_0)}{4 \sinh^2 \left(\frac{f_{\sigma_1, \mathbf{r}}(u_1) - f_{\sigma_0, \mathbf{r}}(u_0)}{2} \right)} \approx \left[1 + 2 \frac{a_{\sigma_1, \mathbf{r}}(u_1) - a_{\sigma_0, \mathbf{r}}(u_0)}{e^{u_1} - e^{u_0}} + 2 \frac{b_{\sigma_1, \mathbf{r}}(u_1) - b_{\sigma_0, \mathbf{r}}(u_0)}{e^{-u_1} - e^{-u_0}} \right]^{-1}. \quad (25)$$

В выражении выше мы оставили только линейные члены по a или b с экспоненциально растущими коэффициентами, так как эти поля малы ($a, b \propto \propto N^{-1/2}$). Однако, умножив их на экспоненциально большие множители, мы получим комбинацию, которая не мала. Для дальнейшей работы нам понадобится вспомогательный интеграл:

$$a^{-\gamma} = \int_0^{\infty} s^{\gamma-1} e^{-sa} \frac{ds}{\Gamma(\gamma)}. \quad (26)$$

Используя (26) дважды, мы можем записать интересный нас коррелятор в виде:

$$\begin{aligned} \tilde{F}(u_1, u_2, u_3, u_4) &= \\ &= \int_0^{\infty} \frac{ds_o ds_e}{\Gamma(2\Delta)^2} (s_o s_e)^{(2\Delta)-1} e^{-s_e - s_o} \langle e^{iS_j} \rangle, \\ S_J &= \sum_{\mathbf{r}} \int du \left(\hat{j}_{a, \mathbf{r}}^T(u) \hat{a}_{\mathbf{r}}(u) + \hat{j}_{b, \mathbf{r}}^T(u) \hat{b}_{\mathbf{r}}(u) \right). \end{aligned} \quad (27)$$

Выше мы ввели столбцы $\hat{a}$ и $\hat{b}$, состоящие из полей a и b соответственно. Эти столбцы имеют по 4 компоненты в соответствии с ветвями контура. Столбец $\hat{j}_a$ имеет следующий вид:

$$\hat{j}_a = -i \begin{pmatrix} \frac{-2s_o \delta(u - u_1) \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}_1}}{e^{u_1} - e^{u_3}} \\ \frac{-2s_e \delta(u - u_2) \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}_2}}{e^{u_2} - e^{u_4}} \\ \frac{2s_o \delta(u - u_3) \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}_1}}{e^{u_1} - e^{u_3}} \\ \frac{2s_e \delta(u - u_4) \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}_2}}{e^{u_2} - e^{u_4}} \end{pmatrix}. \quad (28)$$

Вектор $\hat{j}_b$ определен аналогично.

Теперь мы можем рассмотреть действие для полей a и b . Поскольку выбранное нами поле f (24) локально близко к седловому, то мы можем воспользоваться квадратичным действием для вывода действия для полей a и b . Квадратичное действие удобно записать, введя поле δf , определенное как $f = u + \delta f(u)$. Подобное квадратичное действие было получено в работах [14, 20] и имеет вид:

$$S_2 = \frac{1}{2} \int \frac{d\Omega d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^{d+1}} \delta f_{\mathbf{p}}^\dagger(\Omega) \left[\hat{\mathcal{G}}(\Omega, \mathbf{p}) \right]^{-1} \delta f_{\mathbf{p}}(\Omega), \quad (29)$$

$$\left[\hat{\mathcal{G}}(\Omega, \mathbf{p}) \right]^{-1} = \left[\hat{\mathcal{G}}^0(\Omega) \right]^{-1} - \hat{\Sigma}(\Omega, \mathbf{p}),$$

где $\mathcal{G}$ – функция Грина мягких мод для нашего действия, $\mathcal{G}^0$ – функция Грина мягких мод в модели SYK, Σ – собственная энергетическая часть, пропорциональная w^2 . Мы снова использовали матричное обозначение, объединив 4 поля δf с разных частей контура в один вектор, мы также используем частотно-импульсное представление. Все матрицы выше имеют размер 4×4 , однако они вычисляются для равновесной системы, с учетом соотношения между запаздывающей и опережающей функциями Грина: $\mathcal{G}_R(\Omega) = \mathcal{G}_A(-\Omega)$ и флуктуационно-диссипационной теоремы, мы можем записать только запаздывающую функцию Грина (все остальные по ней восстанавливаются):

$$\begin{aligned} [\mathcal{G}_R(\Omega, \mathbf{p})]^{-1} &= [\mathcal{G}_R^0(\Omega)]^{-1} - \hat{\Sigma}_R(\Omega, \mathbf{p}), \\ \Sigma_R(\Omega, \mathbf{p}) &= \frac{C_w}{2} \sum_{\delta \mathbf{r}} \left\{ \Omega^2 \psi(\Omega) + \right. \\ &+ \frac{1}{2} \sin^2 \left(\frac{\mathbf{p} \delta \mathbf{r}}{2} \right) (2(1 + \Omega^2) + (1 + 2\Omega^2) \psi(\Omega)) \left. \right\}, \\ \psi(\Omega) &= \Psi \left(\frac{1}{2} - i\Omega \right) - \Psi \left(-\frac{1}{2} \right), \\ \Psi(z) &= \partial_z \ln \Gamma(z), \quad \mathcal{G}_R^0(\Omega) = \frac{1}{C_J \Omega^2 (\Omega^2 + 1)}. \end{aligned} \quad (30)$$

Действие для полей $a(\Omega)$ и $b(\Omega)$ определено для $\Omega \ll 1$ в силу их медленности и имеет вид:

$$S_{2,ab} = \int \frac{d\Omega d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^{d+1}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^\dagger(\Omega) \left[\hat{\mathcal{G}}(i + \Omega, \mathbf{p}) \right]^{-1} \hat{b}_{\mathbf{p}}(\Omega). \quad (31)$$

Имея квадратичное действие для полей a и b , мы можем выполнить усреднение:

$$\langle e^{iS_J} \rangle \approx \exp\{-s_e s_o z\}, \quad (32)$$

$$z \equiv \frac{i}{4} \frac{f_\alpha(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}{C_J + \sum_{\delta \mathbf{r}} C_w \left(\frac{\pi^2}{8} - 1 \right)} \times \frac{\sinh \left(\frac{u_4 + u_2 - u_1 - u_3}{2} \right)}{\sinh \left(\frac{u_4 - u_2}{2} \right) \sinh \left(\frac{u_3 - u_1}{2} \right)}, \quad (33)$$

$$f_\alpha(\mathbf{r}) \equiv \int_{BZ} \frac{d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\mathbf{r}\mathbf{p}}}{1 + \alpha \sum_{\delta \mathbf{r}} \sin^2 \left(\frac{\mathbf{p} \delta \mathbf{r}}{2} \right)}, \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \alpha &\equiv \frac{\sum_{\delta \mathbf{r}} C_w \frac{\pi^2}{8}}{C_J + \sum_{\delta \mathbf{r}} C_w \left(\frac{\pi^2}{8} - 1 \right)} = \\ &= \left[\frac{8\alpha_S}{d\pi^2} \left(\frac{2\pi T}{w} \right)^2 + \left(1 - \frac{8}{\pi^2} \right) \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (35)$$

Знак $\approx$ в (32) означает, что мы выкинули члены, пропорциональные s_e^2 и s_o^2 , так как они “локальны”, т.е. зависят от пары времен u_1, u_3 или u_2, u_4 , в них нет экспоненциального роста, и поэтому они малы. Как и ранее, d – размерность решетки. Функция z , с одной стороны, экспоненциально растет при увеличении $u_1 - u_2$, с другой стороны, функция f экспоненциально убывает при больших $|\mathbf{r}|$. Наконец, мы можем записать явную формулу для коррелятора:

$$\begin{aligned} \tilde{F}(u_1, u_2, u_3, u_4) &= \\ &= \int_0^\infty \frac{ds_o ds_e}{\Gamma(2\Delta)^2} (s_o s_e)^{(2\Delta)} e^{-s_e - s_o} e^{-s_e s_o z} = \\ &= \int_0^\infty \frac{s^{2\Delta-1}}{\Gamma(2\Delta)} \frac{e^{-s}}{(1 + sz)^{2\Delta}} ds = \frac{U(2\Delta, 1, \frac{1}{z})}{z^{2\Delta}} = \\ &= \begin{cases} 1 - 4z\Delta^2 & z \ll 1, \\ \frac{\ln(z)}{z^{2\Delta}\Gamma(2\Delta)} & z \gg 1. \end{cases} \end{aligned} \quad (36)$$

Здесь U – вырожденная гипергеометрическая функция, однозначно определенная своими асимптотиками.

Вместе с выражением для z (33) это выражение является главным результатом этой статьи. Отметим далее важные свойства полученного результата.

Во-первых, при $C_w = 0$ мы получаем ответ для ОТОС в модели SYK, это выражение совпадает с

формулой (6.10) работы [8] и совпадает с результатом применения метода из статьи [9] к модели SYK. Отметим, что предложенный нами метод вычисления отличается от методов в упомянутых работах, совпадение результатов – указание на возможность применения нашего (24) анзаца для задачи с $w \neq 0$.

Во-вторых, интеграл $f_\alpha(\mathbf{r})$ определяет зависимость от расстояния между операторами в корреляторе. Этот интеграл экспоненциально затухает с расстоянием, но вид затухания зависит не только от модуля $\mathbf{r}$, но и направления, при не очень больших α (при больших α интеграл набирается на малых r и эта зависимость пропадает). Таким образом, мы делаем вывод, что информация о возмущении в системе распространяется баллистически, что качественно совпадает с поведением других систем [2, 10, 11].

В-третьих, из формулы (36) следует, что в области с $z \gg 1$ коррелятор – мал, $\tilde{F} \approx 0$, мы будем говорить, что точки из этой области “знают” о приложенном возмущении; область с $z \ll 1$ “не знает” о возмущении и в ней $\tilde{F} \approx 1$. Остановимся подробнее на области с $z \sim 1$. Зафиксировав направление, мы можем отметить, что $z \propto e^{\lambda_L(|t_{12}| - \frac{r_{12}^2}{v}) - \ln(N)}$, тут $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \gg 1$ и $t_{12} = t_1 - t_2 \approx t_3 - t_4$, v – некоторый параметр с размерностью скорости. Из этого вида мы можем сказать, что со временем область $z \sim 1$ распространяется со скоростью v , вдоль зафиксированного ранее направления.

В качестве примера приведем скорости для разных случаев.

В общем случае (произвольной размерности) универсальное поведение функции f из формулы (34) наблюдается только при $\frac{v^2}{a^2} \gg \alpha \gg 1$, тут a – длина ребра решетки. В таком случае $f \sim \exp\left\{-\sqrt{\frac{2}{\alpha}} \frac{r}{a}\right\}$, что соответствует скорости распространения фронта:

$$v = 2\pi T \sqrt{\frac{\alpha}{2}} a, \quad (37)$$

которая не зависит от направления.

В случае одномерной системы ($\mathbf{r} = (na)$) асимптотическое поведение функции f следующее:

$$f_\alpha^{(1D)}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^{|n|} & \alpha \ll 1, \\ \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \left(1 - \sqrt{\frac{2}{\alpha}}\right)^{|n|} & \alpha \gg 1. \end{cases} \quad (38)$$

В двумерном случае $\alpha \ll 1$:

$$f_{\alpha \ll 1}^{(2D)}(\mathbf{r}) = \left(\frac{\alpha}{2}\right)^{|n|+|m|} C_{|n|+|m|}^{|m|}. \quad (39)$$

Тут вектор $\mathbf{r} = (na, ma)$, как мы видим, эта функция сильно зависит от направления. При $\alpha \gg 1$ функция f имеет вид:

$$f_{\alpha \gg 1}^{(2D)}(\mathbf{r}) = \frac{K_0 \left(\sqrt{\frac{2}{\alpha}} \frac{r}{a}\right)}{\pi \alpha}. \quad (40)$$

Разберем зависимость параметра α от температуры. Используя формулу (35), мы можем отметить, что α не зависит от J и определяется только параметром $\frac{T}{w}$. При достаточно высоких температурах $T \gg w$, $\alpha \sim \left(\frac{w}{T}\right)^2$ – зависит от температуры. В противоположном случае $w \gg T$ параметр $\alpha \approx \alpha_0 = \frac{\pi^2}{\pi^2 - 8}$ принимает универсальное значение, которое не зависит ни от параметров системы, ни от температуры. Стоит отметить, что $\alpha_0 \approx 5.27$, и мы можем считать, что $\alpha_0 \gg 1$.

Заключение. В представленной работе исследовалось поведение ОТОС для системы, состоящей из квантовых точек. Динамика внутри точек описывается моделью SYK с характерным энергетическим масштабом J . Между точками существует туннелирование с характерной амплитудой w . Мы показали, что в такой системе ляпуновская экспонента имеет свое максимальное значение $\lambda_L = 2\pi T$, аналогично модели SYK. Из-за наличия ненулевой размерности изучаемый коррелятор имеет пространственную структуру: пространство можно разделить на две области: 1) область, “знающая” о приложенном возмущении с $\tilde{F} \approx 0$; 2) область, “не знающая” о возмущении с $\tilde{F} \approx 1$. Эти области разделяет граница, которая распространяется во времени. Детали распространения, в общем случае, зависят от параметров системы и деталей решетки. Однако при $w \gg T$ границу можно считать сферической, а ее скорость распространения $v_f = 2\pi T \sqrt{\frac{\alpha_0}{2}} a$ – зависит только от температуры и длины ребра решетки. Также отметим, что несмотря на то, что вклад с w в седловое уравнение не существен при $T \gg T_{FL} \sim \frac{w^2}{J}$, свойства системы сильно меняются при $T \sim w$. Подобный эффект был также обнаружен в работах [14, 20].

Автор благодарен М. В. Фейгельману и А. Ю. Китаеву за обсуждение работы на всех ее этапах. Также автор благодарен К. С. Тихонову за обсуждение свойств ОТОС.

Данное исследование было частично спонсировано Фондом развития теоретической физики и математики “БАЗИС”, программой фундаментальных исследований ВШЭ и грантом Российского фонда фундаментальных исследований # 20-32-90057.

1. A. I. Larkin and Yu. N. Ovchinnikov, Sov. Phys. JETP **28**(6), 1200 (1969).
2. I. L. Aleiner, L. Faoro, and L. B. Ioffe, Ann. Phys. **375**, 378 (2016).

3. Y. Sekino and L. Susskind, J. High Energy Phys. **2008**, 10 (2008).
4. A. Kitaev and B. Yoshida, preprint arXiv:1710.03363.
5. X. Mi, P. Roushan, C. Quintana et al. (Collaboration), preprint arXiv:2101.08870.
6. J. Maldacena, S. H. Shenker, and D. Stanford, J. High Energy Phys. **2016**, 8 (2016).
7. A. Kitaev and S. J. Suh, J. High Energy Phys. **2018**, 5 (2018).
8. J. Maldacena, D. Stanford, and Z. Yang, Prog. Theor. Exp. Phys. **2016**, 12 (2016).
9. Y. Gu, A. Kitaev, and P. Zhang, preprint arXiv:2111.12007.
10. A. Nahum, S. Vijay, and J. Haah, Phys. Rev. **8**, 021014 (2018).
11. C. W. von Keyserlingk, T. Rakovszky, F. Pollmann, and S. L. Sondhi, Phys. Rev. X **8**, 021013 (2018).
12. Y. Gu, X. L. Qi, and D. Stanford, J. High Energy Phys. **2017**, 5 (2017).
13. S. Banerjee and E. Altman, Phys. Rev. **95**, 13 (2017).
14. A. V. Lunkin and M. V. Feigel'man, preprint arXiv:2112.11500.
15. L. V. Keldysh, Sov. Phys. JETP **20**, 4 (1965).
16. K. Efetov, *Supersymmetry in Disorder and Chaos*, Cambridge university press, Cambridge (1999).
17. A. V. Lunkin, K. S. Tikhonov, and M. V. Feigel'man, Phys. Rev. Lett. **121**, 23 (2018).
18. A. V. Lunkin, A. Yu. Kitaev, and M. V. Feigel'man, Phys. Rev. Lett. **125**, 19 (2020).
19. D. Bagrets, A. Altland, and A. Kamenev, Nuclear Physics B **911**, 191 (2016).
20. A. V. Lunkin and M. V. Feigel'man, SciPost Phys. **12**, 031 (2022).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 115

Выпуск 6

25 марта 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>

Массы легких кварков в теории с динамическим нарушением киральной симметрии¹⁾

А. А. Осипов²⁾

Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

Поступила в редакцию 31 января 2022 г.

После переработки 15 февраля 2022 г.

Принята к публикации 26 февраля 2022 г.

Массовые формулы и константы распада псевдоскалярных π и K мезонов получены в теории с четырехкварковыми взаимодействиями. Для вычисления кваркового детерминанта впервые используется ряд Вольтерры, позволяющий учесть неравенство конституентных масс кварков $M_u \neq M_d \neq M_s$ в разложении эффективного действия по степеням $1/M^2$. Дополнительно полагаем, что массы легких кварков $m_i \sim \mathcal{O}(1/N_c)$. Показано, что теория не только воспроизводит известные неравенства для отношений масс легких кварков, но и позволяет вычислить ряд величин, характеризующих степень нарушения киральной симметрии.

DOI: 10.31857/S1234567822060015

1. Введение. Квантовая хромодинамика (КХД), если пренебречь массами легких u , d , и s кварков, на классическом уровне обладает киральной $U(3)_L \times U(3)_R$ симметрией, которая при низких энергиях спонтанно нарушена до $SU(3)_f \times U(1)_V$ подгруппы. Это приводит к появлению в спектре теории нонета безмассовых голдстоуновских бозонов (теорема Голдстоуна). Отличные от нуля массы легких кварков $m_u \neq m_d \neq m_s$ явно нарушают ароматическую $SU(3)_f$ симметрию. В результате голдстоуновские частицы приобретают ненулевые массы.

Техника алгебры токов позволяет связать массы псевдоскалярных мезонов, входящие в соотношение Гелл-Манна–Оакса–Реннера, с отношением масс легких кварков

$$\frac{m_u}{m_d} = \frac{\bar{\mu}_{K^+}^2 - \bar{\mu}_{K^0}^2 + \bar{\mu}_{\pi^+}^2}{\bar{\mu}_{K^0}^2 - \bar{\mu}_{K^+}^2 + \bar{\mu}_{\pi^+}^2} \equiv R_x, \quad (1)$$

$$\frac{m_s}{m_d} = \frac{\bar{\mu}_{K^+}^2 + \bar{\mu}_{K^0}^2 - \bar{\mu}_{\pi^+}^2}{\bar{\mu}_{K^0}^2 - \bar{\mu}_{K^+}^2 + \bar{\mu}_{\pi^+}^2} \equiv R_y, \quad (2)$$

где $\bar{\mu}_{\pi^+}^2 = B_0(m_u + m_d)$, $\bar{\mu}_{K^+}^2 = B_0(m_u + m_s)$, $\bar{\mu}_{K^0}^2 = B_0(m_d + m_s)$ – массы мезонов при выключенном электромагнитном взаимодействии, а коэффициент пропорциональности $B_0 = |\langle \bar{q}q \rangle_0|/F^2$ определяется величиной кваркового конденсата. Размерная константа $F \simeq 90$ МэВ.

Учет электромагнитных взаимодействий увеличивает массы заряженных состояний:

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

²⁾e-mail: aaosipov@jinr.ru

$$\mu_{\pi^+}^2 = \bar{\mu}_{\pi^+}^2 + \Delta_{el}^2, \quad \mu_{\pi^0}^2 = \bar{\mu}_{\pi^+}^2 = \bar{\mu}_{\pi^0}^2, \quad (3)$$

$$\mu_{K^+}^2 = \bar{\mu}_{K^+}^2 + \tilde{\Delta}_{el}^2, \quad \mu_{K^0}^2 = \bar{\mu}_{K^0}^2. \quad (4)$$

Разница в массах заряженного и нейтрального пионов обусловлена в основном электромагнитным взаимодействием. Вклад сильных взаимодействий пропорционален разности $(m_d - m_u)^2$ и поэтому пренебрежимо мал.

Если воспользоваться теоремой Дашена [1]

$$\Delta_{el}^2 = \tilde{\Delta}_{el}^2, \quad (5)$$

которая является строгим результатом для алгебры токов, то приходим к хорошо известному результату Вайнберга [2]

$$\frac{m_u}{m_d} = \frac{2\mu_{\pi^0}^2 - \mu_{\pi^+}^2 + \mu_{K^+}^2 - \mu_{K^0}^2}{\mu_{K^0}^2 - \mu_{K^+}^2 + \mu_{\pi^+}^2} = 0.56, \quad (6)$$

$$\frac{m_s}{m_d} = \frac{\mu_{K^+}^2 + \mu_{K^0}^2 - \mu_{\pi^+}^2}{\mu_{K^0}^2 - \mu_{K^+}^2 + \mu_{\pi^+}^2} = 20.18. \quad (7)$$

В работе [3] была построена эффективная теория, использующая одновременное разложение по массе легких кварков, импульсам и $1/N_c$, где N_c – число цветовых степеней свободы. Это позволило вычислить первую поправку к результату Вайнберга и, в итоге, превратило уравнения (6) и (7) в неравенства

$$\frac{m_u}{m_d} > \frac{2m_{\pi^0}^2 - m_{\pi^+}^2 + m_{K^+}^2 - m_{K^0}^2}{m_{K^0}^2 - m_{K^+}^2 + m_{\pi^+}^2} \equiv R_{xD}, \quad (8)$$

$$\frac{m_s}{m_d} < \frac{m_{K^+}^2 + m_{K^0}^2 - m_{\pi^+}^2}{m_{K^0}^2 - m_{K^+}^2 + m_{\pi^+}^2} \equiv R_{yD}, \quad (9)$$

где физические массы псевдоскалярных мезонов $m_{\pi^0}, m_{\pi^+}, m_{K^0}, m_{K^+}$ включают, как вышеуказанную первую поправку, так и электромагнитный вклад виртуальных фотонов $\sim e^2$ (здесь и в дальнейшем индексом D обозначаются выражения, при получении которых использовалась теорема Дашена).

Целью настоящей работы является изучение механизма нарушения киральной симметрии в КХД при низких энергиях. Его специфика состоит в том, что имеют место сразу два процесса: явное нарушение киральной симметрии посредством ненулевых масс легких кварков, и накладывающийся на эту картину процесс спонтанного нарушения симметрии. Последний ведет к возникновению щели в спектре фермионов, т.е., появлению тяжелых конститuentных кварков. Как известно, четырехкварковые взаимодействия типа Намбу–Иона–Лазинио (НИЛ) [4, 5] могут отвечать за данный процесс. Бозонизация такой теории связана с задачей вычисления детерминанта оператора Дирака с диагональной массовой матрицей, элементы которой не равны и значительно превышают массы легких кварков. Именно для таких случаев недавно был предложен математический формализм [6–8], основанный на методе собственного времени Фока–Швингера [9–11] и разложении в ряд Вольтерры. До сих пор для этой цели традиционно применялся ряд Тэйлора.

В этой связи следует отметить, что задача вычисления масс псевдоскалярных мезонов является отличным тестом для проверки эффективности нового асимптотического разложения, поскольку известно, что результат такого разложения существенно отличается от результата, полученного посредством тейлоровского ряда. Это касается как массовых формул, так и остальных низкоэнергетических характеристик псевдоскалярных мезонов. Ниже будет показано, что предложенный здесь формализм воспроизводит как формулы Вайнберга (6), (7), так и неравенства Лойтвиллера (8), (9). Более того, он позволяет вычислить ряд физических величин, характеризующих явное нарушение киральной симметрии, что важно для проверки предсказательной силы теории.

2. Модель. Лагранжиан с четырехкварковыми взаимодействиями широко используется для описания механизма спонтанного нарушения киральной симметрии и получения эффективного мезонного действия при низких энергиях [12–15]

$$\mathcal{L} = \bar{q}(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)q + \mathcal{L}_{\text{int}}. \quad (10)$$

Здесь γ^μ – матрицы Дирака, q – кварковые поля, а m – диагональная матрица $m = \text{diag}(m_u, m_d, m_s)$, содержащая токовые массы u, d и s кварков. Плотность

Лагранжа, описывающая четырехкварковые взаимодействия, имеет вид $\mathcal{L}_{\text{int}} = \mathcal{L}^{(0)} + \mathcal{L}^{(1)}$, где сумма состоит из кирально симметричных комбинаций со спином ноль и единица соответственно

$$\mathcal{L}^{(0)} = \frac{G_S}{2} [(\bar{q}\lambda_a q)^2 + (\bar{q}i\gamma_5 \lambda_a q)^2], \quad (11)$$

$$\mathcal{L}^{(1)} = -\frac{G_V}{2} [(\bar{q}\gamma^\mu \lambda_a q)^2 + (\bar{q}\gamma^\mu \gamma_5 \lambda_a q)^2], \quad (12)$$

где матрица $\lambda_0 = \sqrt{2/3}$, а λ_i – матрицы Гелл-Манна. Каждое из двух слагаемых в $\mathcal{L}_{\text{int}}$ инвариантно относительно преобразований группы $U(3)_L \times U(3)_R$.

Используя метод функционального интеграла, лагранжеву плотность (10) можно эквивалентно представить в виде

$$\mathcal{L}' = \bar{Q}(i\gamma^\mu d_\mu - M + \sigma)Q + \frac{1}{4G_V} \text{tr}(V_\mu^2 + A_\mu^2) - \frac{1}{4G_S} \text{tr}(\sigma^2 - \{\sigma, M\} + (\sigma - M)\Sigma), \quad (13)$$

где мы воспользовались функциональной свободой выбора динамических переменных в пользу нелинейной реализации киральной симметрии. При этом векторные, аксиально-векторные, скалярные и псевдоскалярные поля описываются эрмитовыми матрицами $V_\mu = V_\mu^a \lambda_a$, $A_\mu = A_\mu^a \lambda_a$, $\sigma = \sigma_a \lambda_a$, $\phi = \phi_a \lambda_a$,

$$Q = (\xi P_R + \xi^\dagger P_L)q, \quad (14)$$

$$d_\mu = \partial_\mu - i \left[\xi_\mu^{(+)} + V_\mu + \gamma_5 \left(\xi_\mu^{(-)} + A_\mu \right) \right], \quad (15)$$

$$\xi_\mu^{(\pm)} = \frac{i}{2} (\xi \partial_\mu \xi^\dagger \pm \xi^\dagger \partial_\mu \xi), \quad (16)$$

$$\Sigma = \xi m \xi + \xi^\dagger m \xi^\dagger, \quad \xi = \exp\left(\frac{i}{2} \phi\right). \quad (17)$$

Проекционные операторы имеют вид $P_R = (1 + \gamma_5)/2$, $P_L = (1 - \gamma_5)/2$. Псевдоскалярное поле ϕ безразмерно, позднее, при переходе к полевым функциям физических состояний, оно приобретет необходимую размерность массы. Матрица M диагональна $M = \text{diag}(M_u, M_d, M_s)$, а ее элементами являются массы конститuentных кварков Q . Эти массы возникают в результате динамического нарушения симметрии и контролируются уравнением щели.

Для получения эффективного мезонного лагранжиана следует проинтегрировать по кварковым полям Q . Неравенство кварковых масс приводит к необходимости учета разностных эффектов, аккумулируемых при разложении эффективного действия в ряд по степеням собственного времени t , в t – зависимых коэффициентах. Именно это обстоятельство отличает ряд Вольтерры от тейлоровского. В пределе равных масс кварков эти коэффициенты трансформируются в экспоненту, которая полностью факторизуется, в результате чего ряд Вольтерры переходит в обычный ряд Тейлора. В силу приведенных

соображений, мы на этом шаге воспользуемся рядом Вольтерры [8], что существенно отличается от стандартного рассмотрения модели НИЛ.

В частности, разложение ведет к условию самосогласованности (условию отсутствия в эффективном лагранжиане линейных по σ членов), известному как уравнение щели:

$$M_i \left(1 - \frac{N_c G_S}{2\pi^2} J_0(M_i) \right) = m_i \quad (i = u, d, s), \quad (18)$$

где

$$J_0(M_i) = \Lambda^2 - M_i^2 \ln \left(1 + \frac{\Lambda^2}{M_i^2} \right). \quad (19)$$

Параметр обрезания Λ характеризует масштаб, на котором изучается рассматриваемая эффективная теория. В данном случае это масштаб адронных масс, который мы полагаем равным $4\pi F \simeq 1.1$ ГэВ.

В режиме сильной связи

$$G_S \Lambda^2 > \frac{2\pi^2}{N_c} = 6.58 \quad (20)$$

каждое из трех уравнений (18) имеет нетривиальное решение, которое ведет к возникновению щели в спектре фермионов и, как следствие, к динамическому нарушению киральной симметрии. Согласно КХД, спонтанное нарушение киральной симметрии и конфайнмент имеют место в пределе больших N_c [16, 17], поэтому из (20) следует, что $G_S \sim \mathcal{O}(1/N_c)$. Очевидно, что $\Lambda \sim \mathcal{O}(1)$.

В теории с нарушенной киральной симметрией возникает смешивание псевдоскалярных состояний с аксиально-векторными. Для их устранения необходимо переопределить аксиально-векторные поля [18]

$$A_\mu = A'_\mu - \kappa_A \circ \xi_\mu^{(-)}, \quad (21)$$

где κ_A – матрица, а символ $\circ$ означает адамаровское произведение матриц [19], которое определяется почленным умножением соответствующих элементов матриц

$$(A \circ B)_{ij} = A_{ij} B_{ij} \quad (22)$$

без суммирования по повторяющимся индексам. Это произведение, в отличие от стандартного, коммутативно, но сохраняет свойства ассоциативности и дистрибутивности.

Смешивание будет отсутствовать, если матричные элементы κ_A имеют вид

$$(\kappa_A)_{ij}^{-1} = 1 + \frac{8\pi^2}{N_c G_V [2(M_i + M_j)^2 J_{ij} + (\Delta J_0)_{ij}]}. \quad (23)$$

Явный вид интегралов $J_{ij} = J_1(M_i, M_j)$ и $(\Delta J_0)_{ij}$ приведен в Приложении D работы [8]. Из данной формулы, в частности, следует, что $G_V \sim \mathcal{O}(1/N_c)$.

Найдем выражения для масс псевдоскалярных мезонов. Нас интересуют только массы каонов $K^\pm$, K^0 , $\bar{K}^0$ и заряженных пионов $\pi^\pm$. Результаты вычислений спектра нейтральных состояний π^0 , η , η' будут представлены в отдельной работе, так как здесь они не потребуются.

Заметим, что кинетическая часть лагранжиана свободных мезонных полей будет иметь стандартный вид, если переопределить переменные

$$\begin{aligned} \pi^\pm &= f_{ud}^{-1} \pi_{\text{ph}}^\pm, & K^\pm &= f_{us}^{-1} K_{\text{ph}}^\pm, \\ K^0 &= f_{ds}^{-1} K_{\text{ph}}^0, & \bar{K}^0 &= f_{ds}^{-1} \bar{K}_{\text{ph}}^0, \end{aligned} \quad (24)$$

где физические состояния отмечены индексом ph и, как легко видеть, имеют размерность массы, а константы $f_{ij} \sim \mathcal{O}(\sqrt{N_c})$ имеют вид

$$f_{ij} = \sqrt{\frac{(\kappa_A)_{ij}}{4G_V}}. \quad (25)$$

Массовые формулы псевдоскаляров следуют из последнего слагаемого в (13), в котором необходимо перейти к физическим полям

$$\bar{M}_{\pi^\pm}^2 = \frac{1}{4G_S f_{ud}^2} (M_u + M_d)(m_u + m_d), \quad (26)$$

$$\bar{M}_{K^\pm}^2 = \frac{1}{4G_S f_{us}^2} (M_u + M_s)(m_u + m_s), \quad (27)$$

$$\bar{M}_{K^0}^2 = \frac{1}{4G_S f_{ds}^2} (M_d + M_s)(m_d + m_s). \quad (28)$$

Черта над символом массы, как и раньше, указывает на то, что это выражение получено без учета электромагнитных поправок. Подчеркнем, что формулы (25)–(28) отличаются от аналогичных выражений, полученных как в [14, 15], так и в остальных известных мне работах, использующих модели с четырехкварковыми взаимодействиями. Однако в пределе точной $SU(3)_f$ симметрии имеет место полное совпадение результатов.

3. $1/N_c$ разложение. Рассматриваемая эффективная теория содержит шесть размерных параметров Λ , G_S , G_V , m_i . Первый из них определяет характерный энергетический масштаб, остальные должны быть малы по сравнению с ним. Естественной КХД-индуцированной мерой здесь может быть их $1/N_c$ поведение. Принимая это, полагаем, что $m_i \sim \mathcal{O}(1/N_c)$. Подобное соглашение используется в $1/N_c$ киральной теории возмущений [3, 20]. Данное предположение означает, что формулы (25)–(28) содержат вклады различного порядка по $1/N_c$, каждый из которых, начиная с некоторого вполне определенного шага кирального разложения, должен быть скорректирован соответствующими вкладами петлевых мезонных диаграмм.

Чтобы продвинуться дальше, обратимся к уравнениям (18), которые связывают массы конститuentных и токовых кварков. Подобно тому, как это делалось в работе [21], ищем решение в виде разложения по массам легких кварков

$$M_i(m_i) = M_0 + M'(0) m_i + \mathcal{O}(m_i^2). \quad (29)$$

Очевидно, что в киральном пределе $m_i = 0$ массы всех конститuentных кварков равны между собой. Эту величину обозначим через M_0 , а ее значение найдем, решив уравнение

$$1 - \frac{N_c G_S}{2\pi^2} J_0(M_0) = 0. \quad (30)$$

Коэффициенты ряда Тейлора в разложении (29) определим путем дифференцирования уравнения (18), считая m_i независимыми переменными. На первом шаге находим

$$M'(0) = \frac{\pi^2}{N_c G_S M_0^2 J_1^0} = \frac{G_V}{G_S} (\kappa_{A0}^{-1} - 1) \equiv a. \quad (31)$$

Здесь и в дальнейшем индекс 0 у знака функции, зависящей от кварковых масс m_i , означает, что данная функция вычисляется в пределе $m_i \rightarrow 0$. Так $J_1^0 = J_1(M_0)$, а $\kappa_{A0}^{-1} = \lim_{m_i, m_j \rightarrow 0} (\kappa_A)_{ij}^{-1}$. Поскольку

$$J_1(x) = \ln \left(1 + \frac{\Lambda^2}{x^2} \right) - \frac{\Lambda^2}{\Lambda^2 + x^2} \quad (32)$$

монотонно убывающая положительно определенная функция от x в области $x > 0$, заключаем, что $a > 0$.

Подставляя разложение (29) в (26)–(28), в лидирующем порядке по массам токовых кварков приходим к известному результату алгебры токов для масс псевдоскалярных мезонов, где коэффициент

$$B_0 = -\frac{\langle \bar{q}q \rangle_0}{F^2} = \frac{2G_V M_0}{G_S \kappa_{A0}} = \frac{M_0}{2G_S F^2}. \quad (33)$$

Поскольку B_0 зависит только от параметров модели, из массовых формул можно извлечь информацию не только об отношениях (6) и (7), но и определить абсолютные величины кварковых масс.

Вычислим первую поправку к результату алгебры токов. Для этого сделаем следующий шаг в разложении выражений (26)–(28) по массам легких кварков. Имеем

$$\bar{m}_{\pi^+}^2 = \bar{\mu}_{\pi^+}^2 \left(1 + \frac{m_u + m_d}{2M_0} \delta_M \right), \quad (34)$$

$$\bar{m}_{K^+}^2 = \bar{\mu}_{K^+}^2 \left(1 + \frac{m_u + m_s}{2M_0} \delta_M \right), \quad (35)$$

$$\bar{m}_{K^0}^2 = \bar{\mu}_{K^0}^2 \left(1 + \frac{m_d + m_s}{2M_0} \delta_M \right). \quad (36)$$

Поправки содержат общий множитель δ_M , который имеет вид

$$\delta_M = a \left\{ 1 - 2(1 - \kappa_{A0}) \left[1 - \frac{\Lambda^4}{J_1^0(\Lambda^2 + M_0^2)} \right] \right\}. \quad (37)$$

Переписав отношения (1) и (2) через массовые формулы (34)–(36), убеждаемся, что

$$\frac{\bar{m}_{K^+}^2 - \bar{m}_{K^0}^2 + \bar{m}_{\pi^+}^2}{\bar{m}_{K^0}^2 - \bar{m}_{K^+}^2 + \bar{m}_{\pi^+}^2} = \frac{m_u}{m_d} \left[1 - \frac{\delta_M}{2M_0} m_s \left(\frac{m_d}{m_u} - \frac{m_u}{m_d} \right) \right], \quad (38)$$

$$\frac{\bar{m}_{K^+}^2 + \bar{m}_{K^0}^2 - \bar{m}_{\pi^+}^2}{\bar{m}_{K^0}^2 - \bar{m}_{K^+}^2 + \bar{m}_{\pi^+}^2} = \frac{m_s}{m_d} \left[1 + \frac{\delta_M}{2M_0} m_u \left(\frac{m_s}{m_d} - \frac{m_d}{m_s} \right) \right]. \quad (39)$$

Отсюда видно, что при $\delta_M > 0$ (и после учета электромагнитных поправок) имеют место неравенства (8) и (9). Если $\delta_M < 0$, неравенства изменяются на противоположные. Знак δ_M совпадает со знаком выражения, заключенного в фигурные скобки в (37), которое является монотонно возрастающей функцией от переменной M_0 (при $M_0 \geq 0$) и становится строго положительным, начиная с некоторого значения $M_{0\min}$. В точке $M_{0\min}$ параметр δ_M равен нулю.

Если $M_0 = M_{0\min}$, то первая поправка отсутствует. В этом случае выполняются соотношения Вайнберга. При $\Lambda = 1.1$ ГэВ пять параметров: G_S , G_V , m_i можно фиксировать по условию $\delta_M = 0$, феноменологическим значениям масс μ_{π^+} , μ_{K^0} , μ_{K^+} , и константе слабого распада пиона $F = 91,5$ МэВ. В результате находим: $M_0 = M_{0\min} = 244$ МэВ, $G_S = 6.4$ ГэВ⁻², $G_V = 3.6$ ГэВ⁻². Величина кваркового конденсата равна $-\langle \bar{q}q \rangle_0^{1/3} = 267$ МэВ. Для масс легких кварков имеем $m_u = 2.87$ МэВ, $m_d = 5.14$ МэВ и $m_s = 103.7$ МэВ (использовалась теорема Дашена). Параметр, характеризующий относительную величину нарушения изотопической симметрии по сравнению с нарушением $SU(3)_f$ симметрии, в данном случае равен

$$R = \frac{m_s - \hat{m}}{m_d - m_u} = 44.0, \quad \hat{m} = (m_u + m_d)/2. \quad (40)$$

Если первая поправка отлична от нуля, то величина M_0 вырастет. Это приведет к увеличению кваркового конденсата. Отсюда следует, что значения масс легких кварков уменьшатся. Поэтому полученные выше оценки для m_u , m_d и m_s нужно рассматривать как верхнюю границу, возникающую в рассматриваемой модели.

Вернемся к анализу массовых формул (34)–(36) при $\delta_M \neq 0$. Из них можно составить целый ряд комбинаций, в которых будет отсутствовать явная зависимость от δ_M . Таким образом можно анализировать свойства теории, не располагая точной информацией о самой величине δ_M , которая поглощается в физических массах мезонов.

Лойтвиллер рассматривал только одну из возможностей – кривую второго порядка по переменным $x = m_u/m_d$ и $y = m_s/m_d$. К ней мы приходим, если обратимся к следующим отношениям

$$R_1 = \frac{\bar{m}_{K^+}^2}{\bar{m}_{\pi^+}^2} = \frac{m_u + m_s}{m_u + m_d} \left[1 + \frac{m_s - m_d}{2M_0} \delta_M \right], \quad (41)$$

$$\frac{\bar{m}_{K^0}^2 - \bar{m}_{K^+}^2}{\bar{m}_{K^0}^2 - \bar{m}_{\pi^+}^2} = \frac{m_d - m_u}{m_s - m_u} \left[1 + \frac{m_s - m_d}{2M_0} \delta_M \right], \quad (42)$$

из которых следует, что

$$Q^2 \equiv \left(\frac{\bar{m}_{K^+}^2}{\bar{m}_{\pi^+}^2} \right) \frac{\bar{m}_{K^0}^2 - \bar{m}_{\pi^+}^2}{\bar{m}_{K^0}^2 - \bar{m}_{K^+}^2} = \frac{m_s^2 - m_u^2}{m_d^2 - m_u^2}. \quad (43)$$

Правая часть данного выражения зависит только от отношения масс легких кварков x и y . Геометрическим местом точек (x, y) является эллипс

$$y^2 - x^2(1 - Q^2) = Q^2. \quad (44)$$

Если учесть электромагнитные поправки, то в соответствии с теоремой Дашена находим

$$Q^2 \rightarrow Q_D^2 = \frac{(m_{K^0}^2 - m_{\pi^0}^2)(m_{K^+}^2 - m_{\pi^+}^2 + m_{\pi^0}^2)}{m_{\pi^0}^2(m_{K^0}^2 - m_{K^+}^2 + m_{\pi^+}^2 - m_{\pi^0}^2)}, \quad (45)$$

что для физических значений масс дает $Q_D = 24.3$.

Прямой подстановкой в (44) легко убедиться, что точка с координатами $(x, y) = (R_{xD}, R_{yD})$ принадлежит эллипсу с большой полуосью $Q \rightarrow Q_D$. В дальнейшем для краткости будем называть ее точкой Вайнберга. Для нее $\delta_M = 0$ и, следовательно, выполняются соотношения Вайнберга (6) и (7).

Сравнивая эти результаты с аналогичными формулами работы [3], убеждаемся, что используемый там параметр Δ_M в данном конкретном случае имеет вид

$$\Delta_M = \frac{m_s - m_d}{2M_0} \delta_M. \quad (46)$$

Ничто не мешает нам выбрать для исключения зависимости от δ_M другие комбинации, составленные из мезонных масс. Остановимся на двух примерах, которые позволяют установить границы для максимальных отклонений от кривой второго порядка.

Первый пример связан с отношениями R_1 и

$$R_z = \frac{R_y}{R_x} = \frac{\bar{m}_{K^+}^2 + \bar{m}_{K^0}^2 - \bar{m}_{\pi^+}^2}{\bar{m}_{K^+}^2 - \bar{m}_{K^0}^2 + \bar{m}_{\pi^+}^2} = \frac{y}{x} \left[1 + m_d \left(\frac{y}{x} - \frac{x}{y} \right) \frac{\delta_M}{2M_0} \right]. \quad (47)$$

Исключая δ_M , приходим к эллиптической кривой

$$x(y-1)(xR_z - y) = (y-x)(x+1)R_1 + x^2 - y^2, \quad (48)$$

график которой имеет две связанные компоненты, одна из которых проходит через точку Вайнберга и определяет нижнюю границу на рис. 1. Здесь, как и для

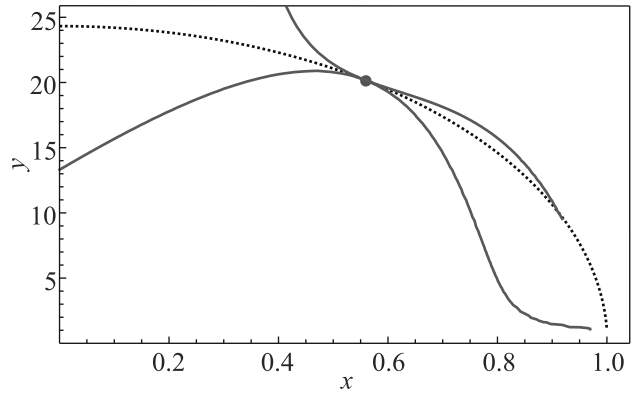


Рис. 1. (Цветной онлайн) Эллипс (44) (пунктирная линия) и кривые (48) (нижняя) и (51) (верхняя), полученные с учетом теоремы Дашена. Обозначена точка Вайнберга, принадлежащая всем трем кривым

пунктирной кривой эллипса, используются физические значения мезонных масс, которые учитывают электромагнитные поправки в соответствии с теоремой Дашена, т.е.,

$$R_1 \rightarrow R_{1D} = 1 + \frac{m_{K^+}^2 - m_{\pi^+}^2}{m_{\pi^0}^2}, \quad (49)$$

$$R_z \rightarrow R_{zD} = \frac{m_{K^+}^2 + m_{K^0}^2 - m_{\pi^+}^2}{2m_{\pi^0}^2 + m_{K^+}^2 - m_{K^0}^2 - m_{\pi^+}^2}. \quad (50)$$

Второй пример связан с выбором отношений R_z и R_x . Он ведет к кривой пятого порядка

$$xy(1-x^2)(xR_z - y) = (y^2 - x^2)(x - R_x). \quad (51)$$

Она имеет три связанные компоненты. На рисунке 1 изображена компонента, проходящая через точку Вайнберга. Она также получена с учетом теоремы Дашена: $R_z \rightarrow R_{zD}$ и $R_x \rightarrow R_{xD}$ и в основном расположена выше эллипса (44). Остальные возможные кривые лежат внутри границ, представленных данными линиями. Общим для них является то, что все они проходят через точку Вайнберга.

Наличие множества кривых, порождаемых массовыми формулами (34)–(36), не влияет на выполнение неравенств Лойтвиллера, но значительно расширяет область значений, принимаемых переменными x и y . Это, в свою очередь, накладывает дополнительные ограничения на результаты, полученные на базе какой-либо отдельно взятой кривой, особенно при достаточно больших отклонениях от точки Вайнберга.

В качестве иллюстрации вычислим отношения (x, y) , исходя из формул (34)–(36) и покажем, что результат не принадлежит эллипсу. Для этого фиксируем параметры так, чтобы $\delta_M \neq 0$: $\Lambda = 1.1 \text{ ГэВ}$, $G_S = 6.6 \text{ ГэВ}^{-2}$, $G_V = 6.8 \text{ ГэВ}^{-2}$. Это ведет к следующим оценкам: $M_0 = 274 \text{ МэВ}$, $\Delta_M = 0.092$, $x = 0.62$, $y = 19.10$. Эта точка лежит под кривой эллипса. Точка эллипса с абсциссой $x = 0.62$ имеет ординату $y = 19.17$. Ввиду малости параметра Δ_M , отклонение невелико, но с его ростом отклонение будет расти. Для полноты картины приведем также полученные здесь значения масс легких кварков, констант слабого распада мезонов, и параметра R : $m_u = 2.8 \text{ МэВ}$, $m_d = 4.5 \text{ МэВ}$, $m_s = 86.1 \text{ МэВ}$, $f_\pi = 93.2 \text{ МэВ}$, $f_{K^+}/f_\pi = 1.21$, $R = 47.6$.

В качестве альтернативной ситуации рассмотрим широко обсуждаемую проблему ненарушения СР-четности в КХД [22]. Этот феномен можно было бы объяснить в теории с безмассовым u -кварком. Что по этому поводу нам говорят формулы (34) и (35)? Из них следует, что при $m_u = 0$ и с учетом теоремы Дашена

$$\Delta_M = \frac{R_{1D}}{y} - 1. \quad (52)$$

Для эллипса $y = Q_D$ находим $\Delta_M = -0.45$. Как было установлено Лойтвиллером, такой результат отвечает слишком большим поправкам и лежит за пределами допустимой нижней границы $\Delta_M > -0.07$, диктуемой расщеплением $\eta - \eta'$ уровней. Это указывает на то, что значение $m_u = 0$ маловероятно.

Если исходить из кривой (48), то формула (52) дает совершенно другую оценку $\Delta_M = 0$, что, казалось бы, не исключает вариант с $m_u = 0$. Однако, условие $\Delta_M = 0$ означает отсутствие первой поправки. В этом случае справедлива формула Вайнберга (6), левая часть которой теперь равна нулю, а правая, как следует из мезонного спектра, равна 0.56. Такое сильное расхождение с экспериментальными данными сдвигает нижнюю границу в область $\Delta_M > 0$. Лойтвиллер пришел к аналогичному неравенству, исходя из тщательного анализа спектра нейтральных состояний π^0, η, η' , который учитывал эффекты, обусловленные нарушениями $U(1)_A$ симмет-

рии и правила Цвейга. Мы видим, что неравенство является прямым следствием формул (34)–(36).

Параметр Δ_M характеризует степень нарушения $SU(3)_f$ симметрии. Его величину невозможно вычислить в рамках $1/N_c$ киральной теории возмущений. Если же привлечь дополнительные (разумные) соображения, то можно получить оценку $0 < \Delta_M \leq 0.13$ [23]. Рассматриваемая здесь модель, как было показано выше, дает величину $\Delta_M = 0.092$, которая принадлежит данному интервалу.

Теорема Дашена справедлива только в лидирующем приближении кирального разложения. Поскольку $\Delta_M \neq 0$, вообще говоря, необходимо принять во внимание возможное отклонение от (5), т.е., считать, что $\tilde{\Delta}_{el}^2 \neq \Delta_{el}^2 = m_{\pi^+}^2 - m_{\pi^0}^2$. В результате массовые формулы (34)–(36) приобретают дополнительную зависимость от параметра $\tilde{\Delta}_{el}$, область изменения которого можно зафиксировать из наблюдаемой ширины распада $\eta \rightarrow \pi^+ \pi^- \pi^0$ [3]. В терминах отношения Q_D , это интервал $Q_D = 22.7 \pm 0.8$, что в пересчете на $\tilde{\Delta}_{el}$ дает $\tilde{\Delta}_{el} = (44.8 \pm 4.5) \text{ МэВ}$. Для сравнения укажем, что $\Delta_{el} = 35.5 \text{ МэВ}$.

Расчеты, учитывающие нарушение теоремы Дашена, показывают, что $\Delta_M = 0.092 \pm 0.002$, отношение $R = 41.6 \pm 2.9$ (см., например, [24], где $R = 41 \pm 4$). При этом

$$\begin{aligned} m_u &= (2.65 \pm 0.07) \text{ МэВ}, \\ m_d &= (4.63 \pm 0.07) \text{ МэВ}, \\ m_s &= (85.94 \pm 0.07) \text{ МэВ}, \\ m_u/m_d &= 0.57 \pm 0.03, \\ m_s/m_d &= 18.55 \pm 0.29. \end{aligned} \quad (53)$$

Для конституентных кварков отсюда следует, что $M_u = 283 \text{ МэВ}$, $M_d = 290 \text{ МэВ}$ и $M_s = 575 \text{ МэВ}$, причем эти величины практически не изменяются при вариации кварковых масс в интервале, определяемом данными по ширине распада $\eta \rightarrow \pi^+ \pi^- \pi^0$.

4. Выводы. В статье представлены первые результаты по изучению механизма нарушения киральной симметрии при низких энергиях на основе модели с четырехкварковыми взаимодействиями. В отличие от многочисленных исследований, посвященных модели НИЛ, здесь предложен альтернативный подход, базирующийся на двух новых идеях. Первая связана с заменой обычного тейлоровского разложения по степеням собственного времени на ряд Вольтерры, успешно применяющийся при анализе нелинейных систем. Этот шаг ведет к эффективному действию, содержащему существенно большее число членов, чем при стандартном рассмотрении модели НИЛ. При этом, число основных пара-

метров модели остается прежним. Второй отличительной чертой подхода является использование гипотезы о $1/N_c$ поведении легких кварковых масс: $m_i \sim \mathcal{O}(1/N_c)$. Данная гипотеза позволяет свести задачу вычисления спектра π и K мезонов к задаче определения масс легких кварков, исходя из экспериментально известных масс псевдоскаляров.

Показано, что рассмотрение первой $1/N_c$ поправки к результату алгебры токов успешно описывает массы $\pi^\pm$, $K^\pm$, K^0 , $\bar{K}^0$ мезонов, значения констант распада f_π , f_K , отношения m_u/m_d , m_s/m_d , а также параметры, характеризующие нарушение изотопической и $SU(3)_f$ симметрий Δ_M и R . Полученные значения для абсолютных величин масс легких кварков и кваркового конденсата, менее успешны. Они полностью согласуются с аналогичными значениями бегущих кварковых масс и конденсата, получаемых в $\overline{MS}$ схеме на масштабе 2 ГэВ (см., например, [25]). Однако наши оценки отвечают энергетической шкале 1 ГэВ. Такое расхождение может служить указанием на необходимость рассмотрения следующей $1/N_c$ -поправки, которая, как известно, включает киральные логарифмы. Этот вопрос требует отдельного исследования.

1. R. Dashen, Phys. Rev. **183**, 1245 (1969).
2. S. Weinberg, *The problem of mass*, in *A Festschrift for I. I. Rabi*, ed. by L. Motz, Trans. New York Acad. Sci., New York Acad. of Sciences, N.Y. (1977), p. 185.
3. H. Leutwyler, Phys. Lett. B **374**, 163 (1996).
4. Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, Phys. Rev. **122**, 345 (1961).
5. Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, Phys. Rev. **124**, 246 (1961).
6. A. A. Osipov, JETP Lett. **113**(6), 413 (2021).
7. A. A. Osipov, Phys. Lett. B **817**, 136300 (2021).
8. A. A. Osipov, Phys. Rev. D **104**(10), 105019 (2021).
9. V. A. Fock, Izv. Akad. Nauk. USSR (Phys.) **4–5**, 551 (1937).
10. V. A. Fock, Phys. Zs. Sowjet. **12**, 404 (1937).
11. J. Schwinger, Phys. Rev. **82**, 664 (1951).
12. M. K. Volkov, Ann. of Phys. **157**, 282 (1984).
13. A. Dhar, R. Shankar, and S. R. Wadia, Phys. Rev. D **31**, 3256 (1985).
14. M. K. Volkov, ЭЧАЯ **17**, 432 (1986).
15. D. Ebert and H. Reinhardt, Nucl. Phys. B **271**, 188 (1986).
16. G. 't Hooft, Nucl. Phys. B **72**, 461 (1974).
17. E. Witten, Nucl. Phys. B **160**, 57 (1979).
18. J. Morais, B. Hiller, and A. A. Osipov, Phys. Lett. B **773**, 277 (2017).
19. G. P. H. Styan, Linear Algebra and its Appl. **6**, 217 (1973).
20. P. Herrera-Siklody, J. I. Latorre, P. Pascual, and J. Taron, Nucl. Phys. B **497**, 345 (1997).
21. V. Bernard, A. A. Osipov, and U.-G. Meißner, Phys. Lett. B **285**, 119 (1992).
22. A. Hook, Proceedings of Science **333** (2019); arXiv:1812.02669, doi:10.22323/1.333.0004.
23. H. Leutwyler, *Light-quark masses*, in *Masses of fundamental particles: Cargèse 1996*, ed. by M. Lévy, J. Iliopoulos, R. Gastmans, and J.-M. Gérard, Plenum Press, N.Y. (1997).
24. R. Urech, Phys. Lett. B **355**, 308 (1995).
25. M. Jamin, J. A. Oller, and A. Pich, Eur. Phys. J. C **24**, 237 (2002).

Исследование взаимодействия атомов калия с поверхностью сапфира с использованием сверхтонкой спектроскопической ячейки

А. Саргсян⁺, Г. Пихлер*, Д. Саркисян⁺¹⁾

⁺ Институт Физических Исследований, НАН Армении, 0203 Аштарак, Армения

*Institute of Physics, Croatian Academy of Sciences and Arts, 10000 Zagreb, Croatia

Поступила в редакцию 7 февраля 2022 г.

После переработки 7 февраля 2022 г.

Принята к публикации 17 февраля 2022 г.

Впервые экспериментально исследовано влияние диэлектрической поверхности на атомы ^{39}K D_1 линии (переходы $F_g = 1, 2 \rightarrow F_e = 1, 2$) при нанометровых расстояниях. Используется наноячейка, заполненная атомарным калием с клиновидным зазором, что позволяет исследовать влияние расстояния атомов в интервале 50–800 нм от поверхности окна, изготовленного из технического сапфира. При расстояниях L от сапфировой поверхности менее 100 нм, вследствие ван-дер-Ваальсова взаимодействия происходит сильное уширение атомных переходов, и их частотные сдвиги происходят в низкочастотную область спектра (красный сдвиг). Применение метода второй производной (SD) спектров поглощения наноячейки позволило впервые измерить коэффициент ван-дер-Ваальсова взаимодействия $C_3 = 1.2 \pm 0.3 \text{ кГц мкм}^3$ для D_1 линии калия. Показано, что при толщине наноячейки $L < 70 \text{ нм}$ с увеличением плотности атомов происходит дополнительный красный сдвиг, обусловленный диполь-дипольным взаимодействием атомов ^{39}K . Полученные результаты важны при разработке миниатюрных субмикронных устройств, содержащих свободные атомы.

DOI: 10.31857/S1234567822060027

1. Введение. В обзорной работе [1] приведены различные устройства, в которых успешно используются спектроскопические ячейки микронной толщины, содержащие пары атомов щелочных металлов. В частности, в субмикронных ячейках уменьшается нежелательное влияние процесса оптической накачки на эффективность оптических процессов [2]. Это объясняется частыми столкновениями атомов с поверхностью ячеек, ведущих к релаксации атомов на нижний исходный уровень, однако, с уменьшением размеров ячейки среднее расстояние между атомами и окнами ячейки также уменьшается. Поэтому важно исследовать влияние близко расположенной диэлектрической поверхности на спектроскопические характеристики атомов. Такие первые исследования были основаны на анализе формы линии селективного отражения (SR) лазерного излучения от границы – внутренней поверхности стеклянного окна ячейки – атомарные пары металла [3–5]. Определяющий вклад в форму линии SR вносят атомы, находящиеся на расстояниях $L \sim \lambda/2\pi$ от окна ячейки, где λ – длина волны резонансного перехода в атоме. Как правило, $L \sim 100 \text{ нм}$, однако, такая, относительно большая

величина L , из-за малости ван-дер-Ваальсова (vdW) взаимодействия атомов с поверхностью окна приводит к малым “красным” сдвигам частоты перехода в несколько МГц, которые трудно точно определить в зашумленном спектре SR. Заметим, что при толщинах $L > \lambda/2\pi$ взаимодействие атома со стенкой описывается взаимодействием Казимира–Полдера [6].

Недавно разработанные оптические наноячейки (НЯ), заполненные парами щелочных металлов, оказались очень удобными для исследования vdW взаимодействия атомов с поверхностью, поскольку в этом случае расстояние L может быть значительно меньшим, вплоть до десятков нанометров. Используя такие процессы, как резонансное поглощение лазерного излучения в парах атомов [7–10], селективное отражение лазерного излучения от НЯ [11, 12], резонансная флуоресценция паров атомов [13, 14] и фарадеево вращение в парах металлов [15], коэффициенты vdW взаимодействия C_3 были измерены для атомов Cs (линии D_1 и D_2), Rb (линии D_1 и D_2).

В работе [16] были использованы пары атомов ^{39}K , содержащиеся в сантиметровой ячейке для реализации поляризационной спектроскопии, а в работе [17] пары атомов ^{39}K использовались для реализации процесса электромагнитно-индуцированной прозрач-

¹⁾e-mail: sarkdav@gmail.com

ности. Коллективный лэмбовский сдвиг наноразмерного слоя атомных паров K , D_2 линии был исследован недавно в [18].

В настоящей работе впервые приведены результаты исследования vdW взаимодействия атомов ^{39}K с диэлектрической поверхностью по его проявлениям в спектроскопии D_1 линии. Была изготовлена специальная высокотемпературная отпаянная НЯ с клиновидным зазором между внутренними поверхностями окон, что позволяет исследовать энергетическую структуру атомов ^{39}K , находящихся на расстояниях от 50 до 100 нм от внутренних поверхностей сапфировых окон НЯ.

Эксперимент. На рисунке 1 приведена схема экспериментальной установки. Для исследования процесса резонансного поглощения в НЯ, заполненной калием использовалось излучение диодного лазера с внешним резонатором (ECDL, выпускается под товарной маркой VitaWave [19]), с длиной волны $\lambda = 770$ нм, ширина линии 1 МГц. Фотография наноячейки, заполненной природным калием (93.3% ^{39}K , и 6.7% ^{41}K), с клиновидным зазором между внутренними поверхностями сапфировых окон приведена на вставке рис. 1. Толщина зазора L (т.е. рас-

стояние между внутренними поверхностями НЯ) определяется температурой (T) отростка. При вертикальном перемещении НЯ лазерное излучение проходит через разную толщину зазора с парами атомов K , следовательно, реализуется изменение расстояния L атомов K до окон НЯ. Толщина зазора определялась по методике, приведенной в [2]. Детали конструкции НЯ приведены в работе [9]. Излучение лазера направлялось перпендикулярно окнам НЯ и измерялось поглощение паров атомов при сканировании частоты лазера вблизи D_1 линии. Диаметр пучка составлял 1 мм, мощность излучения 200 мкВт. Оптические излучения регистрировались фотодиодами ФД-24К, сигналы с которых усиливались и подавались на четырехканальный осциллограф Tektronix TDS2014B. Для формирования частотного репера часть лазерного излучения направлялась на узел 2 для формирования реперного спектра на основе техники насыщенного поглощения (НП) [20] в ячейке заполненной K .

2.1. Зависимость частотных сдвигов переходов от толщины L . Большое доплеровское уширение атомных переходов ^{39}K при $T \sim 180^\circ C$ превышает 900 МГц, поэтому переходы $1, 2 \rightarrow 1', 2'$, показанные на диаграмме на вставке рис. 2 (штрихами обозначены верхние уровни переходов) спектрально не

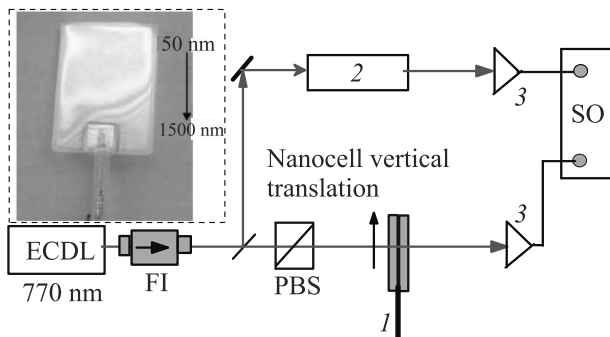


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема экспериментальной установки: ECDL – диодный лазер; FI – фарадеевский изолятор; PBS – поляризационная призма; 1 – НЯ с K (окна изготовлены из технического сапфира, размеры 20×30 мм²; 2 – узел для формирования реперного спектра на основе техники насыщенного поглощения; 3 – фотоприемники; SO – цифровой осциллограф. На вставке приведена фотография НЯ, вертикальная стрелка показывает направление изменения L между внутренними поверхностями окон от 50 до 1500 нм

стояние между внутренними поверхностями НЯ) варьируется в интервале 50–1500 нм (толщина зазора изменяется по вертикали). Наноячейка помещается внутрь двухсекционного нагревателя, который обеспечивает независимый нагрев окон и отростка, в котором находится металлический K . Плотность ато-

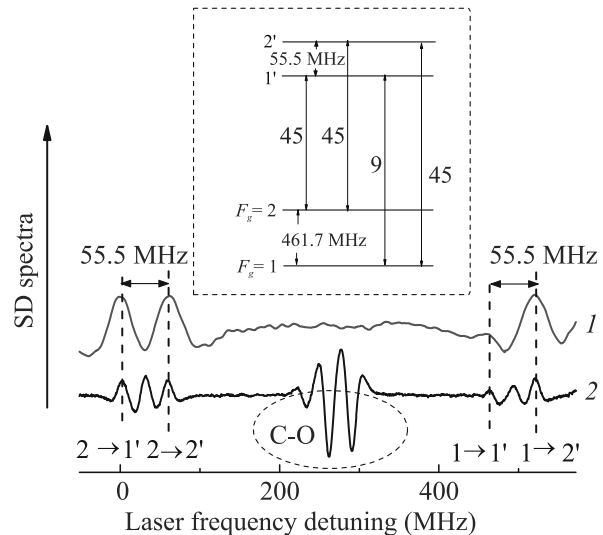


Рис. 2. (Цветной онлайн) НЯ, $L = 770$ нм, кривая 1 – спектр SD поглощения, содержит узкие VSOP резонансы, расположенные на частотах переходов $F_g = 1, 2 \rightarrow 1', 2'$. Кривая 2 – реперный SD спектр НП в ячейке $L = 1$ см с K , содержит также C-O резонансы [20]. Вертикальные пунктирные линии указывают на отсутствие частотного смещения на переходах в спектрах 1 и 2, вставка – диаграмма уровней и переходов ^{39}K линии D_1 . Цифры 45 и 9 – относительные вероятности переходов

разрешаются в спектре поглощения и “размываются” доплеровским уширением в ячейках сантиметровой длины. В работе [10] показано, что, используя НЯ с толщиной $L = \lambda/2 = 385$ нм или с толщиной $L = \lambda$ ($\lambda = 770$ нм – длина волны резонансного излучения с переходами ^{39}K , D_1 линии) в спектре поглощения $A(\nu)$, удастся частично спектрально разрешить атомные переходы ^{39}K . Применение метода второй производной $A''(\nu)$ (SD – second derivative) [10] к спектрам поглощения атомарных паров в наноячейке позволяет спектрально разделить атомные переходы, при этом, правильно передаются, как частотные интервалы между переходами, так и относительные вероятности показанные на диаграмме на вставке рис. 2. В работах [21, 22] SD спектры применялись для исследования необычных магнито-индуцированных атомных переходов.

Поскольку для определения частотного сдвига необходимо проводить сравнение частотного положения атомного перехода в НЯ при толщинах $L < 100$ нм с реперной частотой, необходимо предварительно проверить, что приемники не приносят частотного сдвига. На рисунке 2 кривая 1 показывает SD спектра, формируемого при $L = 770$ нм, температура $T = 140$ °C. В этом случае в спектре формируются субдоплеровские оптические резонансы, селективные по атомным скоростям (в англоязычной литературе называются VSOP резонансы [10]), которые расположены на частотах переходов $F_g = 1, 2 \rightarrow 1', 2'$. Кривая 2 показывает SD спектр насыщенного поглощения (НП) [20] в калиевой ячейке длиной 1 см. Сравнение кривых 1 и 2 показывает, что частотные положения атомных переходов, отмеченные вертикальными пунктирами, совпадают. Это означает, что толщина $L = 770$ нм достаточно большая и влияние взаимодействия атомов К с поверхностью не проявляется.

На рисунке 3а кривая 1 показывает спектр поглощения $A(\nu)$ НЯ при толщине $L = 55 \pm 5$ нм для переходов $1, 2 \rightarrow 1', 2'$. Вследствие влияния vdW взаимодействия на атомные переходы ^{39}K последние сильно уширены (дополнительно к доплеровскому уширению и столкновительному уширению атомов с окнами НЯ [12]) и практически не разрешены. Кривая 2 – SD спектра поглощения $A''(\nu)$; здесь и далее спектр SD для удобства инвертирован. Для измерения “красных” частотных сдвигов переходов $1, 2 \rightarrow 1', 2'$ на нижней кривой рис. 3а приведен частотный репер (Refer.), который является спектром SD насыщенного поглощения. Для измерения “красных” частотных сдвигов переходов $1, 2 \rightarrow 1', 2'$, на кривой SD необходимо найти новые частотные положения этих

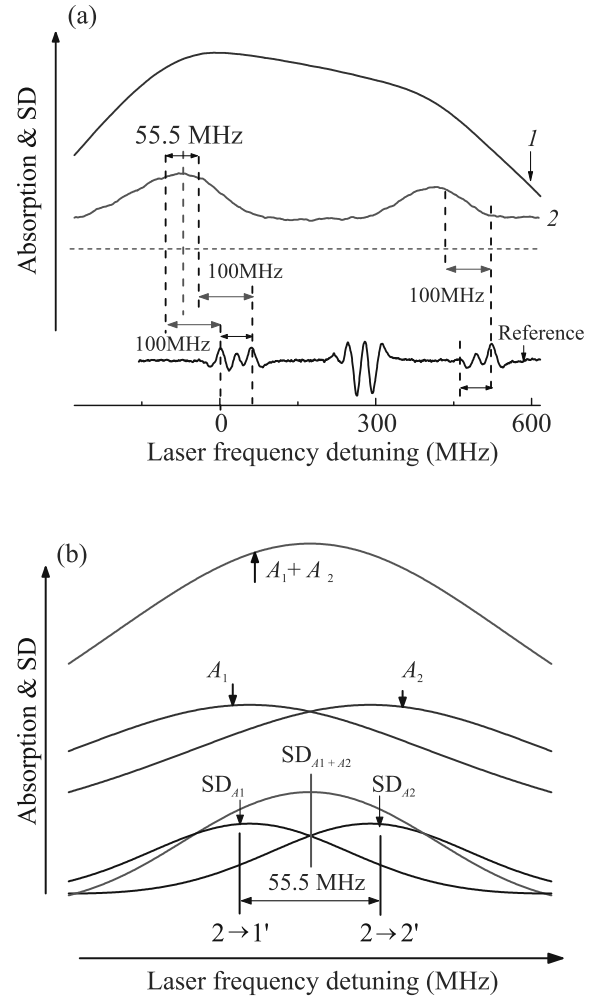


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Кривая 1 – спектр поглощения НЯ, $L = 55 \pm 5$ нм, переходы $1, 2 \rightarrow 1', 2'$; кривая 2 – спектр SD, вертикальные пунктирные линии на частотном расстоянии ≈ 28 МГц от средней вертикальной пунктирной линии показывают смещенные положения переходов $2 \rightarrow 1', 2'$; красное смещение частоты переходов относительно их начальных положений $\Delta\nu_{vdW} \sim -100$ МГц, кривая Reference – SD спектра НП в ячейке $L = 1$ см с парами К; (б) – выбран лоренцев контур линий поглощения A_1 и A_2 для переходов $2 \rightarrow 1', 2'$, имеющих равную вероятность и частотный интервал 55.5 МГц, что значительно меньше спектральных линий ширины поглощения A_1 и A_2 . Вертикальная линия между переходами указывает на положение максимума суммарной огибающей $SD_{A_1+A_2}$, переходы $2 \rightarrow 1', 2'$ находятся на частотном расстоянии ≈ 28 МГц от вертикали

переходов. На рисунке 3б приведено пояснение, как это осуществлено: в качестве примера выбран лоренцев контур линий поглощения A_1 и A_2 для каждого из двух переходов $2 \rightarrow 1', 2'$; вероятности переходов равны друг другу, а частотный интервал меж-

ду ними 55.5 МГц, который значительно меньше, чем спектральные ширины линий поглощения A_1 и A_2 . Кривые SD_{A_1} и SD_{A_2} – вторые производные контуров линии поглощения A_1 и A_2 . Нетрудно видеть, что вертикальная линия между переходами указывает на положение максимума суммарной огибающей $SD_{A_1+A_2}$, а каждый переход находится на частотном расстоянии $55.5 \text{ МГц}/2 \simeq 28 \text{ МГц}$ от вертикали (в работе [12] показано, что интервалы между переходами сверхтонкой структуры атома в результате эффекта vdW сохраняются). Следовательно, проведя красную вертикальную пунктирную линию (на левой огибающей) в спектре SD на рис. 3а, и отложив вертикальные пунктирные линии на частотном расстоянии 28 МГц от средней вертикальной пунктирной линии, будем иметь смещенные положения переходов $2 \rightarrow 1', 2'$ в результате влияния эффекта vdW (для переходов $1 \rightarrow 1', 2'$ эта процедура не проводилась, так как вероятности переходов сильно отличаются). На рисунке 3а показаны частотные сдвиги переходов $2 \rightarrow 1', 2'$; в результате влияния эффекта vdW имеет место красное смещение частоты переходов относительно их начальных положений, которое составляет $\Delta\nu_{vdW} \sim -100 \text{ МГц}$. Как видно, профиль спектра SD уширен асимметрично преимущественно в низкочастотную область, что также является проявлением vdW взаимодействия атома с окнами НЯ [12]. Рисунок 5 в работе [23] наглядно поясняет физический механизм vdW: атом схематически изображен в виде диполя, и показано индуцированное им зеркальное отображение в диэлектрическом окне НЯ. Следовательно, атомы находятся в электрическом поле индуцированных диполей и испытывают постоянный штарковский сдвиг, который вызывает красный частотный сдвиг. В той же работе показано, что спектральная плотность в спектрах поглощения (т.е. положение пика в спектре) всегда максимальна для атомов, находящихся вокруг центра наноячейки $z = L/2$ (z – расстояние атома от стенки). Из формулы (4) в работе [23] следует, что для центра наноячейки, $z = L/2$, полный красный частотный сдвиг (обусловленный влиянием обоих окон НЯ) составляет $\Delta\nu_{vdW} = -16C_3/L^3$ (1), где коэффициент C_3 определяет vdW взаимодействие атома ^{39}K с поверхностью (в данном случае с сапфировым окном НЯ), $T = 180^\circ\text{C}$ (плотность атомов $N_K = 6 \times 10^{13} \text{ см}^{-3}$). В этом случае величина $N_K/k^3 \simeq 0.1 \ll 1$ (где k – волновое число), что означает, что диполь-дипольное взаимодействие атомов ^{39}K не приводит к дополнительному частотному смещению [18]. Это важно для правильного определения величины $\Delta\nu_{vdW}$ и, следовательно, коэффициента C_3 . На рисунке 4 приведе-

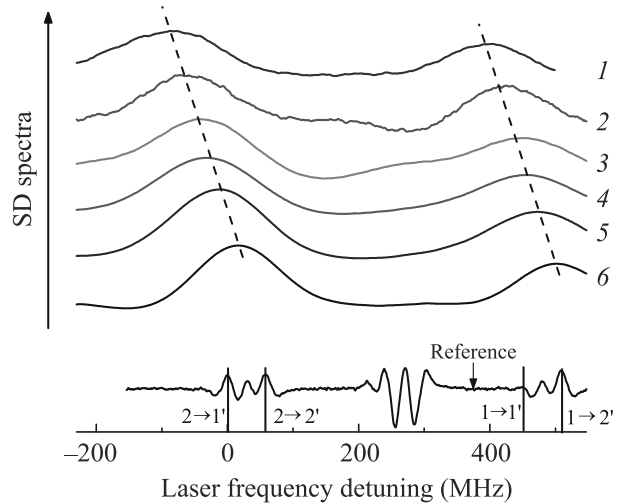


Рис. 4. (Цветной онлайн) SD спектры поглощения при изменении толщины L , кривые 1–6: 55 ± 5 , 60 ± 5 , 67 ± 5 , 72 ± 5 , 82 ± 5 , 260 ± 5 нм, соответственно, видно частотное красное смещение с уменьшением L ; нижняя кривая Reference – SD спектра НП калиевой ячейки, $L = 1$ см. Пунктирная линия проведена для наглядности

ны SD спектры поглощения, при изменении толщины L наноячейки от 55 ± 5 нм (кривая 1) до 260 ± 5 нм (кривая 6), кривые 1–6: 55 ± 5 , 60 ± 5 , 67 ± 5 , 72 ± 5 , 82 ± 5 , 260 ± 5 нм, соответственно, $T = 180^\circ\text{C}$. Отчетливо видно частотное красное смещение с уменьшением толщины L . Для каждой толщины L красный частотный сдвиг $\Delta\nu_{vdW}$ определялся по методике, приведенной на рис. 3. Погрешность в определении толщины L [2] составляла ± 5 нм, что приводит к погрешности определения величины коэффициента $C_3 = 1.2 \pm 0.3 \text{ кГц мкм}^3$, приведенного на рис. 5. Заметим, что на сегодняшний день нет более доступных методов экспериментального определения величины C_3 . Величина C_3 для атомов ^{39}K , D_2 линии, измеренная в работе [23], составляет $C_3 = 1.9 \pm 0.3 \text{ кГц мкм}^3$, что примерно в 2 раза больше, как это предсказывалось в работе [3] для различия величин C_3 для D_1 и D_2 линий.

2.2. Зависимость частотных сдвигов переходов от плотности паров атомов. В работах [18, 24] отмечается, что НЯ ведет себя как низкодобротный эталон Фабри–Перо по следующей причине. Внутренние поверхности сапфировых окон НЯ (с отражением по 8%) можно считать параллельными друг другу, поскольку максимальное расстояние между внутренними поверхностями в нижней части НЯ составляет 2–3 мкм (см. вставку на рис. 1), в то время как размер окна по высоте 30 мм, следовательно угол между внутренними поверхностями ~ 0.1 мрад.

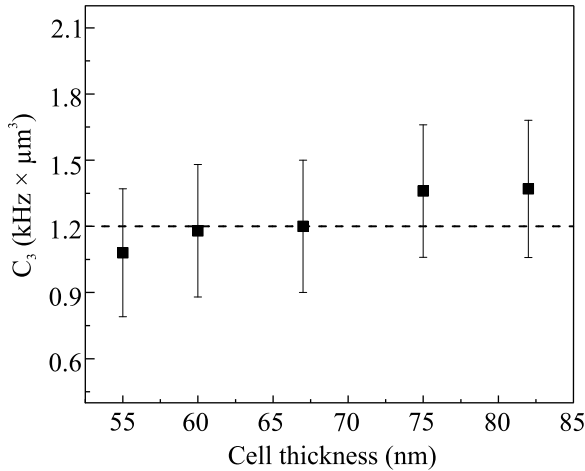


Рис. 5. Величина vdW коэффициента $C_3 = 1.2 \pm \pm 0.3 \text{ кГц} \mu\text{м}^3$ взаимодействия атома ^{39}K D_1 линии в зависимости от L . Погрешность в определении толщины L составляла $\pm 5 \text{ нм}$, что приводит к погрешности определения величины коэффициента C_3 . Пунктирная линия проведена для наглядности

Выражение (1) в работе [18] определяет частотный сдвиг атомного перехода в наночейке в зависимости от безразмерного параметра L/λ , из которого следует, что при $L/\lambda \ll 1$ остается красный, так называемый частотный “Лоренц–Лоренц” сдвиг, $\Delta\nu_{LL} = -\pi N/k^3\Gamma$ (2), обусловленный диполь-дипольным взаимодействием атомов, где Γ – радиационная ширина соответствующего атомного перехода, и в случае ^{39}K , D_1 линии $\Gamma/2\pi = 6 \text{ МГц}$. Как показано в работах [2, 18], для атомов Cs, Rb и K (D_2 линии) при толщинах наночейки $L < 80 \text{ нм}$ с увеличением плотности N атомов, когда начинает выполняться соотношение $N/k^3 \geq 1$, регистрируется красный частотный сдвиг $\Delta\nu_{LL}$. В этом случае суммарный красный частотный сдвиг состоит из двух слагаемых: $\Delta\nu_{vdW} + \Delta\nu_{LL}$. На рисунке 6а приведены SD спектры поглощения при увеличении T отрезка наночейки с 183°C – кривая 4 до 257°C – кривая 1 (при увеличении температуры происходит увеличение плотности атомов ^{39}K). На рисунке 6б приведена зависимость суммарного красного частотного сдвига, который состоит из двух слагаемых: $\Delta\nu_{vdW} + \Delta\nu_{LL}$ для толщины наночейки $L = 65 \pm 5 \text{ нм}$ ($\Delta\nu_{vdW} = -70 \text{ МГц}$). Величина $\Delta\nu_{vdW}$ фиксирована, поскольку определяется толщиной $L = 65 \pm 5 \text{ нм}$ при $N/k^3 \ll 1$. Заметим, что выражение (2) для $\Delta\nu_{LL}$ удовлетворительно описывает экспериментальные результаты на рис. 6 с погрешностью 7%.

Заключение. Впервые исследовано влияние взаимодействия атомов ^{39}K с окнами НЯ, изготовлен-

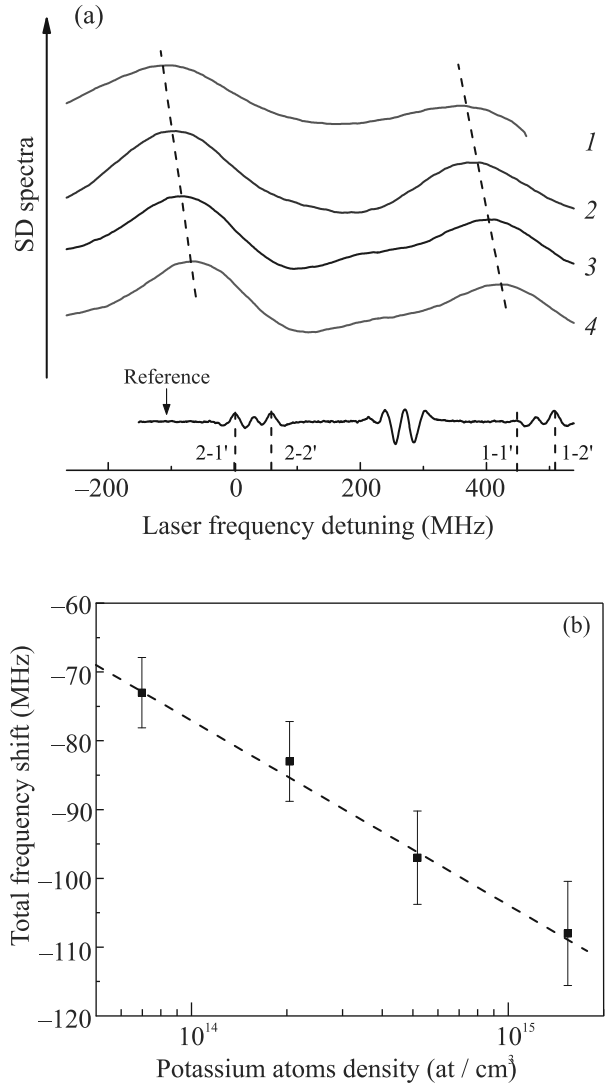


Рис. 6. (Цветной онлайн) (а) – SD спектры поглощения при увеличении T отрезка НЯ, $L = 65 \pm 5 \text{ нм}$, снизу вверх, 4–1: 183°C , 207°C , 230°C и 257°C , соответственно; при увеличении T происходит увеличение плотности N_K ; нижняя кривая Reference – SD спектра НП калиевой ячейки, $L = 1 \text{ см}$; (б) – зависимость суммарного красного частотного сдвига $\Delta\nu_{vdW} + \Delta\nu_{LL}$, для НЯ $L = 65 \pm 5 \text{ нм}$ ($\Delta\nu_{vdW} = -70 \text{ МГц}$) от плотности паров атомов ^{39}K

ных из технического сапфира на частотное положение атомных переходов D_1 линии при нанометровых расстояниях между атомами и поверхностью сапфира. Была изготовлена высокотемпературная НЯ с клиновидным зазором, что позволило исследовать зависимость сдвигов сверхтонких переходов $2 \rightarrow 1', 2'$ от расстояния L между атомами и поверхностью сапфира в интервале от 50 до 800 нм. При L менее 100 нм вследствие ван-дер-Ваальсового взаимодействия происходит сильное уширение атом-

ных переходов и сдвиг их частот в низкочастотную область спектра (красный сдвиг). Применение метода SD поглощения паров в наноячейке позволило измерить величину частотных красных сдвигов и определить величину коэффициента vdW взаимодействия $C_3 = 1.2 \pm 0.3 \text{ кГц мкм}^3$. Полученные результаты необходимо учитывать при разработке миниатюрных субмикронных устройств, содержащих свободные атомы: размеры разрабатываемых миниатюрных частотных маркеров [1], которые содержат пары атомов металла, не должны иметь размеры менее 0.3 мкм, поскольку при меньших размерах будет иметь место сдвиг частоты атомных переходов. В работе продемонстрировано, что при толщине наноячейки $L < 70 \text{ нм}$ с увеличением плотности атомов ^{39}K , когда выполняется условие $N/k^3 \geq 1$, регистрируется, дополнительный к частотному сдвигу $\Delta\nu_{vdW}$, красный частотный сдвиг $\Delta\nu_{LL}$, обусловленный диполь-дипольным взаимодействием атомов ^{39}K . Для регистрации сдвига $\Delta\nu_{LL}$ необходимо нагревать НЯ выше 200–230 °С. Заметим, что интерес к использованию НЯ в спектроскопии растет, однако, недавно разработанные стеклянные НЯ [25, 26] не могут быть использованы при необходимых высоких температурах, так как при $T > 170\text{--}180^\circ\text{C}$ происходит сильное взаимодействие горячих паров К со стеклом, приводящим к его почернению; взаимодействие паров К с сапфиром отсутствует вплоть до $T \sim 500^\circ\text{C}$.

Высокая поляризуемость высоколежащих уровней делает их более чувствительными к взаимодействию атом-поверхность, поэтому представляется перспективным использовать НЯ с ^{39}K для исследования переходов 4S-5P и 4S-6P при наличии узкополосных лазеров с $\lambda = 404$ и 345 нм соответственно; меньшая вероятность переходов по сравнению с рассмотренным переходом 4S-4P может быть скомпенсирована более высокой температурой НЯ. Так в работе [27], используя НЯ, заполненной Rb, и переход 5S-6P ($\lambda = 420 \text{ нм}$), красный частотный сдвиг $\Delta\nu_{LL} > 200 \text{ МГц}$ был зарегистрирован для относительно большого расстояния $L \sim 200 \text{ нм}$ атома от поверхности.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по науке Министерства образования, науки, культуры и спорта Республики Армения в рамках научного проекта N21T-1C005.

Авторы благодарят Ара Тонояна за техническое содействие.

2. J. Keaveney, *Collective Atom Light Interactions in Dense Atomic Vapours*, Springer, Cham, Heidelberg, N.Y., Dordrecht, London (2014).
3. M. Chevrollier, M. Fichet, M. Oria, G. Rahmat, D. Bloch, and M. Ducloy, *J. Phys. II (France)* **2**, 631 (1992).
4. H. Failache, S. Saltiel, M. Fichet, D. Bloch, and M. Ducloy, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 5467 (1999).
5. D. Bloch and M. Ducloy, *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* **50**, 91 (2005).
6. A. Laliotis, T. Passerat de Silans, I. Maurin, M. Ducloy, and D. Bloch, *Nat. Commun.* **5**, 4364 (2014).
7. T. Peyrot, N. Šibalić, Y. R. P. Sortais, A. Browaeys, A. Sargsyan, D. Sarkisyan, I. G. Hughes, and C. S. Adams, *Phys. Rev. A* **100**, 022503 (2019).
8. A. V. Ermolaev and T. A. Vartanyan, *Phys. Rev. A* **105**, 013518 (2022).
9. J. Keaveney, A. Sargsyan, U. Krohn, I. G. Hughes, D. Sarkisyan, and C. S. Adams, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 173601 (2012).
10. A. Sargsyan, A. Amiryan, Y. Pashayan-Leroy, C. Leroy, A. Papoyan, and D. Sarkisyan, *Opt. Lett.* **44**, 5533 (2019).
11. M. Fichet, G. Dutier, A. Yarovitsky, P. Todorov, I. Hamdi, I. Maurin, S. Saltiel, D. Sarkisyan, M. P. Gorza, D. Bloch, and M. Ducloy, *Europhys. Lett.* **77**, 54001 (2007).
12. A. Sargsyan, A. Papoyan, I. G. Hughes, Ch. S. Adams, and D. Sarkisyan, *Opt. Lett.* **42**, 1476 (2017).
13. K. A. Whittaker, J. Keaveney, I. G. Hughes, A. Sargsyan, D. Sarkisyan, and C. S. Adams, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 253201 (2014).
14. K. A. Whittaker, J. Keaveney, I. G. Hughes, A. Sargsyan, D. Sarkisyan, and C. S. Adams, *Phys. Rev. A* **92**, 052706 (2015).
15. А. Саргсян, Е. Папаян-Леруа, К. Леруа, Ю. Малакян, Д. Саркисян, *Письма в ЖЭТФ* **102**, 549 (2015).
16. K. Pahwa, L. Mudarikwa, and J. Goldwin, *Opt. Express* **20**, 17456 (2012).
17. A. Lampis, R. Culver, B. Megyeri, and J. Goldwin, *Opt. Express* **24**, 15494 (2016).
18. T. Peyrot, Y. R. P. Sortais, A. Browaeys, A. Sargsyan, D. Sarkisyan, J. Keaveney, I. G. Hughes, and C. S. Adams, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 243401 (2018).
19. V. V. Vassiliev, A. S. Zibrov, and V. L. Velichansky, *Rev. Sci. Instrum.* **77**, 013102 (2006).
20. D. Bloch, M. Ducloy, N. Senkov, V. Velichansky, and V. Yudin, *Las. Phys.* **6**, 670 (1996).
21. A. Sargsyan, E. Klinger, A. Amiryan, A. Tonoyan, D. Sarkisyan, *Phys. Lett. A* **390**, 127114 (2021).
22. А. Саргсян, А. Тоноян, Д. Саркисян, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 629 (2021).
23. A. Sargsyan, E. Klinger, C. Leroy, I. G. Hughes, D. Sarkisyan, and C. S. Adams, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **52**, 195001 (2019).

- 24. G. Dutier, S. Saltiel, D. Bloch, and M. Ducloy, J. Opt. Soc. Am. B **20**, 793 (2003).
- 25. T. Peyrot, Ch. Beurthe, S. Coumar, M. Roullia, K. Perronet, P. Bonnay, C. S. Adams, A. Browaeys, and Y. R. P. Sortais, Opt. Lett. **44**, 1940 (2019).
- 26. T. F. Cutler, W. J. Hamlyn, J. Renger, K. A. Whittaker, D. Pizzey, I. G. Hughes, V. Sandoghdar, and C. S. Adams, Phys. Rev. Appl. **14**, 034054 (2020).
- 27. T. Varzhapetyan, A. Nersisyan, V. Babushkin, D. Sarkisyan, S. Vdović, and G. Pichler, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **41**, 185004 (2008).

Многорезонаторная квантовая память с одиночными атомами

С. А. Моисеев^{+*1)}, Н. С. Перминов^{+*1)}, А. М. Желтиков^{+×◦1)}

⁺Казанский квантовый центр,

Казанский национальный исследовательский технический университет им. А. Н. Туполева – КАИ, 420111 Казань, Россия

^{*}Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского ФИЦ, Казанский научный центр РАН, 420029 Казань, Россия

[×]Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 119992 Москва, Россия

[◦]Institute for Quantum Science and Engineering, Department of Physics and Astronomy,
Texas A&M University, College Station TX 77843, USA

Поступила в редакцию 13 февраля 2022 г.

После переработки 25 февраля 2022 г.

Принята к публикации 26 февраля 2022 г.

В работе предложена квантовая память на системе резонаторов, содержащих по одному атому, при этом каждый резонатор связан с внешним волноводом через общий резонатор. Используя обратимые свойства динамики изучаемой системы наряду с методами оптимизации, найдены параметры резонаторов и взаимодействующих с ними атомов, при которых возможен эффективный перенос сигнального однофотонного волнового пакета из внешнего волновода на атомные состояния для длительного сохранения квантового состояния фотона. Обсуждаются преимущества рассматриваемой квантовой памяти и экспериментальные возможности ее реализации.

DOI: 10.31857/S1234567822060039

Введение. Создание квантовой памяти (КП) вызывает растущий интерес в связи с важностью ее применения в решении широкого круга задач квантового процессинга и коммуникаций, включая создание универсального квантового компьютера и квантового репитера [1–3]. Практически значимая долгоживущая КП должна удовлетворять ряду требований и есть основания считать, что такая память будет создана, используя уже существующие квантовые носители информации, например, редкоземельные ионы в неорганических кристаллах, где достигнуто рекордное время жизни спиновой когерентности, центры окраски в алмазе, способные работать при комнатной температуре, а также квантовые точки и стенки, хорошо интегрируемые в оптические волноводы и резонаторы [1, 4]. Вместе с тем, создание КП требует значительного улучшения способов ее реализации, например тех, которые основаны на использовании методов управления медленным светом и фотонным/спиновым эхо [5]. Один из наиболее перспективных подходов к созданию схем КП, интегрируемых во внешние устройства, предполагает применение высокодобротных резонаторов [6, 7] и систем резонаторов [8, 9], позволяющих зна-

чительно усилить взаимодействие атомов с фотонами. Недавно было показано, что система высокодобротных резонаторов, обладающая заданной периодической структурой резонансных частот, аналогичной атомным частотным решеткам [10–12], открывает возможности для работы с широкополосными сигналами, как это было продемонстрировано в экспериментах на системе микроволновых резонаторов [8, 13]. Более того, было показано [8, 14, 15], что использование даже нескольких (4-х и более) резонаторов в ячейке КП может обеспечить близкую к 100 % эффективность и высокую точность в работе с широкополосными сигнальными импульсами произвольной временной формы. Однако для существенного увеличения времени жизни в резонаторную КП необходимо интегрировать долгоживущие носители квантовой информации, например, атомные ансамбли [16], обладающие большим временем жизни когерентности электрон-ядерных спиновых переходов, способным достигать секунд, минут и даже часов [4].

В этой работе мы предлагаем многорезонаторную схему КП, где в каждом из резонаторов содержится по одному резонансному атому. Резонатор с атомом рассматривается перспективной элементарной ячейкой в реализации когерентного контроля квантовым состоянием атома и активно используется при разработке однорезонаторной КП [6, 17]. Вместе с тем, как

¹⁾e-mail: s.a.moiseev@kazanqc.org; nperminov@kazanqc.org; zheltikov@physics.msu.ru

мы показываем в настоящей работе, использование системы согласованных по параметрам резонаторов, содержащих по одному атому, позволяет существенно расширить рабочий спектральный диапазон КП, увеличить ее эффективность и перейти к сохранению квантовых состояний однофотонных волновых пакетов произвольной временной формы без использования точной синхронизации во времени внешнего управляющего лазерного поля с волновым пакетом сигнального фотона, что типично для КП на резонаторе с одним атомом [17].

Теоретическая модель. Рассматриваемая нами схема КП представлена на рис. 1. КП содержит общий резонатор, соединенный с внешним волноводом и с системой из восьми высокодобротных минирезонаторов, содержащих по одному атому.

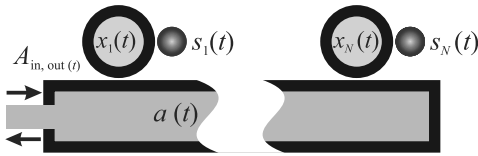


Рис. 1. (Цветной онлайн) Принципиальная схема многорезонаторной КП с одиночными атомами

Учитывая большое время жизни атомной когерентности γ_s^{-1} и большую добротность резонаторов, мы пренебрегаем затуханием в описании динамики изучаемой КП на временах, полагая $t \ll \gamma_s^{-1}, 2Q/\omega_n, 2Q/\omega_0$ (Q – собственная добротность резонаторов, ω_n – частоты минирезонаторов ($n = 1, \dots, N$), ω_0 – частота общего резонатора) и, используя частотные единицы, задаем Гамильтониан в виде:

$$H = \omega_0 a^\dagger a + \int d\omega \omega [a_{1,\omega}^\dagger a_{1,\omega} + a_{2,\omega}^\dagger a_{2,\omega}] + \sum_{n=1,N} \omega_n b_n^\dagger b_n + \sum_{n=1,N} \omega_n S_{z,n} + V, \quad (1)$$

где взаимодействие выбирается в приближении вращающейся волны

$$V = \sum_{n=1,N} f_n S_{+,n} b_n + g \sum_{n=1,N} a^\dagger b_n + g_{cw} \int d\omega [a_{1,\omega}^\dagger + a_{2,\omega}^\dagger] a + \text{h.c.}, \quad (2)$$

здесь f_n – константа связи n -го атома с модой n -го минирезонатора, g и g_{cw} – константы связи общего резонатора с модами минирезонатора и внешнего волновода, $a^\dagger$, a и $b_n^\dagger$, b_n – бозевские операторы рождения и уничтожения моды общего резонатора и моды n -го резонатора, $a_{m,\omega}^\dagger$, $a_{m,\omega}$ – операторы

рождения и уничтожения ω -й моды волновода (индекс $m = 1, 2$ соответствует падающей, отраженной волне), $S_{z,n}$, $S_{+,n}$, $S_{-,n}$ – спиновые операторы двух-уровневого атома.

Ниже мы изучаем сохранение и восстановление однофотонного волнового пакета, начальное квантовое состояние которого задаем в виде $|\psi\rangle = \int d\omega f_0(\omega - \omega_0) e^{-i\omega t} a_{1,\omega}^\dagger |0\rangle$, удовлетворяющего нормировке $\int d\omega |f_0(\omega - \omega_0)|^2 = 1$ (здесь $|0\rangle$ – основное состояние мод волновода, резонаторов и атомов). Такое состояние отвечает прилету фотона к ячейке квантовой памяти в момент времени $t = 0$. С учетом Гамильтониана системы получим следующее выражение для волновой функции:

$$|\psi(t)\rangle = a_c(t) a^\dagger + \sum_{n=1,N} x_n(t) b_n^\dagger + \sum_{n=1,N} s_n(t) S_n^\dagger + \int d\omega [c_{1,\omega}(t) a_{1,\omega}^\dagger + c_{2,\omega}(t) a_{2,\omega}^\dagger] |0\rangle, \quad (3)$$

где $a_c(t)$ и $x_n(t)$ – амплитуды возбуждения мод основного резонатора и n -го минирезонатора, $s_n(t)$ и $c_{m,\omega}(t)$ – амплитуды вероятности возбуждения n -го атома и ω -й моды волновода.

Отметим, что волновая функция (3) справедлива для любого числа атомов и описывает распределение кванта возбуждения по различным степеням свободы изучаемой системы с сохранением полной вероятности ($|a_c(t)|^2 + \sum_{n=1,N} \{|x_n(t)|^2 + |s_n(t)|^2\} + \int d\omega [|c_{1,\omega}(t)|^2 + |c_{2,\omega}(t)|^2] = 1$) и не является приближенным решением для Гамильтониана (1)–(2). Переходя к медленным переменным и используя стандартный подход квантовой оптики [18], получаем систему линейных уравнений для амплитуд:

$$[\partial_t + i\Delta_n] s_n(t) + i f_n x_n(t) = 0, \quad (4)$$

$$[\partial_t + i\Delta_n] x_n(t) + i f_n s_n(t) + i g a_c(t) = 0, \quad (5)$$

$$[\partial_t + k/2] a_c(t) + i g \sum_{n=1,N} x_n(t) = \sqrt{k} A_{in}(t), \quad (6)$$

где $k = 2\pi |g_{cw}|^2$ – постоянная затухания моды общего резонатора, входное поле в волноводе определено как $A_{in}(t) = \frac{-i}{\sqrt{2\pi}} \int d\omega f_0(\omega - \omega_0) e^{-i(\omega - \omega_0)t}$ и связано соотношением $A_{in}(t) + A_{out}(t) = \sqrt{k} a_c(t)$ с амплитудой возбуждения моды основного резонатора $a_c(t)$ и с выходным полем $A_{out}(t)$ [14, 18].

Ранее было показано [8, 14], что в системе связанных резонаторов в отсутствии атомов возможен высокоэффективный перенос широкополосного волнового пакета фотона в моды минирезонаторов при

соблюдении условия согласования импедансов $k = 2\pi g^2/\Delta$, соответствующей практически реализуемой величине параметра кооперативности $C = g^2/(k\Delta) = 1/2\pi$. Появление излучения в минирезонаторах, в свою очередь, будет приводить к возбуждению атомов, и задача построения эффективной КП сводится к поиску параметров рассматриваемой системы, при которых возможен полный перенос состояния сигнального фотона в атомы. В этом случае для стадии полной загрузки фотона в атомы будет иметь место условие $a_c(t) = A_{in}(t)/\sqrt{k}$, благодаря чему, вводя новую переменную $x_n(t) = ix_n(t)$, получим уравнения движения:

$$[\partial_t + i\Delta_n]s_n(t) + f_n x_n(t) = 0, \quad (7)$$

$$[\partial_t + i\Delta_n]x_n(t) - f_n s_n(t) - g a_c(t) = 0, \quad (8)$$

$$\partial_t a_c(t) + g \sum_{n=1, N} x_n(t) = \frac{1}{2} k a_c(t). \quad (9)$$

Для стадии выгрузки фотона будет иметь место $A_{in}(t) = 0$ и система уравнений, описывающая излучение сигнала эха примет вид:

$$[\partial_t + i\Delta_n]s_n(t) + f_n x_n(t) = 0, \quad (10)$$

$$[\partial_t + i\Delta_n]x_n(t) - f_n s_n(t) - g a_{echo}(t) = 0, \quad (11)$$

$$\partial_t a_{echo}(t) + g \sum_{n=1, N} x_n(t) = -\frac{1}{2} k a_{echo}(t), \quad (12)$$

где мы полагаем, что выгрузка фотона начинается в момент времени $t = t_0$, при котором не равными нулю являются лишь атомные амплитуды $s_n(t_0)$.

Прежде чем оптимизировать параметры изучаемой системы, отметим, что амплитуды возбуждения атомов и резонаторных мод удовлетворяют условиям: $s_{n'}(t) = s_n^*(t)$, $x_{n'}(t) = x_n^*(t)$ при $\Delta_{n'} = -\Delta_n$ и $\Im\{a_c(t)\} = 0$. Совершая обращение времени $t \rightarrow -t'$ в ур. (10)–(12) и замену переменной $x_n(t') = -y_n(t')$, мы получаем для амплитуд $s_n^*(t)$, $y_n^*(t')$, $a_{echo}^*(t')$ систему уравнений, которая при равенстве постоянных $f_{n'} = f_n$ полностью совпадает с ур. (7)–(9) для переменных $s_n(t)$, $x_n(t)$, $a_c(t)$, описывающих динамику взаимодействия сигнального фотонного волнового пакета с системой резонаторов и атомов. Налагая дополнительные условия на атомные амплитуды $s_{n'}(t_0) = s_n^*(t_0) = s_n(t_0)$ при отсутствии возбуждения в резонаторах $x_n^*(t_0) = 0$ в начальный момент времени стадии выгрузки фотона $t = t_0$, получаем, аналогично обращенным во времени схемам КП на фотонном эхе [19], что излучение сигнала эха будет обращенной во времени копией процесса поглощения

сигнального светового импульса. Ниже мы оптимизируем параметры и частотные характеристики изучаемой системы резонаторов с атомами, при которых возможна квантовая динамика, обеспечивающая эффективную работу КП.

Оптимизация параметров квантовой памяти. Мы провели моделирование системы из $N = 8$ минирезонаторов с атомами, изображенной на рис. 1, полагая, что резонансные частоты атомов и минирезонаторов равны и образуют симметричную гребенку $\Delta_n = [-7/2, -5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2, 7/2]$, где частотный интервал между ближайшими частотами одинаков и принят равным единице ($\Delta = 1$). Равенства частоты моды минирезонатора с резонансной частотой атома можно достичь, реализуя рамановский переход при нерезонансном взаимодействии сигнального излучения трехуровневым атомом в Λ -схеме квантовых переходов в присутствии дополнительного контролирующего лазерного поля. Совпадение частот атома и резонатора обеспечивается выбором частоты $\omega_{c,n}$ контролирующего лазерного поля [19], действующего на смежном переходе и удовлетворяющего условию рамановского резонанса вместе с сигнальным излучением $\omega_n - \omega_{c,n} = \omega_{21}$, обеспечивающего резонансный переход атома между двумя нижними долгоживущими уровнями атомами (ω_{21} – частота перехода между двумя нижними уровнями атомами).

Оптимизацию параметров проводим, используя выражение для передаточной функции $S(\omega) = A_{out}(\omega)/A_{in}(\omega)$, связывающей спектральные компоненты входного и переизлучаемого полей, получаемого из решения системы уравнений (3)–(5):

$$S(\omega) = \frac{(k - \gamma_0)/2 + i\omega + i \sum_{n=1}^N \frac{g_n^2}{B_n(\omega)}}{(k - \gamma_0)/2 - i\omega - i \sum_{n=1}^N \frac{g_n^2}{B_n(\omega)}}, \quad (13)$$

где $B_n(\omega) = \Delta_n - \omega - i\gamma_n - \frac{f_n^2}{\Delta_n - \omega - i\gamma_s}$, и для общности введены постоянные распада γ_s атомной когерентности, моды общего резонатора – γ_0 и n -го минирезонатора – γ_n .

Процесс оптимизации включал две стадии аналогично работе [14] и основывался на поиске сглаженной временной задержки $\tau(\omega) = -i \text{Arg}([S(\omega)])/\omega$ в излучении сигнала эха. На первой стадии была выполнена оптимизация системы в случае отсутствия атомов ($f_n = 0$), где система минирезонаторов работает в режиме фиксированной временной задержки [8]. При найденных параметрах g_{op} , k_{op} (здесь $k_{op} \approx 2\pi \frac{g_{op}^2}{\Delta}$), на второй стадии мы нашли оптимальное значение f_{op} , равное для всех минирезонаторов

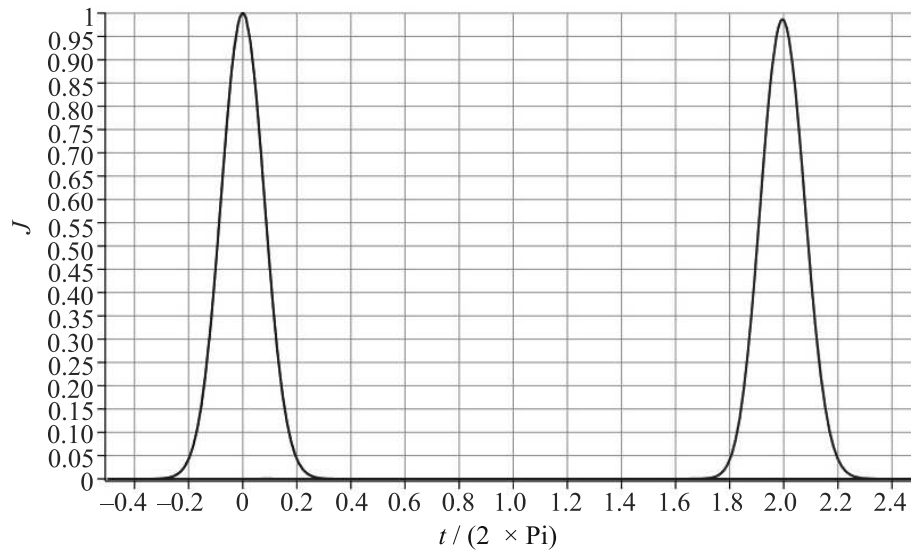


Рис. 2. (Цветной онлайн) Поведение во времени входного волнового пакета фотона (синяя линия) и излучаемого сигнала эха – волнового пакета фотона (красная линия); при численных расчетах постоянные распада γ_n принимались равными менее 10^{-2}

$f_n = f_{op}$ и, соответственно, получаем все величины параметров:

$$g_{op} = 1.4266; \quad k_{op} = 12.7781; \quad f_{op} = 0.2499. \quad (14)$$

Небольшое отклонение относительной временной задержки $\tau(\omega)/\tau(0)$ для передаточной функции $S(\omega) = A_{out}(\omega)/A_{in}(\omega)$ в пределах 3 % в рабочем диапазоне частот КП $\omega = [-2; 2]$ отвечает высокой точности и эффективности КП.

Восстановление фотона в эхо сигнале и стадия выгрузки. На рисунке 2 представлены результаты численного расчета поведения сигнального волнового пакета фотона, имеющего временную моду гауссовой формы $f(\omega) = \exp(-\omega^2/(4\sigma^2))$ с полушириной $\sigma = 1$ и переизлучаемого фотонного волнового пакета – сигнала эха в выходном волноводе. Как видно из рис. 2, сигнал эха имеет вид симметричного импульса с максимумом в момент времени $t \approx 4\pi/\Delta$ примерно той же гауссовой формы. В этом импульсе излучается практически вся запасенная в атомах энергия (эффективность излучения составила около 98 %). Отметим, что внесение атомов увеличило время задержки τ_{ra} почти в 2 раза, а точнее $\tau_{ra} = 1.9992 \cdot 2\pi/\Delta \approx 2\tau_r$, при том, что в отсутствии атомов время задержки было $\tau_r = 1.00015 \cdot 2\pi/\Delta$. Это также означает, что помещение атомов в резонаторы почти в два раза уменьшило частотный интервал между ближайшими частотами гребенки резонансных линий общей системы атомы + резонаторы. Вспоминая, что используемые уравнения справедливы при достаточно слабом влиянии декогеренции, по-

лучим условие на постоянные распада: $\gamma_{eff} \ll 1/\tau_r \approx 0.01$.

Имея в виду обратимость двух систем уравнений (4)–(6) и (10)–(12), можно ожидать, что в присутствии атомов возможен полный переход фотонного волнового пакета в систему атомов вблизи промежуточного момента времени $t = \tau_{ra}(0)/2$. Ниже мы исследовали этот вопрос, выбирая в качестве начальных условий наличие одноатомного возбуждения в системе атомов и изучая возможность эффективного излучения атомами фотона в волновод в виде волнового пакета в той же временной моде. Наличие эффективного излучения такого волнового пакета фотона будет означать высокую вероятность перехода квантового состояния сигнального фотона на атомные состояния в момент времени $\tau_{ra}(0)/2 \approx \tau_r(0)$.

Расчеты динамики выгрузки фотонного волнового пакета выполнены, когда в начальный момент времени $t_0 = 0$ атомные амплитуды задавались в виде симметричного по спектральной отстройке распределения $s_n(0) = [1, 3, 6, 8, 8, 6, 3, 1]/N_m$ (N_m – нормирующий множитель) в отсутствии возбуждения мод минирезонаторов и общего резонатора. На рисунке 3 представлены результаты расчетов временного поведения вероятности возбуждения атомов, мод резонаторов, волновода, а также плотность вероятности найти фотон на выходе общего резонатора ($J(t) = |A_{out}(t)|^2 / \sum_{n=1, \dots, N} |s_n(0)|^2$). Вычисления подтвердили высокую вероятность излучения симметричного волнового пакета фотона, соответствующего сигналу эха на рис. 2, рассчитанного, начиная

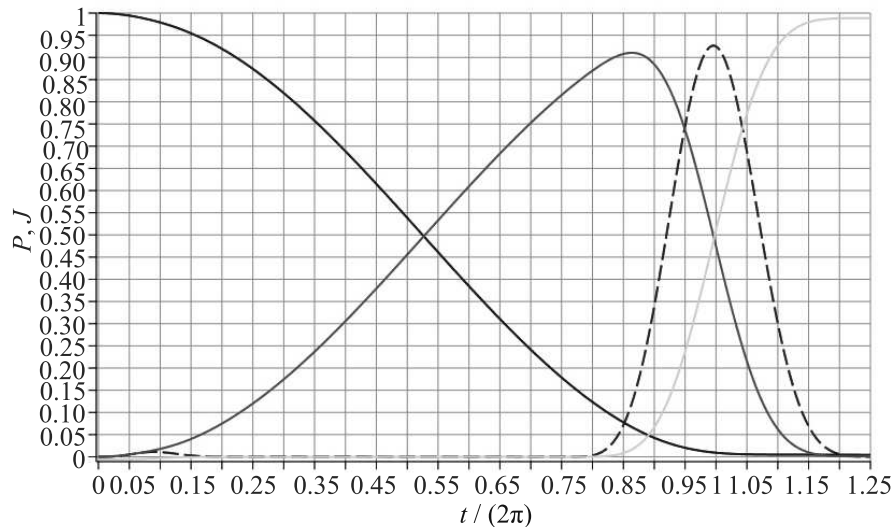


Рис. 3. (Цветной онлайн) Вероятность возбуждения $P(t)$ от времени выгрузки фотона: во всех атомах (синяя линия), резонаторах (зеленая линия), внешнем волновод (золотая линия), а также плотность вероятности появления фотона в сигнале эха $J(t) = |A_{\text{out}}(t)|^2 / \sum_{n=1, \dots, N} |s_n(0)|^2$ на выходе общего резонатора (красная пунктирная линия)

со стадии загрузки фотона в атомы. Как и следовало ожидать, период излучения фотона соответствует половине периода полного цикла работы КП от момента попадания фотонного волнового пакета до его полного переизлучения в волновод. Таким образом, проведенные независимые расчеты подтверждают наличие периодической структуры линий с периодом $\Delta/2$. Надо отметить, что физическая природа данной структуры линий отличается от существующих периодических частотных гребенок, реализуемых в схемах КП на системе атомов [12], электронных спинов [19] и системе резонаторов [8] тем, что она возникает в системе взаимодействующих резонаторов и атомов и носит, соответственно, гибридный характер. Более того, атомные и резонаторные моды по-разному участвуют в работе КП в процессе каскадного переноса фотона через моды резонаторов на атомы в определенный момент времени, при этом моды минирезонаторов оказываются в вакуумном состоянии.

Как видно из рис. 3, излучение выгружается из атомов достаточно плавно и в начале выгрузки (вблизи $t = 0$ на рис. 3) есть некоторый интервал времени δt (около $1/20$ полного периода), когда почти все имеющееся в атомах возбуждение можно перевести на их долгоживущие уровни, используя действие контролирующих лазерных импульсов. Без наличия такой области долговременное сохранение фотона было бы невозможным. Отметим, что появление доступного интервала времени δt является уникальным для работы с гауссовыми сигнальными импуль-

сами, что обусловлено наличием частотной гребенки линий в системе атомов и резонаторов, что реализуется не для всех конфигураций взаимодействия атомов с резонаторами и не для всех параметров изучаемой системы.

Обсуждение и перспективы. В работе предложена схема многорезонаторной КП с одиночными атомами, позволяющая переносить квантовые состояния широкополосных фотонных волновых пакетов на атомные состояния для длительного хранения квантовой информации. Оптимизация параметров показала возможность получения высокой эффективности такой КП, которая может быть увеличена близко к 100 % за счет внесения изменений в исходные частоты минирезонаторов, даже при использовании небольшого числа минирезонаторов [14]. Существенным преимуществом рассматриваемой КП является возможность работы с произвольной временной формой волнового пакета фотона, что упрощает работу по сравнению с КП на атоме в одном резонаторе, где требуется сильная временная синхронизация временной моды сигнального и управляющего полей. Следует отметить, что в целом схема работы КП имеет каскадный фрактальный характер, когда фотон при своем движении к атомам, поступая в ячейку памяти, сначала попадает в общий резонатор, далее его спектральные компоненты расходятся по траекториям в различные резонаторы, и лишь затем моды резонаторов передают возбуждение на свои атомы. Распределенное по нескольким атомам квантовое состояние сигнального фотона мо-

жет сохраняться долгое время при большом времени жизни спиновой квантовой когерентности атомов и затем восстанавливаться по требованию, следуя обращенной во времени динамике. Отметим, что число резонаторов может отличаться от восьми, но оно при этом должно быть не менее 4-х, чтобы оставалась возможность сохранения сигнального импульса с гауссовым профилем временной моды [14]. В таком случае восемь резонаторов позволяют сохранять уже две временные гауссовы моды на каждой четверке резонаторов. Кроме того, наши расчеты показывают, что в отличие от четырех резонаторов [14], в схеме с восемью резонаторами не происходит существенного сдвига исходных частот резонаторов, что облегчает расчеты и создание данной схемы.

Описанную схему КП представляется возможным применить к атомам и центрам окраски в алмазе, используя рамановскую схему атомных квантовых переходов на спиновые уровни, обладающие большим временем когерентности при комнатной температуре [20] при значительном усилении эффекта Парселла и взаимодействия фотона с бесфононными оптическими переходами центров в минирезонаторах высокой добротности. Разработка нанофотонных резонаторов недавно позволила значительно увеличить постоянную связи резонансных атомов с модой таких резонаторов [21], что открывает большие возможности в реализации с единичными атомами.

В качестве резонансных атомов могут использоваться трехуровневые квантовые точки [22], где могут быть достигнуты большие значения постоянной взаимодействия квантовых точек с модой резонатора [23] в высокодобротных микро- и нанофотонных резонаторах, создаваемых на полупроводниковых колонках с помощью формирования Брэгговских решеток из слоев AlGa и GaAs. Такие микрорезонаторы могут эффективно интегрироваться в общие схемы и внешние устройства [24]. Ультравысокая постоянная связи квантовых точек с модой минирезонатора позволяет достигать больших значений параметра кооперативности $C = g^2/k\gamma$ – меры когерентного взаимодействия точки с фотоном в резонаторе, например, $C = 150$ в работе [25], где $\gamma/(2\pi) = 0.28$ ГГц – постоянная распада оптической когерентности, $g/\gamma = 14$, $g/k = 5.3$. Такие значения параметров квантовой точки и резонатора отвечают требованиям к реализации предлагаемой нами квантовой памяти, основанной на нерезонансном рамановском взаимодействии фотона с квантовой точкой. А именно, для атома в резонаторе в нашем случае параметр кооперативности $C = f^2/(g\gamma_{\text{eff}}) \approx 4.5$ (при $\gamma_{\text{eff}} \approx 10^{-2}$), что значительно меньше достижимых значений $C = 150$

для квантовых точек [25]. Соответственно, использование квантовой точки позволит обеспечить необходимую силу когерентного взаимодействия путем выбора оптимальной амплитуды контролирующего лазерного излучения в нерезонансном взаимодействии [19]. Более того, стоит отметить, что квантовые точки могут обладать долгоживущей электронной спиновой когерентностью с постоянной распада $\gamma_s \ll \gamma$, что существенно облегчит условия реализации квантовой памяти при использовании нерезонансных рамановских переходов. В последних работах [26] отмечается возможность дальнейшего значительного увеличения времени жизни спиновой когерентности в квантовых точках, учитывая особенности спиновых взаимодействий, влияние внешнего магнитного поля, выбирая оптимальные геометрические размеры квантовой точки.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Правительства Российской Федерации, проект # 14.Z50.31.0040, 17 февраля 2017 г. (построение и анализ модели и полученных результатов – Н. С. Перминов, С. А. Моисеев, А. М. Желтиков), а также поддержана в рамках бюджетной темы лаборатории Квантовой оптики и информатики КФТИ – ФИЦ КазНЦ РАН (методы оптимизации – Н. С. Перминов, С. А. Моисеев).

1. G. Moody, V.J. Sorger, D.J. Blumenthal et al. (Collaboration), J. Phys. Photonics **4**, 012501 (2022).
2. G. Kurizki, P. Bertet, Y. Kubo, D. Petrosyan, P. Rabl, and J. Schmiedmayer, Proceedings of the National Academy of Sciences **112**, 3866 (2015).
3. F. Arute, K. Arya, R. Babbush et al. (Collaboration), Nature **574**, 505 (2019).
4. M. Zhong, M.P. Hedges, R.L. Ahlefeldt, J.G. Bartholomew, S.E. Beavan, S.M. Wittig, J.J. Longdell, and M.J. Sellars, Nature **517**, 177 (2015).
5. W. Tittel, M. Afzelius, T. Chaneliere, R.L. Cone, S. Kröll, S. A. Moiseev, and M. Sellars, Laser Photonics Rev. **4**, 244 (2010).
6. A. Reiserer and G. Rempe, Rev. Mod. Phys. **87**, 1379 (2015).
7. E. Flurin, N. Roch, J. D. Pillet, F. Mallet, and B. Huard, Phys. Rev. Lett. **114**, 090503 (2015).
8. S. A. Moiseev, K. I. Gerasimov, R. R. Latypov, N. S. Perminov, K. V. Petrovnin, and O. N. Sherstyukov, Sci. Rep. **8**, 1 (2018).
9. E. S. Moiseev and S. A. Moiseev, Laser Phys. Lett. **14**, 015202 (2017).
10. Б. Я. Дубетский, В. П. Чеботаев, Письма в ЖЭТФ **41**, 267 (1985).

11. H. De Riedmatten, M. Afzelius, M. U. Staudt, C. Simon, and N. Gisin, *Nature* **456**, 773 (2008).
12. Y. Ma, Y. Z. Ma, Z. Q. Zhou, C. F. Li, and G. C. Guo, *Nat. Commun.* **12**, 1 (2021).
13. Z. Bao, Z. Wang, Y. Wu et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **127**, 010503 (2021).
14. N. S. Perminov and S. A. Moiseev, *Sci. Rep.* **9**, 1568 (2019).
15. С. А. Моисеев, Н. С. Перминов, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 602 (2020).
16. N. S. Perminov, D. Yu. Tarankova, and S. A. Moiseev, *Laser Phys. Lett.* **15**, 125203 (2018).
17. K. T. Kaczmarek, P. M. Ledingham, B. Brecht, S. E. Thomas, G. S. Thekkadath, O. Lazo-Arjona, J. H. D. Munns, E. Poem, A. Feizpour, D. J. Saunders, J. Nunn, and I. A. Walmsley, *Phys. Rev. A* **97**, 042316 (2018).
18. D. F. Walls and G. J. Milburn, *Quantum Optics*, Springer, Heidelberg (1994).
19. E. S. Moiseev, A. Tashchilina, S. A. Moiseev, and B. C. Sanders, *New J. Phys.* **23**, 063071 (2021).
20. S. A. Zargaleh, S. Hameau, B. Eble, F. Margaillan, H. J. von Bardeleben, J. L. Cantin, and W. Gao, *Phys. Rev. B* **98**, 165203 (2018).
21. T. Zhong, J. M. Kindem, J. G. Bartholomew, J. R. Craiciu, E. Miyazono, M. Bettinelli, E. Cavalli, V. Verma, S. W. Nam, F. Marsili, M. D. Shaw, A. D. Beyer, and A. Faraon, *Science* **357**, 1392 (2017).
22. K. De Greve, D. Press, P. L. McMahon, and Y. Yamamoto, *Rep. Prog. Phys.* **76**, 092501 (2013).
23. N. Somaschi, V. Giesz, L. De Santis et al. (Collaboration), *Nature Photon.* **10**, 340 (2016).
24. S. Hepp, S. Bauer, F. Hornung, M. Schwartz, S. L. Portalupi, M. Jetter, and P. Michler, *Opt. Express* **26**, 30614 (2018).
25. D. Najer, I. Söllner, P. Sekatski, V. Dolique, M. C. Löbl, D. Riedel, R. Schott, S. Starosielec, S. R. Valentin, A. D. Wieck, N. Sangouard, A. Ludwig, and R. J. Warburton, *Nature* **575**, 622 (2019).
26. G. Gillard, I. M. Griffiths, G. Ragunathan, A. Ulhaq, C. McEwan, E. Clarke, and E. A. Chekhovich, *npj Quantum Inf.* **7**, 43 (2021).

Исследование геодезических акустических и альвеновских колебаний в тороидальных термоядерных установках (Миниобзор)

А. В. Мельников⁺⁺¹⁾, В. А. Вершков⁺, С. А. Грашин⁺, М. А. Драбинский⁺, Л. Г. Елисеев⁺, И. А. Земцов⁺,
В. А. Крупин⁺, В. П. Лахин⁺, С. Е. Лысенко⁺, А. Р. Немец⁺, М. Р. Нургалиев^{++*}, Н. К. Харчев^{+°},
Ф. О. Хабанов⁺, Д. А. Шелухин⁺

⁺Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

^{*}Научно-исследовательский ядерный университет МИФИ, 115409 Москва, Россия

[×]Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия

[°]Институт общей физики им. А. Н. Прохорова РАН, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 4 февраля 2022 г.

После переработки 4 февраля 2022 г.

Принята к публикации 8 февраля 2022 г.

Изучались геодезические акустические моды (GAM), альвеновские собственные моды (Alfvén Eigenmodes – AE), стационарная и осциллирующая компонента электрического поля и их взаимосвязи с удержанием плазмы. Проверялись теоретические концепции взаимодействия GAM с другими типами плазменной турбулентности. Также рассмотрены сопутствующие вопросы: влияние методов нагрева на удержание и турбулентность плазмы, свойства примесей и пристеночного слоя плазмы. Описаны ключевые диагностики: зондирование пучком тяжелых ионов (HIBP), корреляционная рефлектометрия (CR) и многоцелевой комплекс оптических диагностик. Основные эксперименты проведены на токамаке T-10, имеющем мощную систему электронно-циклотронного нагрева (ECRH). Поддерживающие эксперименты были проведены на стеллараторе TJ-II в Испании, токамаке COMPASS в Чехии и токамаке STOR-M в Канаде. Результаты экспериментов сопоставлены с аналитическими и численными расчетами.

DOI: 10.31857/S1234567822060040

Введение. Взаимосвязи между удержанием плазмы, турбулентностью и электрическим полем в замкнутых магнитных термоядерных установках – токамаках и стеллараторах активно изучаются мировым термоядерным сообществом. Гирокинетические расчеты предсказывают существование сложных нелинейных связей между зональными потоками (их высокочастотной ветвью – GAM), электрическим полем, турбулентностью, вращением плазмы, переходами между режимами удержания и эффектами самоорганизации профилей макроскопических параметров плазмы. Экспериментальная проверка этих предсказаний чрезвычайно важна для понимания механизмов удержания плазмы.

Альвеновские собственные моды (AE), возбуждаемые быстрыми частицами, представляют опасность для будущего реактора, например, ITER, так как они могут формировать мощный дополнительный канал потерь термоядерных альфа-частиц на стен-

ку реактора. С другой стороны, теория предсказывает, что AE могут также играть стабилизирующую роль за счет возбуждения зональных течений, приводящих к стабилизации турбулентности [1]. В действующих термоядерных установках AE возбуждаются за счет быстрых (надтепловых) ионов, возникающих при нагреве инжекцией нейтрального пучка (NBI), или быстрых электронов, возникающих при электронно-циклотронном нагреве (ECRH). AE существуют как в виде мод с квазипостоянной частотой, так и в виде последовательности всплесков с быстропеременной частотой – чирпированных мод. Дисперсионное соотношение для AE, учитывающее эффекты давления, указывает на взаимосвязь между AE и GAM: частота GAM является нижним пределом для частот AE [2, 3], что определяет единство исследования широкого спектра плазменных колебаний в диапазоне 10–500 кГц [4].

К главной задаче проекта – исследованию свойств GAM и альвеновских мод в их взаимосвязи со свойствами турбулентности и переноса частиц и энергии

¹⁾e-mail: melnikov_AV@nrcki.ru

Таблица 1. Параметры экспериментальных установок

Название, страна	R , м	a , м	B_t , Тл	I_p , кА	n_e , 10^{19} м^{-3}	$T_e(0)$, кэВ	$T_i(0)$, кэВ	E_{HIBP} , кэВ	Нагрев, мощность, МВт
Т-10 РФ	1.5	0.3	2.1–2.5	300	1–4	1–3	0.7	300 (Ti^+)	ОН/ЕС 0.3/2.0
ТJ-II Испания	1.5	0.22	1.0	< 8	0.3–6	1	0.12	130 (Cs^+)	ЕС/NBI 0.6/1.0
COMPASS Чехия	0.56	0.22	2.1	400	2–8	< 0.8	< 0.6	–	ОН/NBI 0.2/0.6
STOR-M Канада	0.46	0.12	0.65	20	3.2	< 0.2	–	–	ОН 0.1

в термоядерной плазме, естественно примыкают исследования влияния методов нагрева на удержание и турбулентность, свойств пристеночной плазмы и примесей, взаимодействия плазмы со стенкой и лимитерами из различных материалов с покрытиями, планируемыми для использования в ITER.

Основные эксперименты проведены на Т-10, крупнейшем в России действующем токамаке, работавшем с 1975 по 2018 г. Т-10 оснащен уникальным гиротронным комплексом для нагрева и генерации тока на второй гармонике электронно-циклотронного резонанса (ECRH/ECCD), а также уникальным комплексом диагностик для исследования электрических полей и турбулентности плазмы. Вспомогательные эксперименты по исследованию АЕ и GAM проводились на установках, оснащенных NBI нагревом: на стеллараторе ТJ-II (Испания) и токамаке COMPASS (Чехия), GAM были также исследованы на омическом токамаке STOR-M (Канада).

Условия экспериментов. Т-10 – круглый токамак с лимитером, большой радиус $R = 1.5$ м, малый радиус $a = 0.3$ м, тороидальное поле $B_t = 1.7–2.4$ Тл, ток плазмы $I_p \leq 300$ кА, длительность разряда ≤ 1 с, среднехордовая плотность $\bar{n}_e \leq 5 \times 10^{19} \text{ м}^{-3}$, центральная электронная температура в омическом разряде $T_e(0) \leq 1.2$ кэВ. Мощность дополнительного нагрева (ECRH) на второй гармонике $P_{EC} \leq 2$ МВт.

COMPASS имеет ITERo-подобную конфигурацию плазмы в масштабе 1:10, инжекционный нагрев мощностью $P_{NBI} \leq 0.7$ МВт, энергия пучка $E_{NB} = 40$ кэВ.

STOR-M – небольшой токамак, ориентированный на исследования турбулентности.

ТJ-II – четырехпериодный стелларатор с низким магнитным широм, его вращательное преобразование $\iota = 1/q$ меняется от $\iota(0) = 1.55$ до $\iota(a) = 1.65$. Водородная плазма создается и нагревается гиротро-

нами мощностью $P_{EC} \leq 0.6$ МВт или инжекцией атомов водорода $P_{NBI} \leq 1$ МВт, $E_{NBI} = 32$ кэВ, со скоростью $V_{NBI} \sim 2.5 \times 10^6$ м/с субальвеновского диапазона $V_{NBI} \geq V_A/3$, где V_A – альвеновская скорость:

$$V_A = \frac{B_t}{\sqrt{\mu_0 \sum_i n_i m_i}}, \quad (1)$$

где n_i и m_i – плотность и масса ионов. Параметры установок, на которых проводились исследования, приведены в табл. 1.

Развитие диагностик. Для детальных исследований свойств GAM и турбулентности был развит и модернизирован диагностический комплекс токамака Т-10, рис. 1, 2.

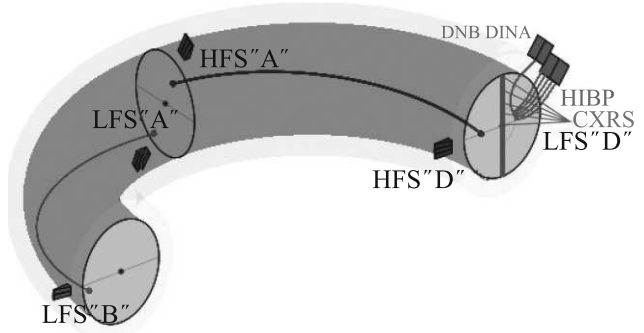


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема эксперимента и размещение корреляционной рефлектометрии (CR), тяжелого пучка (HIBP) и CXRS-диагностики; А, В, D – диагностические сечения Т-10. Красной и синей линией показано распространение флуктуаций вдоль магнитных силовых линий, соединяющих точки наблюдения CR на HFS – стороне сильного поля и LFS – стороне слабого поля [6]

Корреляционная рефлектометрия (CR) [5] была оснащена антенной системой с набором рупоров, установленных на различных полоидальных углах в



Рис. 2. (Цветной онлайн) ИВР диагностика на Т-10, сечение D. 1 – ускоритель; 2 – первичный ионопровод; 3 – вторичный ионопровод; 4 – анализатор; 5 – траектория первичного пучка ($T1^+$); 6 – траектория вторичного пучка ($T1^{++}$); 7 – измерительный объем (SV) [7]

трех сечениях по тору, что позволило найти полоидальную зависимость радиальной корреляционной длины различных типов флуктуаций. Дальние корреляции вдоль силовых линий измерялись рефлектометрами в двух поперечных сечениях, сдвинутых на $1/4$ тора. Рефлектометры имели одинаковую частоту зондирования обыкновенной волной, что обеспечивало отражение от одной и той же магнитной поверхности. Измерения CR проводились на стороне слабого (LFS) и сильного поля (HFS), включая контрольные опыты с переворотом направления тороидального поля и тока разряда, рис. 1.

Зондирование пучком тяжелых ионов, или Heavy Ion Beam Probe (HIBP) [7, 8], после модернизации [9–15] позволило одновременно измерить флуктуации потенциала и плотности плазмы с частотой до 250 кГц в пяти точках измерений (Sample Volume, SV) с помощью 5-щелевого анализатора энергии в горячей зоне плазмы ($0.08 < r < 0.3$ м) [16]. Для исследования полоидальных корреляций и вращения

турбулентности была использована информация из полоидально сдвинутых (от 5 до 25 мм) точек измерений [17]. ИВР расположен в диагностическом сечении D, его точки измерений находятся на стороне слабого поля. Здесь же были расположены и рупора корреляционного рефлектометра (CR), зондирующего плазму со стороны сильного поля.

Комплекс спектроскопических диагностик. Для измерений профилей ионной температуры $T_i(r)$ и плотности $n_z(r)$ ядер легких примесей Li, C, N, O использовалась перезарядочно-рекомбинационная спектроскопия (CXRS) на основе инжектора нейтрального пучка водорода DINA-6 с энергией атомов 30 кэВ, имеющая 9 пространственных каналов [18–20]. Эффективный заряд плазмы $Z_{\text{eff}}(r)$ определялся по профилям тормозного излучения в видимой области спектра [21–23].

Профили электронной плотности $n_e(r)$ измерялись 16-канальным интерферометром; электронной температуры $T_e(r)$ – 24-канальной диагностикой электронно-циклотронного излучения (ECE) плазмы, абсолютные значения центральной электронной температуры $T_e(0)$ – по спектру мягкого рентгеновского излучения (SXR), излучение плазмы – болометрами и AXUV-детекторами, параметры пристеночной плазмы – с помощью зондов Ленгмюра [24]. Разработанные диагностики послужили прототипами для диагностического комплекса установки Т-15МД [25].

Исследования GAM и турбулентности.

Свойства и структура турбулентности. Теоретический анализ показывает, что турбулентность замагниченной плазмы имеет сложную радиальную и частотную структуру [26], требующую детальных измерений в широком частотном диапазоне. На Т-10 наблюдалось шесть типов колебаний, различающихся частотной и пространственной структурой: GAM, МГД тиринг-моды, стохастические низкочастотные (Stochastic Low-Frequency, SLF), низкочастотные квазикогерентные (Low-Frequency Quasi-Coherent, LFQC) (рис. 3), а также широкополосные (Broad-Band, BB), и высокочастотные квазикогерентные (High-Frequency Quasi-Coherent, HFQC) моды [27]. Измеренные величины k и ρ_i (k – волновой вектор, ρ_i – ларморовский радиус ионов) и радиальные положения для LFQC и HFQC мод соответствуют теоретическим оценкам для неустойчивостей на градиенте ионной температуры (ITG) и на запертых электронах (TEM) [28]. Моды SLF и LFQC являются одиночными всплесками с полоидальными длинами волн λ , сравнимыми с длинами корреляции λ_{cor} ($\lambda_{\text{cor SLF}} \sim 4$ см, $\lambda_{\text{cor LFQC}} \sim 5$ см, $\lambda_{\text{SLF}} < 20$ см,

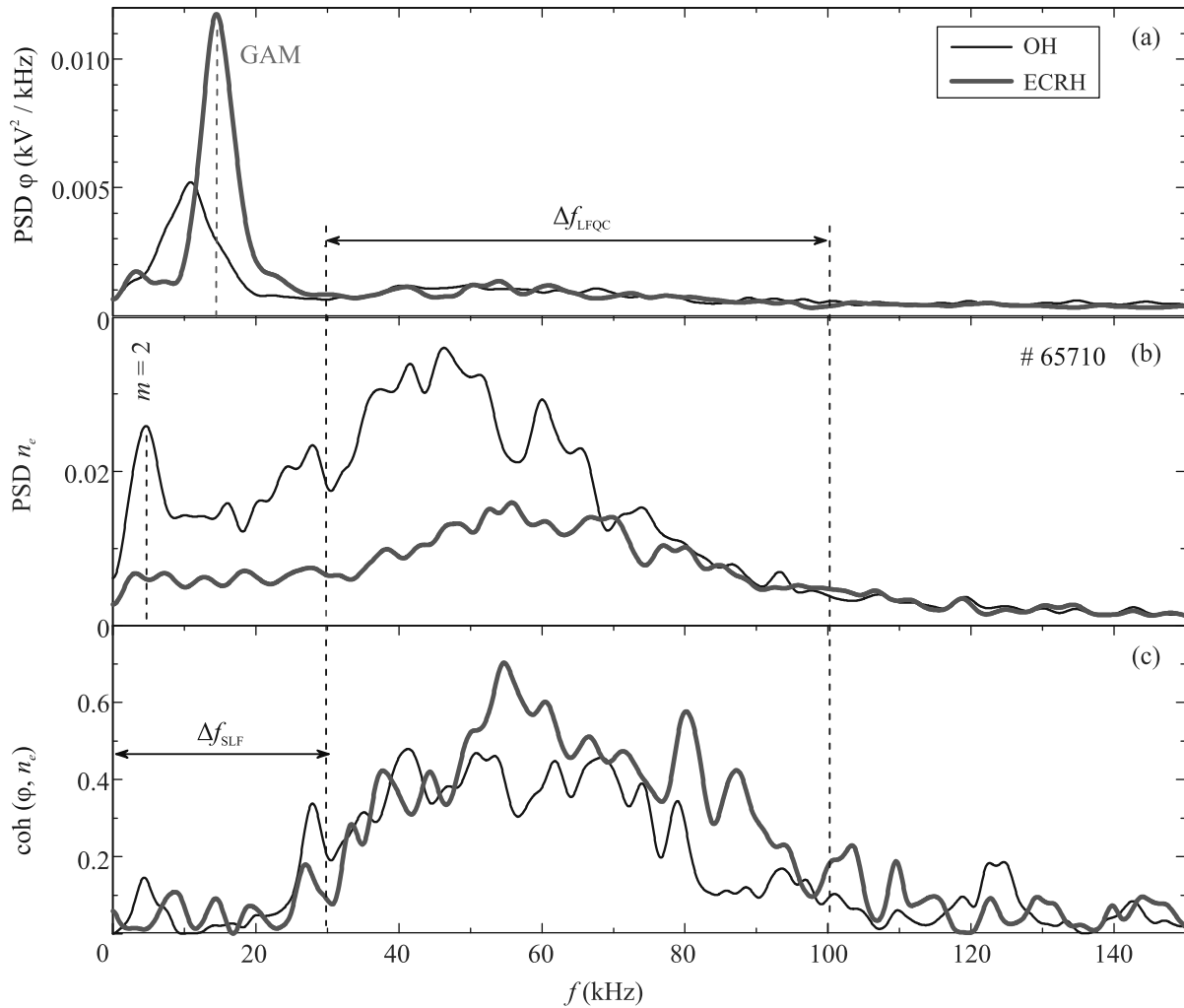


Рис. 3. (Цветной онлайн) Удельная спектральная плотность мощности (Power Spectral Density, PSD) колебаний потенциала φ (a) и плотности плазмы n_e (b), и их когерентность (c) в плазме с омическим (OH) и электронно-циклотронным (ECRH) нагревом. При ECRH пик GAM усиливается, но квазикогерентная мода (LFQC) ослабляется [30]. Также показана МГД мода $m = 2$ и стохастическая низкочастотная мода (SLF)

$\lambda_{\text{LFQC}} < 7$ см), и сильно различаются по частотам ($f_{\text{SLF}} \sim 1\text{--}20$ кГц, $f_{\text{LFQC}} \sim 50\text{--}120$ кГц) [29].

Биспектральный анализ спектров колебаний потенциала, плотности и магнитного потенциала показал, что GAM связаны с SLF, LFQC и HFQC механизмом трехволнового взаимодействия, рис. 4 [30, 31]. Показано, что наиболее выраженную связь демонстрируют флуктуации плотности, а не потенциала [32, 33].

Скорость полоидального вращения турбулентности V_{turb} оценивалась по наклону двумерного спектра флуктуаций плотности $S(k, f)$, измеренных многоканальным энергетическим анализатором НИБР, рис. 5. Показано, что LFQC всегда вращается в направлении электронного диамагнитного дрейфа (EDD), в то время как SLF также может вращаться

в направлении ионного диамагнитного дрейфа (IDD) [6]. В омической фазе разряда T-10 типичное значение $V_{\text{turb}} = 5.0 \pm 0.5$ км/с согласуется со скоростью $E \times B$ дрейфа, определенной по радиальному электрическому полю $E_r = 100$ В/см, $V_{E \times B} = 4.6 \pm 0.5$ км/с [34].

Прямые измерения турбулентного потока частиц, сделанные с помощью НИБР, показали, что основной вклад в поток дают LFQC, а GAM, как крутильные колебания, напротив, не дают вклада в радиальный поток [35–37].

На стеллараторе TJ-II структура турбулентности исследовалась с помощью диагностики НИБР [38, 39]. Установлено, что уровень широкополосной электростатической турбулентности неоднороден по радиусу и зависит от типа (ECRH, NBI) и мощности нагрева

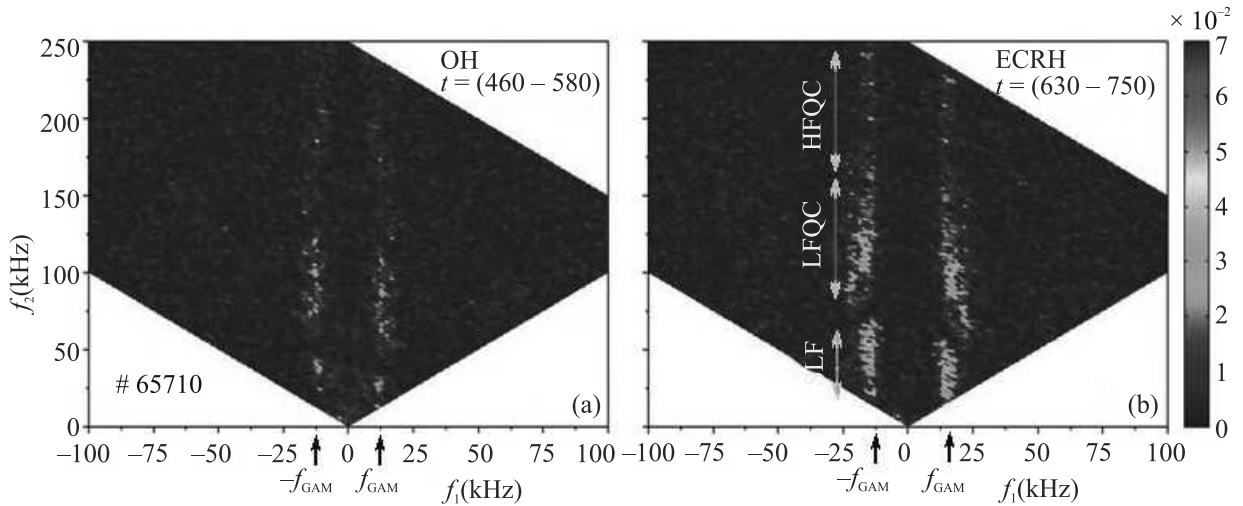


Рис. 4. (Цветной онлайн) Кросс-биогерентности колебаний потенциала и плотности $b_{\varphi,n,n}^2$ в ОН (а) и ECRH (б) плазме, $\rho_{\text{HIVR}} = 0.9$ [30]. Показаны характерные пики и области частот f_{GAM} , SLF, LFQC и HFQC

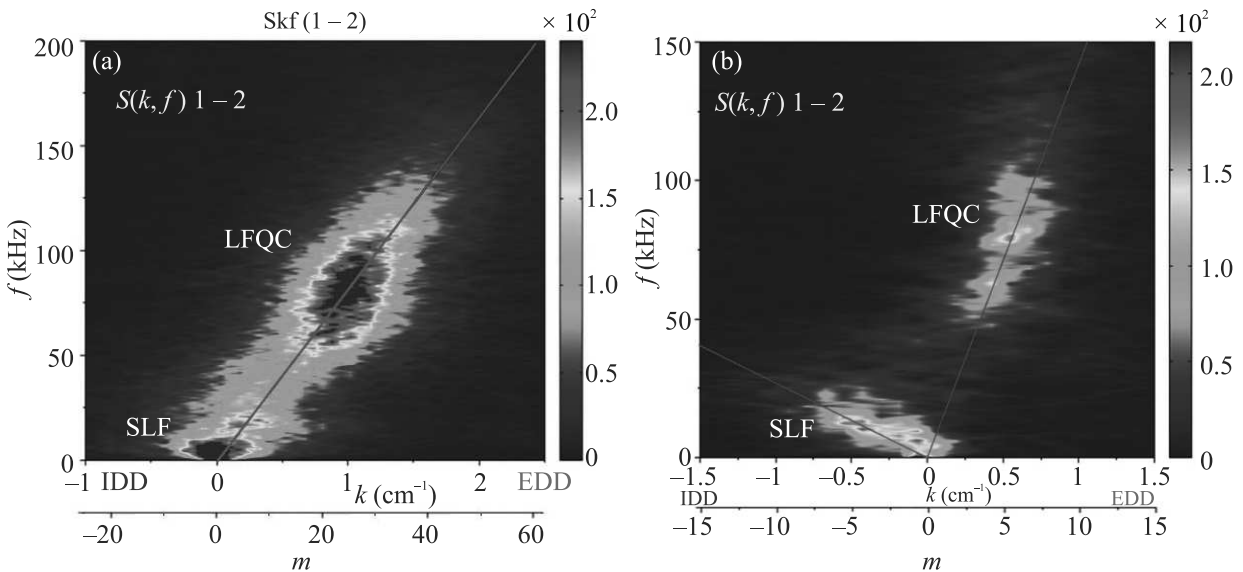


Рис. 5. (Цветной онлайн) (а) – Двумерный спектр мощности флуктуаций плотности $S(k, f)$, определенный по соседним SV 1 и 2 многощелевого анализатора, характеризующий полоидальное вращение в сторону электронного диамагнитного дрейфа (EDD) для стохастических низкочастотных (SLF) и низкочастотных квазикогерентных (LFQC) мод; средняя плотность $\bar{n}_e = 3 \times 10^{19} \text{ м}^{-3}$, $r_{\text{SV}} = 0.25 \text{ м}$; (б) – пример полоидального вращения SLF мод в сторону ионного диамагнитного дрейфа (IDD), $\bar{n}_e = 1 \times 10^{19} \text{ м}^{-3}$. Полоидальный номер моды m вычисляется как $m = k \cdot r_{\text{SV}} / \lambda$, где $r_{\text{SV}} = 0.1 \text{ м}$, λ – длина волны [34]

[40]. В частотном диапазоне GAM обнаружены квазимонохроматические электростатические моды, локализованные в центральной части шнура [41, 42].

Исследование свойств GAM. Впервые GAM были предложены в 1968 г. в теоретической работе [43] для интерпретации колебаний потенциала периферийной плазмы стелларатора. Особенность GAM как полоидальных крутильных колебаний плазмы делает ее экспериментальное обнаружение и ис-

следование трудной диагностической задачей, которая была впервые решена только в 2003 г. одновременно на токамаках TEXT [44], DIII-D [45] и T-10 [46]. Поскольку GAM рассматриваются как возможный механизм саморегуляции широкополосной турбулентности [47], превращающий радиальный поток на стенку в крутильные колебания, исследования GAM стали чрезвычайно актуальными [48–51].

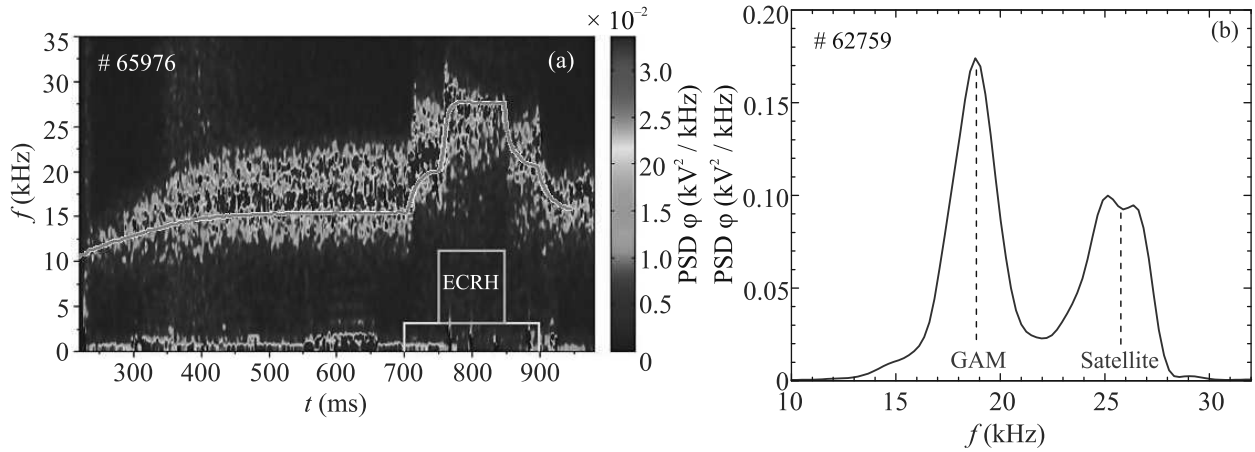


Рис. 6. (Цветной онлайн) (a) – Спектрограмма мощности колебаний потенциала на при ECR-нагреве на токамаке Т-10, $r_{\text{HIBP}} = 0.24$ м. Сплошная линия $\sim \sqrt{T_e}$, измеренной по 2ω ECE на $r = 0.18$ м [7]. Видна перемежаемая структура GAM. (b) – Типичный спектр мощности колебаний потенциала плазмы в омическом режиме показывает наличие высокочастотного сателлита GAM [52]

Свойства и радиальная структура GAM. В двухжидкостном приближении частота GAM описывается локальным дисперсионным соотношением [51]:

$$f_{\text{GAM}}^{\text{ei}} = \frac{1}{\sqrt{2m_i\pi R}} \sqrt{T_e + 7/4T_i}. \quad (2)$$

Рисунок 6 показывает, что на Т-10 частота GAM увеличивается с ростом температуры при ECRH [7]. Наилучшее согласие абсолютного значения частоты GAM с экспериментом достигается, когда значения температур в (2) берутся вблизи периферии ($\rho \sim 0.9$). Помимо основного пика, GAM имеет высокочастотный сателлит, частота которого также эволюционирует с температурой.

С помощью сканирования по углу инжекции и энергии пучка HIBP получены радиальные распределения амплитуды GAM [53]. Рисунок 7 показывает, что GAM на Т-10 имеет однородную радиальную структуру во всей области наблюдений ($0.3 < r/a < 1$), т.е. является глобальной собственной модой плазменных колебаний. Рисунок 8 показывает, что корневая зависимость частоты от температуры (2) справедлива для широкого интервала T_e , включая режимы с омическим и ECR-нагревом [54], а также сценарии с импульсной инжекцией примесей благородных газов [55, 56]. Установлено, что частота GAM следует теоретической корневой зависимости от температуры в широком диапазоне параметров плазмы [57].

В квазистационарных режимах амплитуда GAM падает с ростом средней плотности и растет с током плазмы, рис. 9, что согласуется с механизмом продольного столкновительного затухания на запертых

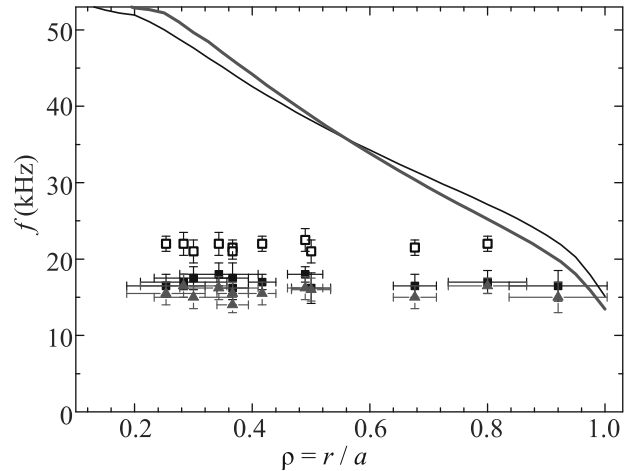


Рис. 7. (Цветной онлайн) Однородная пространственная структура частоты GAM на Т-10 при $B_t = 1.7$ Тл. Сплошные линии – расчет по локальной теории (2); $\square$ – сателлит; $\blacksquare$ и $\blacktriangle$ – основной пик GAM; черные линии и точки – $\bar{n}_e = 1.3 \times 10^{19}$; красные линии и точки – $\bar{n}_e = 2.1 \times 10^{19} \text{ м}^{-3}$ [53]

электронах [58]. Действительно, решение самосогласованной системы уравнений для двухжидкостной дрейфовой турбулентности дает зависимость амплитуды колебаний на частоте GAM для электрического потенциала A_{GAM} от плотности n :

$$A_{\text{GAM}} \sim 1/n \times (1 - n/n_{\text{cr}})^{1/2}, \quad (3)$$

справедливой для $n < n_{\text{cr}}$, т.е. до максимальной плотности, при которой существует GAM. Полученное совпадение A_{GAM} , измеренной на Т-10 с помощью HIBP и рассчитанной по (3), указывает на

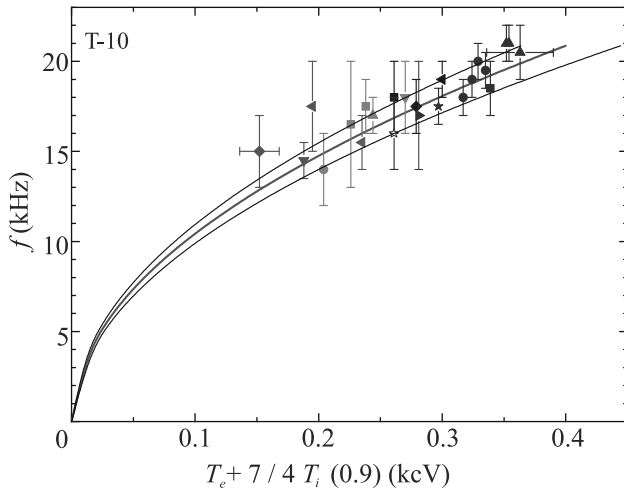


Рис. 8. (Цветной онлайн) Корневая зависимость частоты GAM от температуры на радиусе $\rho = 0.9$ в диапазоне токов $I_p = 170\text{--}300$ кА, полей $B_t = 1.6\text{--}2.4$ Тл, плотностей $\bar{n}_e = (1.5\text{--}6) \times 10^{19} \text{ м}^{-3}$. Тонкие черные линии соответствуют вариации температуры T_e на 10%, и T_i на 15% [54]

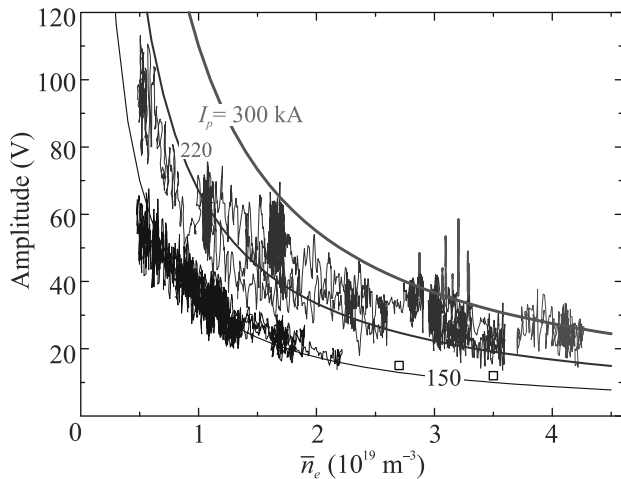


Рис. 9. (Цветной онлайн) Амплитуда GAM на потенциале в разрядах с различной плотностью и током (цифры у кривых): тонкие линии – эксперимент, красные и синие – при $B_t = 2.3\text{--}2.4$ Тл, черные – при $B_t = 1.6$ Тл, $\square$ – при $B_t = 2.3$ Тл; толстые линии – оценка (3) [58]

столкновительный характер затухания GAM, порождаемой широкополосной турбулентностью, по модели взаимодействия “хищник-жертва”. В нестационарных режимах с импульсным напуском благородных газов частота GAM следует (2), а амплитуда – столкновительному затуханию [59–61].

Обнаружены дальние радиальные корреляции между колебаниями потенциала, измеренными НІВР на $r = 18$ см, и ленгмюровским зондом (LP) на

$r = 28.8$ см. На частоте GAM (17 кГц) обнаружена высокая когерентность (> 0.5) и кросс-фаза $\sim \pi$ между колебаниями плотности (CR) и потенциала (НІВР), измеренными в точках, сдвинутых на $1/4$ тора, рис. 10 [62–64].

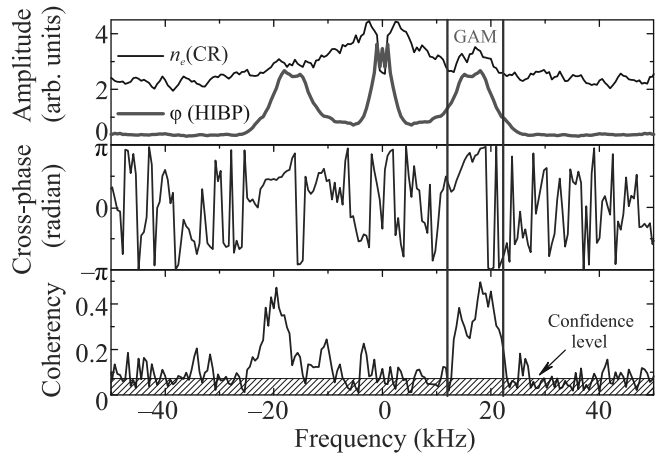


Рис. 10. (Цветной онлайн) Дальние пространственные корреляции потенциал-плотность, измеренные НІВР и рефлектометром (CR) [64, 67]

На стеллараторе TJ-II с помощью диагностики НІВР были обнаружены низкочастотные зональные течения [65] и электростатические моды с признаками GAM [66].

На токамаке COMPASS с помощью прыгающего зонда был измерен радиальный профиль возмущения потенциала плазмы на частоте GAM в диапазоне $0.85 < r/a < 1.05$. В области измерений частота GAM постоянна (34 ± 5 кГц), что существенно отличает ее от предсказаний локального дисперсионного соотношения, рис. 11а [68]. На токамаке STOR-M с помощью подвижного зонда были проведены измерения в радиальном диапазоне $0.88 < r/a < 0.97$, рис. 11б. Показано, что в области измерений частота GAM постоянна (33 ± 2 кГц), хотя электронная температура существенно меняется [69]. Таким образом, глобальный характер GAM, обнаруженный на T-10, получил дополнительные подтверждения в экспериментах как на D-образном токамаке COMPASS, так и на малом круглом токамаке STOR-M. Также отметим, что на STOR-M обнаружен сателлитный пик GAM, а на COMPASS – трехволновое взаимодействие GAM [68] с широкополосной турбулентностью [69].

На трех рассмотренных установках GAM демонстрирует свойства глобальной моды, что отличается от наблюдений GAM на установках DIII-D, AUG и ФТ-2, где GAM наблюдается только на периферии плазмы, причем на TEXT [70] и ФТ-2 [71] обнару-

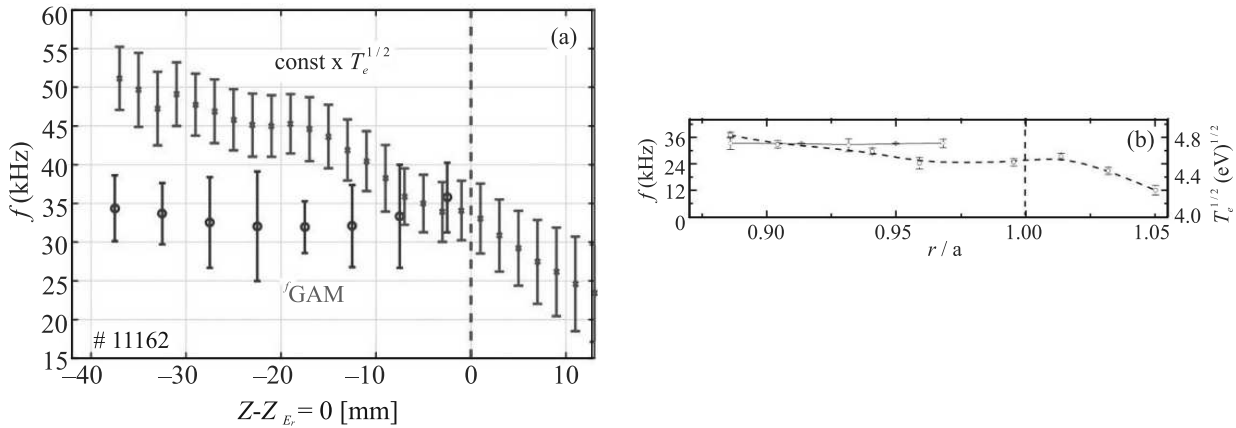


Рис. 11. (Цветной онлайн) Пространственная структура частоты GAM и ее оценка согласно локальному дисперсионному соотношению (2): (a) – на токамаке COMPASS, #11162, $I_p = 200$ кА, $\bar{n}_e = 8 \times 10^{19} \text{ м}^{-3}$, $q_{95} = 3.9$ [68]; (b) – на токамаке STOR-M [69]

жен рост частоты GAM к центру в согласии с радиальной зависимостью температуры в (2). На установке TCV было показано, что GAM может быть как глобальной, так и периферийно-локализованной модой, в зависимости от $q(a)$. Наблюдения на T-10 в широком диапазоне параметров плазмы, а также на COMPASS и STOR-M, показывают, что критерий глобальности GAM, предложенный на TCV ($q(a) < 5$ [72]), неприменим, а феномен GAM как глобальной моды требует теоретического объяснения.

Редуцированные уравнения двухжидкостной гидродинамики Брагинского были модифицированы так, чтобы учесть влияние переменного внешнего электрического поля, локализованного в пристеночном слое токамака. Показано, что электрическое поле, осциллирующее на частоте GAM, при достижении определенной амплитуды способно подавлять турбулентный перенос [73]. Это теоретическое предсказание впоследствии было подтверждено в экспериментах на токамаке STOR-M [74]. Таким образом, делаются первые шаги от наблюдения к активному управлению GAM и турбулентностью.

Взаимодействие GAM и МГД колебаний. На T-10 в узком диапазоне плотностей и токов ($q(a) \sim 3$) были получены разряды со спонтанными резонансными низкочастотными (1–5 кГц) крупномасштабными МГД тиринг-колебаниями (КТ-модами) с $m < 3$, высоким уровнем флуктуаций плотности (1–4 %), и полоидального поля 7×10^{-4} Тл. Развитие КТ-моды сильно меняет свойства плазмы в разряде, включая характеристики турбулентности, в результате чего ухудшается удержание, уменьшается абсолютная величина отрицательного потенциала плазмы и подавляется GAM [75]. С ростом амплитуды КТ-

моды ее вращение становится неравномерным, скорость вращения циклически меняется в согласии с расчетом [76].

Был обнаружен новый режим, в котором плавный рост КТ-моды $m = 2$ сопровождался плавным затуханием GAM и ее сателлита и ростом потенциала плазмы, рис. 12.

На установке STOR-M было показано, что принудительная генерация низкочастотных резонансных магнитных возмущений также может подавить GAM [69].

Теоретический анализ GAM. Кинетическое рассмотрение GAM [77] показало, что первая и вторая гармоники ионно-звуковой моды могут быть связаны между собой за счет геодезического и дрейфового эффектов. Эта связь может возбуждать дрейфовую геодезическую ионно-звуковую собственную моду, которая приводит к расщеплению GAM колебаний потенциала на основной и сателлитный частотные пики, наблюдаемые на T-10, см. рис. 6b, и на STOR-M.

С помощью полной системы электромагнитных дрейфовых кинетических уравнений для электронов и ионов выведено общее дисперсионное соотношение для геодезических акустических мод, учитывающее электромагнитные эффекты [78]. Показано, что гармоника GAM на плотности с $m = 1$ имеет конечную электромагнитную компоненту. Таким образом, теоретически показана возможность существования магнитной компоненты GAM, которая ранее считалась чисто электростатической модой, в то время как ее магнитная компонента наблюдалась в экспериментах на T-10 [48], COMPASS [68] и других установках. Также показана принципиальная возможность суще-

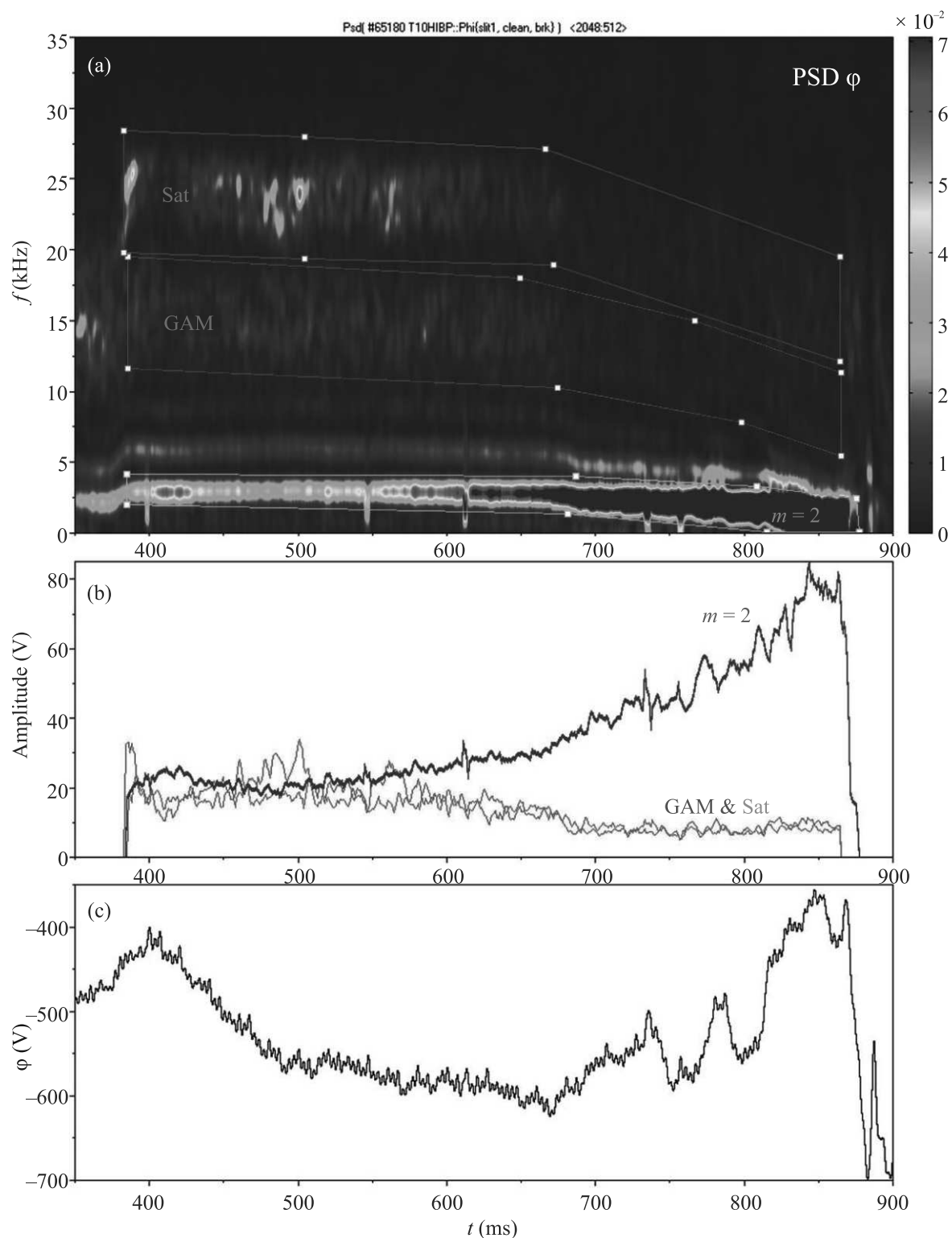


Рис. 12. (Цветной онлайн) (а) – Спектрограмма колебаний потенциала плазмы, полученная НІВР, показывает сосуществование МГД КТ-моды $m = 2$ (3 кГц), ее второй гармоники (6 кГц), GAM (15 кГц) и ее сателлита (25 кГц); (б) – согласованное изменение амплитуд: GAM и сателлита уменьшается, КТ-моды растет; (с) – изменение потенциала плазмы

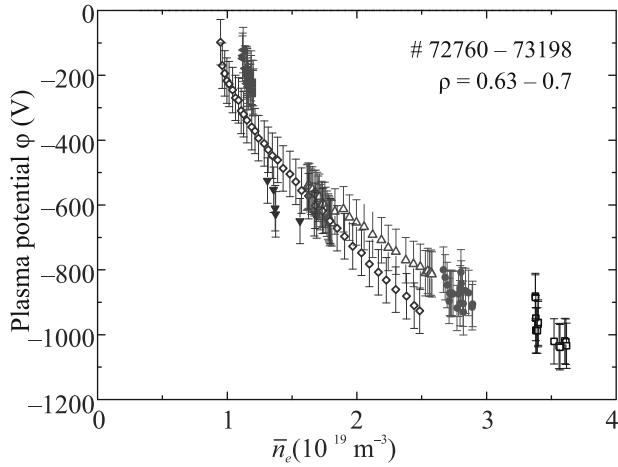


Рис. 13. (Цветной онлайн) Зависимость потенциала, измеренного на T-10 на средних радиусах ($\rho = 0.63\text{--}0.7$) от среднечордовой плотности плазмы в серии импульсов # 72760–73198

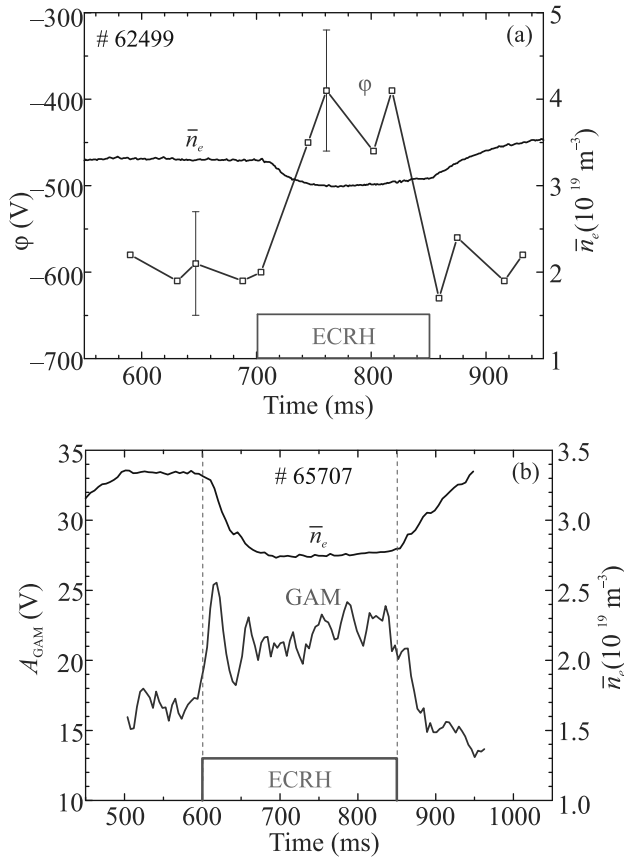


Рис. 14. (Цветной онлайн) (a) – Эволюция потенциала плазмы φ , измеренного HIBP на $r = 0.21$ м, и эффект откачки плотности в типичном разряде с ECRH; (b) – эволюция флуктуаций потенциала в частотном диапазоне GAM и плотности плазмы [81]

ствования глобальной ГАМ, наблюдаемой в экспериментах на T-10, COMPASS, и STOR-M [79].

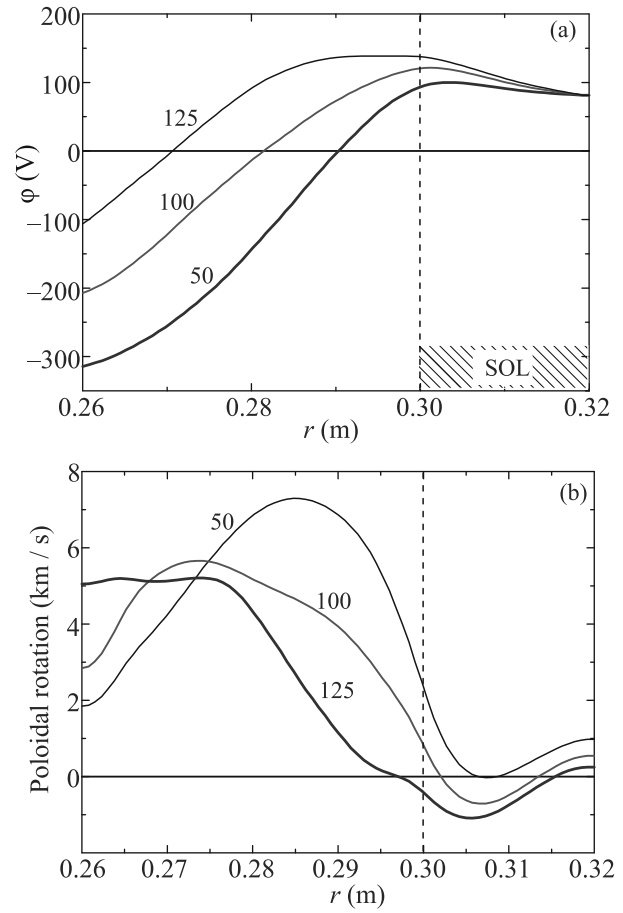


Рис. 15. (Цветной онлайн) Результаты расчетов распределения потенциала (a) и скорости вращения (b) в T-10 в зависимости от температуры на границе расчетной области в точке $r_0 = 0.26$ м при $T_e(r_0) = 50, 100$ и 125 эВ и плотности $n_e(r_0) = 0.5 \times 10^{19} \text{ м}^{-3}$; пунктир – положение лимитера, SOL – пристеночный слой

Динамика параметров плазмы в режимах с омическим и дополнительным нагревом.

Исследование электрического потенциала. В омических режимах с нарастающей плотностью в течение импульса, а также при изменении плотности от импульса к импульсу получена зависимость потенциала от плотности на T-10. Показано, что результаты измерений в обоих типах режимов совпадают: потенциал имеет отрицательный знак, его абсолютная величина имеет масштаб нескольких сотен вольт и растет с плотностью (рис. 13). Центральный ECRH приводит к существенному росту электронной температуры плазмы, вызывающему не только рост энергосодержания плазмы, но и выброс плотности n_e из зоны нагрева на периферию (rump-out), указывающий на ухудшение удержания частиц [80]. Показано, что rump-out усиливается с

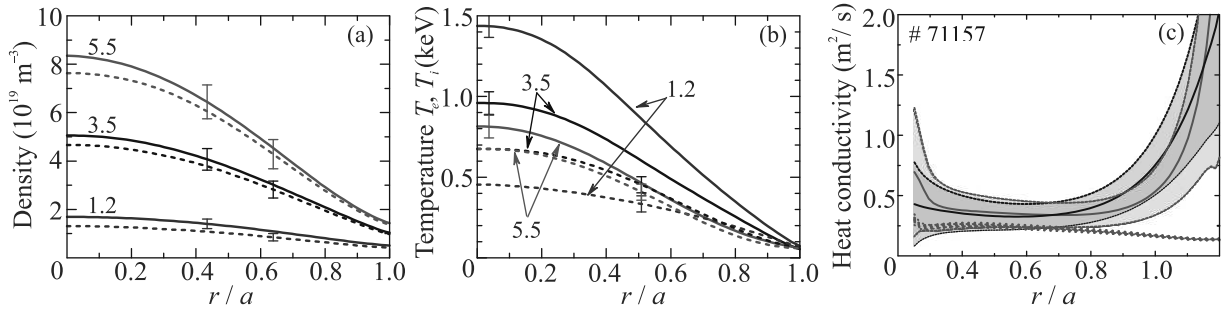


Рис. 16. (Цветной онлайн) Измеренные профили: (а) – плотности электронов и ионов при трех значениях средней плотности; (б) – электронной (сплошные линии) и ионной (пунктир) температуры для тех же импульсов; (с) – электронной (черная линия) и ионной (толстая красная линия) теплопроводности, определенные из энергобаланса с учетом погрешностей эксперимента, и ионная теплопроводность, рассчитанная по неоклассической теории (точки), для омической стадии импульса с $\bar{n}_e = 2.5 \times 10^{19} \text{ м}^{-3}$, в котором проводились исследования GAM

ростом плотности плазмы до некоторого критического значения, начиная с которого вынос частиц из зоны центрального нагрева уменьшается. Явление pump-out оказалось связанным с динамикой потенциала плазмы и его флуктуаций в диапазоне GAM: при ECRH потенциал уменьшается по абсолютной величине, а амплитуда GAM на потенциале увеличивается, рис. 14 [81].

На основе 5-ти полевой электростатической редуцированной МГД-модели Брагинского в турбулентном режиме проведены расчеты потенциала, электрического поля и скорости вращения периферийной плазмы и SOL на T-10 ($r = 0.26\text{--}0.32 \text{ м}$). Показано, что с ростом температуры, моделирующим ECR-нагрев, потенциал эволюционирует в положительную сторону, а скорость вращения замедляется, что согласуется с результатами экспериментов (рис. 15). Наблюдаемый эффект объясняется различным воздействием электронной температуры на силы, участвующие в генерации полоидальной скорости: силу турбулентного напряжения (Рейнольдса), сильно зависящую от электронной температуры, и геодезическую силу (Стрингера–Винзора) [82]. Показано, что рост плотности приводит к ускорению вращения, а нагрев электронов – к его замедлению, что соответствует результатам экспериментов.

В режимах с ECRH и дополнительным NBI нагревом на стеллараторе TJ-II было показано, что электрический потенциал плазмы уменьшается с ростом плотности и нарастает с ростом электронной температуры в согласии с результатами неоклассического моделирования [83]. Установлены общие свойства потенциала плазмы на токамаке T-10 и стеллараторе TJ-II [84, 85]. Показано, что в полном диапазоне операционных пределов обеих установок центральный потенциал определяется столкновительностью: с ее

увеличением меняет знак с положительного на отрицательный и нарастает по абсолютной величине [86].

Ионная температура, концентрация примесей и эффективного заряда Z_{eff} при омическом и ECR-нагреве. Для анализа GAM и широкополосной турбулентности, на T-10 проведены измерения и анализ профилей температур T_e , T_i , плотности n_e с учетом Z_{eff} , источников и стоков тепла [87–91]. Показано, что эффективный коэффициент ионной теплопроводности χ_i может иметь аномально высокую величину, существенно превышающую неоклассическое значение (рис. 16). Получен скейлинг для аномальной части ионной теплопроводности в омических разрядах T-10, позволяет предсказывать ионную температуру в зоне $\rho = 0\text{--}0.8$ с точностью $\pm 15\%$:

$$\chi_{i\text{-scal}}^{\text{an}}(\rho) = 0.05 \bar{n}_e Z_{\text{eff}} \left(\frac{I_p}{220} \right)^{-0.5} \left(\frac{\rho^2}{n_e(\rho)/n_e(0)} \right),$$

где χ_i [м²/с], I_p [кА], n_e [10^{19} м^{-3}]; χ_i^{an} сильно возрастает к периферии плазмы, линейно спадает с плотностью, растет с Z_{eff} и слабо спадает с током I_p .

Сравнение с моделью критических градиентов, вызванных развитием неустойчивости на градиенте ионной температуры (ITG-моды), показало, что измеренный градиент T_i может сильно превышать порог развития ITG-моды [92]. Предварительный анализ скейлингов аномального переноса электронов и ионов показал, что они демонстрируют строго противоположные зависимости как при омическом (от параметров: n_e , Z_{eff} и I_p), так и при ECR-нагреве (от мощности и зоны локализации вкладываемой мощности).

Баланс частиц и энергии. В разрядах с омическим и дополнительным центральным электронно-циклотронным нагревом (ECRH) на T-10 исследовалось поведение мелкомасштабных флуктуаций

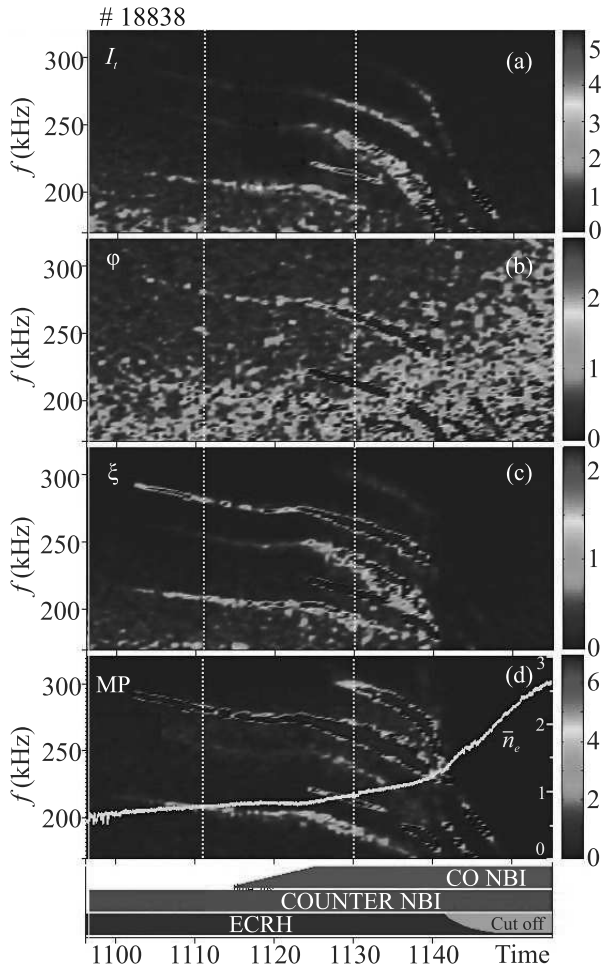


Рис. 17. (Цветной онлайн) Спектрограммы мощности (PSD) колебаний сигналов HIBP ($\rho = -0.5$) и зонда Мирнова (MP) на стеллараторе TJ-II. АЕ видны: (a) – на токе вторичного пучка $I_t \sim n_e$; (b) – на потенциале φ ; (c) – на тороидальном смещении вторичного пучка $\zeta \sim B_{\text{poi}}$; (d) – на сигнале магнитного зонда MP [7]

потенциала и плотности. Показано, что существует некоторый пикированный “предельный” профиль нормированного давления, при превышении которого наступает резкое ухудшение удержания частиц, проявляющееся в резком спаде плотности в омических режимах и в эффекте выброса плотности “density pump out” при ECRH. Минимальный уровень турбулентности не зависит от мощности нагрева, и он наблюдался при оптимальном профиле давления, который несколько шире предельного профиля. Флуктуации плотности не дают заметного вклада в перенос энергии, но определяют поток частиц, поддерживающий профиль давления. Наблюдаемое поведение плотности n_e описывается моделью канонических профилей, реализованной в транспортном ко-

де ASTRA, описывающей ухудшение удержания при достижении предельного профиля давления [28].

Анализ данных T-10 и других токамаков показал, что возрастание теплового потока на стенку в результате ECRH или любых других искажений профиля давления внешними факторами снижает номер моды нижней границы турбулентного спектра m и увеличивает плотность теплового потока на стенку, пропорционального $m^{-1.5}$. Для объяснения наблюдаемых эффектов использован “термодинамический” подход к концепции сохранения нормированных профилей давления плазмы, в частности, описывающий эффект rump-out [93, 94].

В омическом режиме T-10 наблюдались переходы от стандартного к ухудшенному удержанию частиц, подобные эффекту rump-out. При этом, при падении n_e потенциал φ эволюционирует в положительную сторону. Показано, что изменение удержания частиц связано с отклонением радиального профиля электронного давления от оптимального (канонического). С помощью нелинейной модели канонических профилей описан перенос частиц в нестационарных режимах, включая описанные эффекты перехода и L-моду [95–97]. Для токамака COMPASS описан перенос частиц в L- и H-режимах удержания при омическом и инжекционном (NBI) нагреве, в которых обнаружены АЕ [98].

Влияние литиезации на параметры плазмы. На T-10 проводились исследования свойств плазмы, ограниченной ITER-подобной стенкой: с вольфрамовым лимитером и литиезацией стенок камеры. Источником лития (Li) являлся подвижный литиевый лимитер на основе вольфрамовой капиллярно-пористой структуры. Изменение условий на границе плазмы за счет притока лития, а также его излучение и перенос оказывает существенное влияние как на глобальные характеристики плазмы, так и на свойства ее флуктуаций [99, 100]. Литиезация стенок камеры может значительно снизить уровень примесей, как легких: C и O, так и тяжелых, W, тем самым, значительно влияя на величину Z_{eff} и уровень радиационных потерь [101, 102]. Получены зависимости времени удержания энергии в электронной τ_{Ee} и ионной τ_{Ei} компонентах от электронной плотности в рядах со значительно меняющимися значениями Z_{eff} и мощностью дополнительного нагрева $P_{\text{EC}} < 2$ МВт [103, 104]. Показано, что литий по-разному влияет на удержание ионов и электронов [105, 106]. Отмечено, что большие тепловые потоки, связанные с развитием турбулентности или пучков ускоренных электронов при ЭЦ нагреве, приводили к разрушению вольфрамовых пластин лимитера [107].

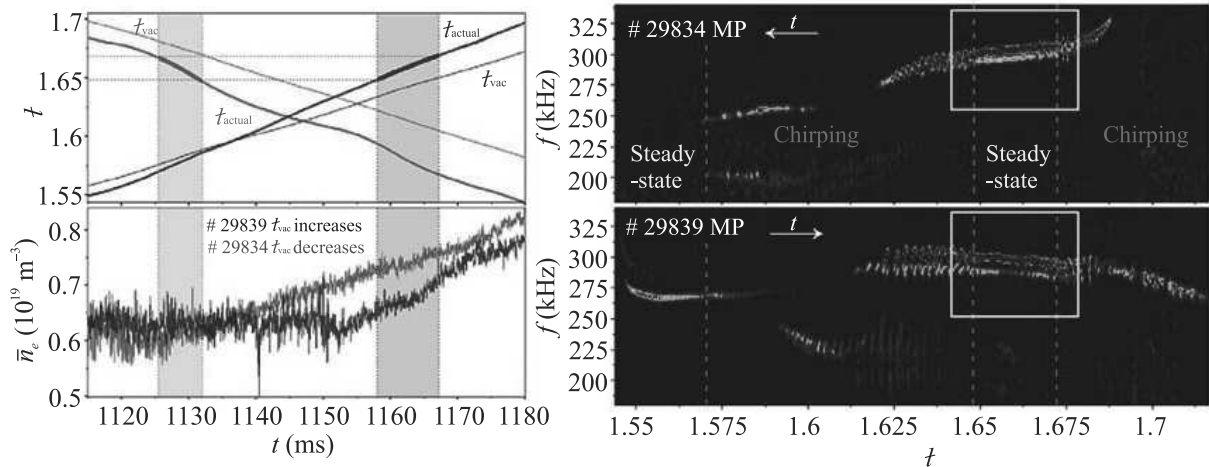


Рис. 18. (Цветной онлайн) (слева) Временная эволюция вакуумного t_{vac} и реального t_{actual} вращательного преобразования и плотности при сканировании магнитной конфигурации в сторону увеличения или уменьшения t_{vac} (синие и красные кривые). Чирпинг-мода трансформируется в моду с непрерывной частотой при одном и том же значении t_{actual} , отмеченного вертикальными цветовыми полосами. Справа приведены магнитные спектрограммы АЕ мод как функции t_{actual} и эти значения выделены пунктиром [112]

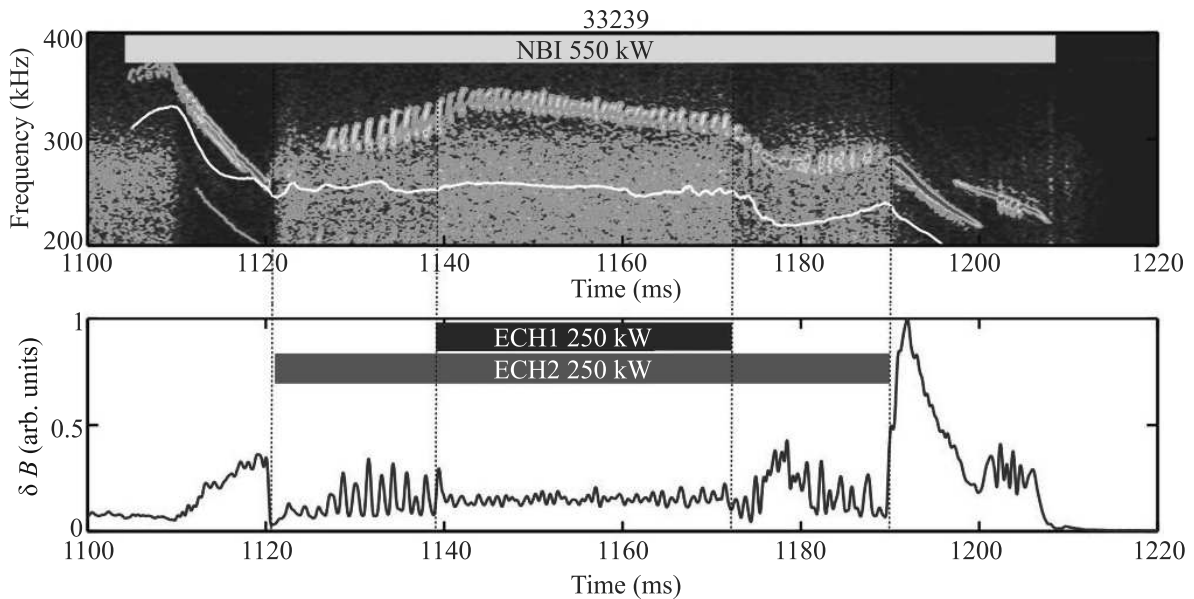


Рис. 19. (Цветной онлайн) Эволюция АЕ моды из непрерывной формы в чирпинг в разряде ТЖ-II с увеличением мощности нецентрального ECRH/ECCD. Вверху – магнитная спектрограмма, внизу – амплитуда наблюдаемой моды

Альвеновские моды (АЕ). Изучение АЕ и управление ими является одной из ключевых задач термоядерных исследований [108]. АЕ наблюдаются в виде квазимонохроматических осцилляций, с частотой, эволюционирующей как $n_e^{-1/2}$, рис. 17 [109, 110].

Установлено, что в стеллараторе ТЖ-II свойства спектрального континуума, частотный интервал и положение “щелей”, в которых возбуждаются АЕ, определяет профиль не вакуумного вращательного

преобразования $t_{vac}(\rho)$, а реального $t_{actual}(\rho)$, скорректированного влиянием тока плазмы I_p . Показано, что существуют интервалы изменения t – “окна”, в которых АЕ становится чирпирующей, в то время как в других “окнах” ее частота непрерывно меняется в зависимости от тока и плотности плазмы, рис. 18 [111, 112].

Эксперименты на ТЖ-II показали, что амплитуда чирпинг-мод и периодичность вспышек снижается при увеличении мощности ECRH, рис. 19

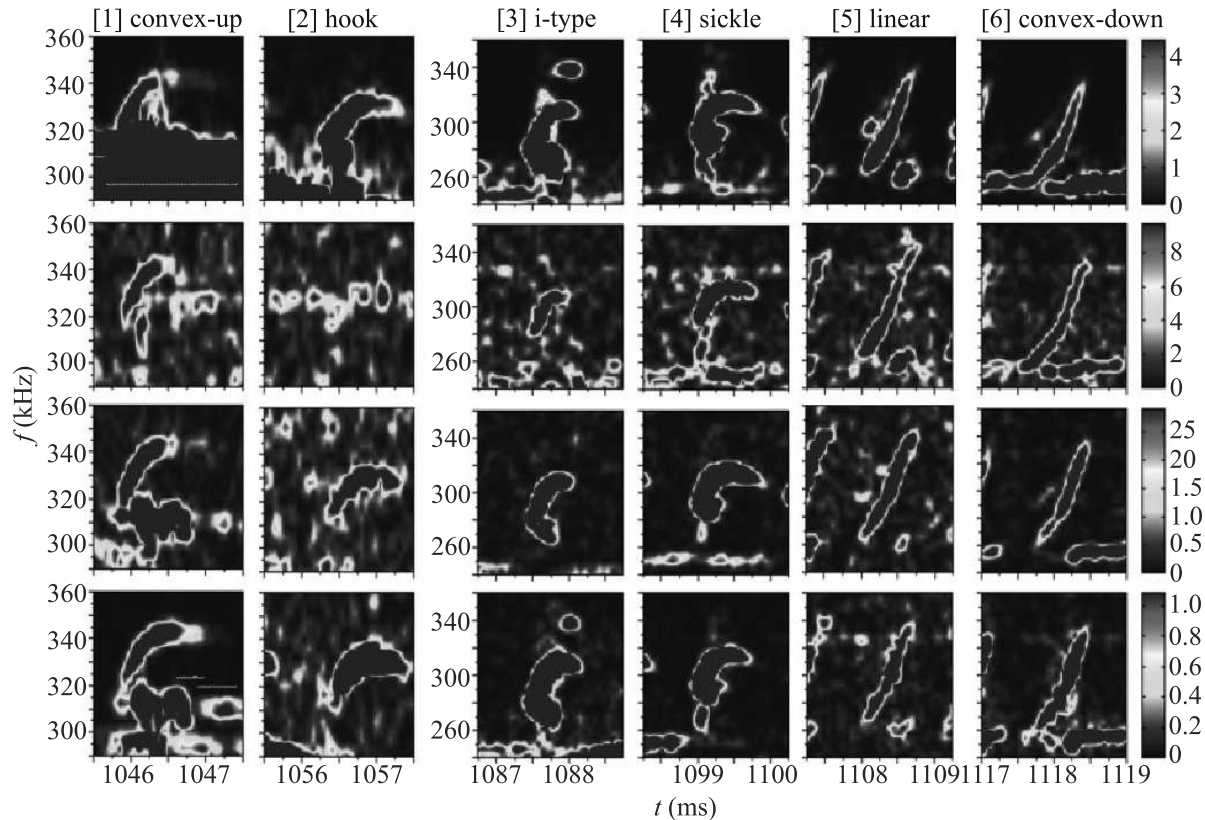


Рис. 20. (Цветной онлайн) Шесть типов чирпинг-мод, обнаруженных на TJ-II. Спектрограммы мощности колебаний магнитного поля (магнитный зонд Мирнова), и трех сигналов НВР: плотности n , потенциала φ и магнитного поля B_{pol} [113]

[112]. Эти исследования стали основой для разработки методов управления АЕ с помощью изменения магнитной конфигурации и ECRH/ECCD, так как вклад ЕС-мощности локализован и хорошо контролируется [108].

На стеллараторе TJ-II обнаружено шесть различных типов чирпинг-мод [113]. Все они наблюдаются на сигналах магнитных зондов, а также на всех трех сигналах НВР: потенциале, плотности и магнитном поле, рис. 20.

В режиме радиального сканирования НВР установлено, что чирпинг-моды, как правило, возбуждаются в радиальном интервале $\rho = 0.6-0.8$ [114]. В течение одного цикла нарастания частоты они могут перемещаться по радиусу наружу, рис. 21 [113].

С помощью нелинейного МГД-моделирования был рассчитан альвеновский континуум, его щели и наблюдаемый диапазон частот, показанный на рис. 19, воспроизведена экспериментально наблюдаемая трансформация чирпинг-моды в АЕ моду с непрерывной частотой [115, 116].

На токамаке COMPASS было показано, что при NBI наблюдаются многочисленные квазикогерент-

ные электромагнитные моды с частотами $5 \text{ кГц} < f < 250 \text{ кГц}$, имеющими различную природу и локализацию [117–119]. С помощью анализа магнитных возмущений, низкочастотные моды с $f < 50 \text{ кГц}$ были идентифицированы как тиринг моды с малым полоидальным числом m и винтовые МГД моды, а более высокочастотные моды с $50 \text{ кГц} < f < 250 \text{ кГц}$ идентифицированы как АЕ, поскольку их частота падала с ростом плотности по альвеновскому закону (1). Обнаружены две ветви АЕ: более низкочастотные ($\sim 150 \text{ кГц}$) с баллонной и более высокочастотные ($\sim 250 \text{ кГц}$) с антибаллонной пространственной структурой. С помощью линейного МГД-кода KINX был рассчитан альвеновский континуум, его щели, определен частотный диапазон, модовая и пространственная структура наблюдаемых АЕ. Идентифицированы АЕ двух типов: тороидальные собственные моды (ТАЕ) с антибаллонной структурой и с $m, n < 9$, и моды, порожденные градиентом давления (Beta Induced Alfvén Eigenmodes – BAE) с баллонной структурой и с $m, n < 5$. Был обнаружен поразительный факт: АЕ наблюдались, в основном, в Н-мод, но не только в возбуждаемой NBI, а также и в омиче-

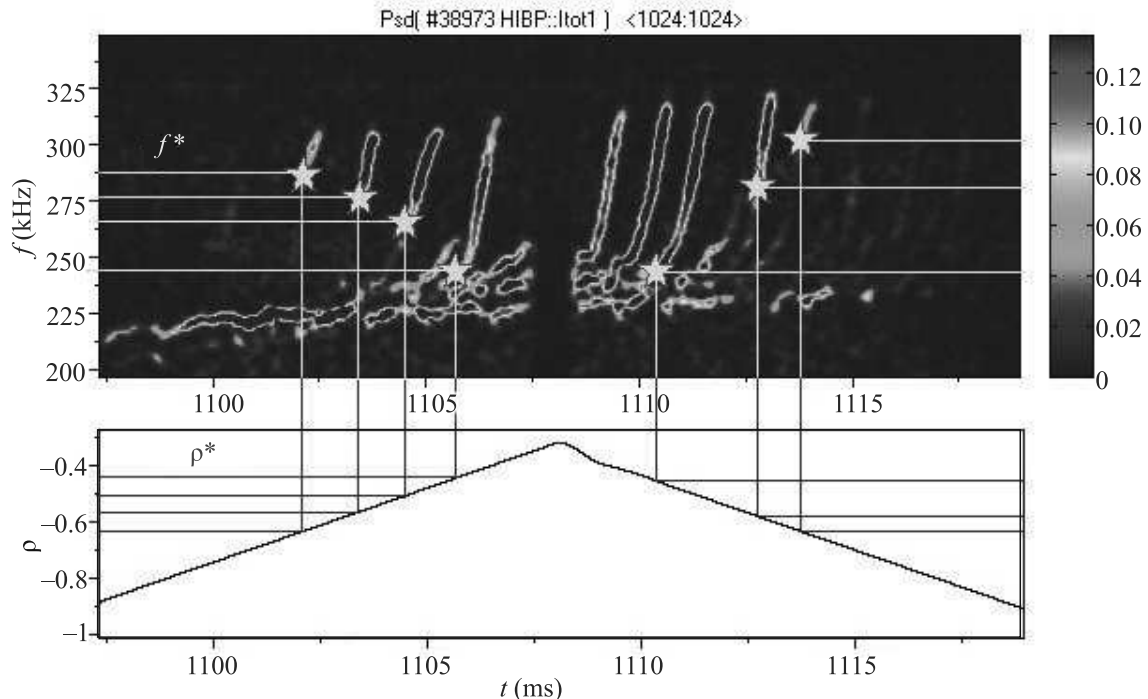


Рис. 21. (Цветной онлайн) Спектрограмма мощности колебаний плотности плазмы, измеренная при радиальном сканировании НІВР на ТЈ-ІІ, показывающая радиальное распространение чирпинг-моды наружу. Звездочки показывают моменты появления моды на данном радиусе. Зависимость радиуса точки измерения SV от времени показана на нижнем рисунке [113]

ской Н-моды [120]. Если в Н-моды, возбуждаемой NBI, генерация АЕ определяется взаимодействием ускоренных ионов с волной по механизму Ландау, то в случае омической Н-моды механизм совсем не ясен, поскольку в условиях высокой плотности возбуждение АЕ ускоренными электронами невозможно [121].

Заключительное замечание. В экспериментах по исследованию свойств АЕ в зависимости от t на ТЈ-ІІ был найден ненулевой нижний предел для f_{AE} . Было показано, что таким пределом является частота GAM [122]. Впервые на стеллараторах было показано, что динамика АЕ вблизи нижнего предела описывается дисперсионным соотношением, полученным в [3]. Таким образом, теоретически предсказанная взаимосвязь между GAM и АЕ получила экспериментальное подтверждение для стеллараторов.

Исследования, представленные в обзоре, выполнены в рамках проекта Российского научного фонда # 14-22-00193 и 14-22-00193П.

1. A. Di Siena, T. Görler, E. Poli, A. Banon Navarro, A. Biancalani, R. Bilato, M. J. Mantinen, F. N. de Oliveira-Lopes, F. Jenko (Collaborations the EUROfusion MST1 team and the ASDEX Upgrade team), Nucl. Fusion **59**, 124001 (2019).

2. H. L. Berk, D. N. Borba, B. N. Breizman, S. D. Pinches, and S. E. Sharapov, Phys. Rev. Lett. **87**, 185002 (2001).
3. B. N. Breizman, M. S. Pekker, and S. E. Sharapov, Phys. Plasmas **12**, 112506 (2005).
4. A. V. Melnikov, Nature Phys. **12**, 386 (2016).
5. M. A. Buldakov, V. A. Vershkov, M. Yu. Isaev, and D. A. Shelukhin, J. Phys. Conf. Ser. **907**, 012001 (2017).
6. V. A. Vershkov, M. A. Buldakov, G. F. Subbotin, D. A. Shelukhin, A. V. Melnikov, L. G. Eliseev, P. O. Khabanov, M. A. Drabinskii, D. S. Sergeev, T. B. Myalton, V. M. Trukhin, A. V. Gorshkov, I. S. Belbas, and G. M. Asadulin, Nucl. Fusion **59**, 066021 (2019).
7. A. V. Melnikov, L. I. Krupnik, L. G. Eliseev et al. (Collaboration), Nucl. Fusion **57**, 072004 (2017).
8. A. V. Melnikov, L. G. Eliseev, S. E. Lysenko et al. (Collaboration), 1st EPS Conf. on Plasma Diagnostics, (ECPD 2015), Frascati, Italy (2015); http://pos.sissa.it/archive/conferences/240/170/ECPD2015_170.pdf.
9. M. A. Drabinskii, J. Phys. Conf. Ser. **1147**, 012123 (2019).
10. M. A. Drabinskii, P. O. Khabanov, A. V. Melnikov, L. I. Krupnik, A. S. Kozachek, A. D. Komarov, and A. I. Zhezhera, J. Phys. Conf. Ser. **747**, 012017 (2016).

11. M. A. Drabinskiy, L. G. Eliseev, P. O. Khabanov, A. V. Melnikov, N. K. Khartchev, N. S. Sergeev, and S. A. Grashin, *J. Phys. Conf. Ser.* **1383**, 012004 (2019).
12. Н. К. Харчев, *Computational nanotechnology* **1**, 58 (2018).
13. М. А. Драбинский, Ф. О. Хабанов, А. В. Мельников, Л. И. Крупник, А. С. Козачек, А. Д. Комаров, А. И. Жежера, ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез **39**(2), 81 (2016).
14. М. А. Драбинский, *Computational nanotechnology* **1**, 62 (2018).
15. Ф. О. Хабанов, *Computational nanotechnology* **1**, 25 (2018).
16. A. V. Melnikov, M. A. Drabinskiy, L. G. Eliseev, P. O. Khabanov, N. K. Kharchev, L. I. Krupnik, J. L. De Pablos, A. S. Kozachek, S. E. Lysenko, A. Molinero, G. B. Igonkina, and M. M. Sokolov, *Fusion Eng. Des.* **146**, 850 (2019).
17. А. В. Мельников, *Computational nanotechnology* **1**, 31 (2018).
18. Л. А. Ключников, В. А. Крупин, К. В. Коробов, М. Р. Нургалиев, А. Р. Немец, А. Ю. Днестровский, Н. Н. Науменко, С. Н. Тугаринов, С. В. Серов, Д. С. Деньщиков, ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез **39**(1), 95 (2016).
19. L. A. Klyuchnikov, V. A. Krupin, M. R. Nurgaliev, K. V. Korobov, A. R. Nemets, A. Yu. Dnestrovskij, S. N. Tugarinov, S. V. Serov, and N. N. Naumenko, *Rev. Sci. Instrum.* **87**, 053506 (2016).
20. L. A. Klyuchnikov, V. A. Krupin, M. R. Nurgaliev, A. R. Nemets, I. A. Zemtsov, S. N. Tugarinov, and N. N. Naumenko, *Rev. Sci. Instrum.* **88**, 093508 (2017).
21. А. Р. Немец, В. А. Крупин, Л. А. Ключников, К. В. Коробов, М. Р. Нургалиев, ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. **38**(4), 96 (2015).
22. А. Р. Немец, В. А. Крупин, Л. А. Ключников, М. Р. Нургалиев, В. И. Тройнов, И. А. Земцов, И. С. Образцов, Д. С. Сергеев, ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез **40**(2), 23 (2017).
23. Л. А. Ключников, А. Р. Немец, В. А. Крупин, К. В. Коробов, М. Р. Нургалиев, Н. Н. Науменко, С. Н. Тугаринов, Д. С. Деньщиков, ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. **38**(4), 34 (2015).
24. R. Y. Solomatin, V. P. Budaev, S. A. Grashin, E. V. Dzyatko, L. G. Eliseev, A. V. Melnikov, S. V. Perfilov, and V. N. Zenin, *42nd EPS Conf. on Plasma Physics, 22–26 June 2015, Lisbon, Portugal*, Rep. P5.160.
25. A. V. Melnikov, A. V. Sushkov, A. M. Belov et al. (Collaboration), *Fusion Eng. Des.* **96–97**, 306 (2015).
26. В. П. Пастухов, *Физика плазмы* **47**, 808 (2021).
27. A. V. Melnikov, L. I. Krupnik, E. Ascasibar et al. (Collaboration), *Plasma Phys. Control. Fusion* **60**, 084008 (2018).
28. V. A. Vershkov, D. A. Shelukhin, G. F. Subbotin et al. (Collaboration), *Nucl. Fusion* **55**, 063014 (2015).
29. V. A. Vershkov, D. V. Sarychev, G. E. Notkin, D. A. Shelukhin, M. A. Buldakov, Yu. N. Dnestrovskij, S. A. Grashin, N. A. Kirneva, V. A. Krupin, L. A. Klyuchnikov, A. V. Melnikov, S. V. Neudatchin, M. R. Nurgaliev, Yu. D. Pavlov, and P. V. Savrukhin, *Nucl. Fusion* **57**, 102017 (2017).
30. A. V. Melnikov, L. G. Eliseev, S. E. Lysenko, M. V. Ufimtsev, and V. N. Zenin, *Nucl. Fusion* **57**, 115001 (2017).
31. A. V. Melnikov, L. G. Eliseev, S. A. Grashin, M. A. Drabinskiy, P. O. Khabanov, N. K. Kharchev, L. I. Krupnik, A. S. Kozachek, S. E. Lysenko, and V. N. Zenin, *Plasma Fusion Res.* **13**, 3402109 (2018).
32. M. P. Gryaznevich, J. Stöckel, G. van Oost, E. Del Bosco, V. Svoboda, A. Melnikov, R. Kamendje, A. Malaquias, G. Mank, R. Miklaszewski (Collaborations) the IAEA CRP and JEs teams, *Plasma Sci. Technol.* **22**, 055102 (2020).
33. G. A. Riggs, S. Nogami, M. Koepke, A. V. Melnikov, L. G. Eliseev, S. E. Lysenko, P. O. Khabanov, M. A. Drabinskiy, N. K. Kharchev, A. S. Kozachek, M. V. Ufimtsev, and (Collaboration) HIBP Team, *J. Plasma Phys.* **87**, 885870301 (2021).
34. A. V. Melnikov, M. A. Drabinskiy, L. G. Eliseev, P. O. Khabanov, N. K. Kharchev, and S. E. Lysenko, *46th EPS Conf. Plasma Physics, Milano, 8–12 July 2019*, Rep. P5.1090.
35. L. G. Eliseev, V. N. Zenin, S. E. Lysenko, and A. V. Melnikov, *J. Phys. Conf. Ser.* **907**, 012002 (2017).
36. L. G. Eliseev, S. E. Lysenko, A. V. Melnikov, L. I. Krupnik, A. S. Kozachek, V. N. Zenin, and (Collaboration HIBP team), *Probl. At. Sci. Technol. Ser. Plasma Phys.* **107**, 241 (2017).
37. L. G. Eliseev, A. V. Melnikov, S. E. Lysenko, P. O. Khabanov, V. N. Zenin, M. A. Drabinskiy, N. K. Kharchev, A. S. Kozachek, L. I. Krupnik, and (Collaboration) HIBP team, *Plasma Fusion Res.* **13**, 3402106 (2018).
38. A. V. Melnikov, J. M. Barcala, L. I. Krupnik, C. Hidalgo, L. G. Eliseev, A. A. Chmyga, J. Chercoles, A. D. Komarov, A. S. Kozachek, S. M. Khrebtov, J. Lopez, A. Molinero, G. Martin, J. L. de Pablos, S. V. Perfilov, and Yu. I. Tashev, *Fusion Eng. Des.* **96–97**, 724 (2015).
39. A. I. Zhezhera, A. Chmyga, G. N. Deshko, L. G. Eliseev, C. Hidalgo, S. M. Khrebtov, A. D. Komarov, A. S. Kozachek, L. I. Krupnik, A. V. Melnikov, J. L. de Pablos, and S. V. Perfilov, *Probl. At. Sci. Technol. Ser. Plasma Phys.* **107**, 261 (2017).
40. R. Sharma, P. O. Khabanov, A. V. Melnikov, N. K. Kharchev, E. Sánchez, A. A. Chmyga, G. N. Deshko, L. G. Eliseev, C. Hidalgo,

- S.M. Khrebtov, A.D. Komarov, A.S. Kozachek, L.I. Krupnik, A. Malaquias, B. van Milligen (Collaboration), *45th EPS Conf. on Plasma Physics, 2–6 July 2018, Prague, Czech Republic* (2018), Rep.P5.1061.
41. P.O. Khabanov, L.G. Eliseev, N.K. Khartchev, C. Hidalgo, A.S. Kozachek, A.D. Komarov, L.I. Krupnik, S.E. Lysenko, A.V. Melnikov, A.A. Chmyga, G.N. Deshko, S.M. Khrebtov, A.D. Komarov, A. Molinero, J.L. de Pablos, and (Collaboration TJ-II team), *Probl. At. Sci. Technol., Ser. Plasma Phys.* **118**, 317 (2018).
 42. K. J. McCarthy, N. Panadero, S. K. Combs, N. Tamura, E. Ascasibar, M. Calvo, A. Chmyga, T. Estrada, J. M. Fontdecaba, R. García, J. Hernández Sánchez, P. Khabanov, M. Liners, A. V. Melnikov, I. Pastor, B. Rojo, and (Collaborations) TJ-II team and LHD experiment group, *Plasma Phys. Control. Fusion* **61**, 014013 (2019).
 43. N. Winsor, J. L. Johnson, and J. M. Dawson, *Phys. Fluids* **11**, 2448 (1968).
 44. P. M. Schoch, K. A. Connor, D. R. Demers and X. Zhang, *Rev. Sci. Instrum.* **74**, 1846 (2003).
 45. G. R. McKee, R. J. Fonck, M. Jakubowski, K. H. Burrell, K. Hallatschek, R. A. Moyer, W. Nevins, D. L. Rudakov, and X. Xu, *Plasma Phys. Control. Fusion* **45**, A477 (2003).
 46. A. V. Melnikov, L. G. Eliseev, S. A. Grashin, A. V. Gudozhnik, S. E. Lysenko, V. A. Mavrin, S. V. Perfilov, S. V. Soldatov, D. A. Shelukhin, V. A. Vershkov, L. G. Zimeleva, M. V. Ufimtsev, L. I. Krupnik, A. D. Komarov, and A. S. Kozachek, *Proc. 30th EPS Conf. on Control. Fusion and Plasma Phys., St. Petersburg, ECA* (2003), v. 27A, Rep. P-3.114.
 47. P. H. Diamond, S.-I. Itoh, K. Itoh, and T. S. Hahm, *Plasma Phys. Control. Fusion* **47**, R35 (2005).
 48. A. V. Melnikov, V. A. Vershkov, L. G. Eliseev, S. A. Grashin, A. V. Gudozhnik, L. I. Krupnik, S. E. Lysenko, V. A. Mavrin, S. V. Perfilov, D. A. Shelukhin, S. V. Soldatov, M. V. Ufimtsev, A. O. Urazbaev, G. van Oost, and L. G. Zimeleva, *Plasma Phys. Control. Fusion* **48**, S87 (2006).
 49. A. Fujisawa, T. Ido, A. Shimizu et al. (Collaboration), *Nucl. Fusion* **47**, S718 (2007).
 50. B. Н. Зенин, *Computational nanotechnology* **1**, 108 (2018).
 51. G. D. Conway, A. I. Smolyakov, and T. Ido, *Nucl. Fusion* **62**, 013001 (2022).
 52. A. V. Melnikov, L. I. Krupnik, J. M. Barcala et al. (Collaboration), *Probl. At. Sci. Technol. Ser. Plasma Phys.* **107**, 237 (2017).
 53. А. В. Мельников, Л. Г. Елисеев, С. Е. Лысенко, С. В. Перфилов, Р. В. Шурыгин, Л. И. Крупник, А. С. Козачок, А. И. Смоляков, *Письма в ЖЭТФ* **100**, 627 (2014).
 54. A. V. Melnikov, L. G. Eliseev, S. V. Perfilov, S. E. Lysenko, R. V. Shurygin, V. N. Zenin, S. A. Grashin, L. I. Krupnik, A. S. Kozachek, R. Yu. Solomatin, A. G. Elfimov, A. I. Smolyakov, and M. V. Ufimtsev, *Nucl. Fusion* **55**, 063001 (2015).
 55. N. A. Kirneva, G. M. Asadulin, V. M. Bajkov et al. (Collaboration), *45th EPS Conf. on Plasma Physics, 2–6 July 2018, Prague, Czech Republic* (2018), Rep. P4.1081.
 56. N. A. Kirneva, K. A. Razumova, V. A. Krupin et al. (Collaboration), *44th EPS Conf. on Plasma Physics, 26–30 June 2017, Belfast, Northern Ireland (UK), ECA* (2017), Rep. P4.169.
 57. V. N. Zenin, G. F. Subbotin, L. A. Klyuchnikov, and A. V. Melnikov, *J. Phys. Conf. Ser.* **747**, 012005 (2016).
 58. L. G. Eliseev, V. P. Lakhin, S. E. Lysenko, A. V. Melnikov, S. V. Perfilov, and V. N. Zenin, *Proc. 43rd EPS Conf. on Plasma Physics* (Leuven, Belgium, 4–8 July 2016) *ECA*, v. 40A, Rep. P2.030.
 59. V. N. Zenin, A. V. Melnikov, L. G. Eliseev, A. S. Kozachek, L. I. Krupnik, S. E. Lysenko, and S. V. Perfilov, *Probl. At. Sci. Technol., Ser. Plasma Phys.* **94**, 269 (2014).
 60. V. N. Zenin, L. A. Klyuchnikov, A. V. Melnikov, A. Nemets, M. Nurgaliev, and G. Subbotin, *43rd EPS Conf. on Plasma Physics, 4–8 July 2016*, Rep. P2.024.
 61. В. Н. Зенин, Л. А. Ключников, А. В. Мельников, А. П. Немец, М. Р. Нургалиев, Г. Ф. Субботин, Д. А. Шелухин, *ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез* **39**(3), 91 (2016).
 62. V. N. Zenin, M. A. Drabinskij, L. G. Eliseev, S. A. Grashin, P. O. Khabanov, N. K. Kharchev, and A. V. Melnikov, *45th EPS Conf. on Plasma Physics, 2–6 July 2018, Prague, Czech Republic* (2018), Rep. P2.1090.
 63. V. N. Zenin, M. A. Drabinskij, L. G. Eliseev, S. A. Grashin, P. O. Khabanov, N. K. Kharchev, L. I. Krupnik, and A. V. Melnikov, *Probl. At. Sci. Technol., Ser. Plasma Phys.* **118**, 321 (2018).
 64. А. В. Мельников, Л. Г. Елисеев, С. Е. Лысенко, С. В. Перфилов, Д. А. Шелухин, В. А. Вершков, В. Н. Зенин, Л. И. Крупник, А. С. Козачек, Н. К. Харчев, М. В. Уфимцев, (Collaboration) группа “тяжелый пучок”, *ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез* **38**, 49 (2015).
 65. J. A. Alonso, E. Sanchez, I. Calvo, J. L. Velasco, K. J. McCarthy, A. Chmyga, L. G. Eliseev, T. Estrada, R. Kleiber, L. I. Krupnik, A. V. Melnikov, P. Monreal, F. I. Parra, S. Perfilov, A. I. Zhezhera, and (Collaboration) the TJ-II Team, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 185002 (2017).
 66. F. Castejon, A. Aguilera, E. Ascasibar, T. Estrada, C. Hidalgo, A. Lopez-Fraguas, M. Ochando, S. Yamamoto, A. Melnikov, L. Eliseev, and S. Perfilov, *Plasma Phys. Control. Fusion* **58**, 094001 (2016).

67. A. V. Melnikov, L. G. Eliseev, S. E. Lysenko, S. V. Perfilov, D. A. Shelukhin, V. A. Vershkov, V. N. Zenin, L. I. Krupnik, N. K. Kharchev, and (Collaboration) HIBP team, *J. Phys.: Conf. Ser.* **591**, 012003 (2015).
68. J. Seidl, J. Krbec, M. Hron et al. (Collaboration), *Nucl. Fusion* **57**, 126048 (2017).
69. D. Basu, M. Nakajima, A. V. Melnikov, D. McColl, A. Rohollahi, S. Elgriw, C. Xiao, and A. Hirose, *Nucl. Fusion* **58**, 024001 (2018).
70. A. V. Melnikov, L. G. Eliseev, A. V. Gudozhnik, S. E. Lysenko, V. A. Mavrin, S. V. Perfilov, L. G. Zimeleva, M. V. Ufimtsev, L. I. Krupnik, and P. M. Schoch, *Czech. J. Phys.* **55**, 349 (2005).
71. A. D. Gurchenko, E. Z. Gusakov, A. B. Altukhov, E. P. Selyunin, L. A. Esipov, M. Yu. Kantor, D. V. Kouprienko, S. I. Lashkul, A. Yu. Stepanov, and F. Wagner, *Plasma Phys. Control. Fusion* **55**, 085017 (2013).
72. C. A. de Meijere, S. Coda, Z. Huang, L. Vermare, T. Vernay, V. Vuille, S. Brunner, J. Dominski, P. Hennequin, A. Kramer-Flecken, G. Merlo, L. Porte, and L. Villard, *Plasma Phys. Control. Fusion* **56**, 072001 (2014).
73. Р. В. Шурыгин, А. В. Мельников, *Физика плазмы* **44**, 303 (2018).
74. D. Basu, M. Nakajima, A. V. Melnikov, J. J. Martinell, D. McColl, R. Singh, C. Xiao, and A. Hirose, *Nucl. Fusion* **60**, 094001 (2020).
75. L. G. Eliseev, N. V. Ivanov, A. M. Kakurin, S. E. Lysenko, S. G. Maltsev, A. V. Melnikov, S. V. Perfilov, and V. N. Zenin, *42nd EPS Conf. on Plasma Phys.*, 22–26 June 2015, Rep. P5.159.
76. L. G. Eliseev, N. V. Ivanov, and A. M. Kakurin, *Phys. Plasmas* **22**, 052504 (2015).
77. A. G. Elfimov, A. I. Smolyakov, A. V. Melnikov, and R. M. O. Galvão, *Физика плазмы* **42**, 434 (2016).
78. M. F. Bashir, A. I. Smolyakov, A. G. Elfimov, A. V. Melnikov, and G. Murtaza, *Phys. Plasmas* **21**, 082507 (2014).
79. В. П. Лахин, Е. А. Сорокина, В. И. Ильгисонис, Л. В. Коновальцева, *Физика плазмы* **41**, 1054 (2015).
80. A. V. Melnikov, C. Hidalgo, L. I. Krupnik, E. Ascasibar, A. Cappa, A. A. Chmyga, G. N. Deshko, M. A. Drabinskij, L. G. Eliseev, P. O. Khabanov, S. M. Khrebtov, N. K. Kharchev, A. D. Komarov, A. S. Kozachek, and S. E. Lysenko, *EPJ Web of Conf.* **149**, 03009 (2017).
81. V. F. Andreev, A. A. Borschevskij, V. V. Chistyakov, Yu. N. Dnestrovskij, E. P. Gorbunov, N. V. Kasyanova, S. E. Lysenko, A. V. Melnikov, T. B. Myalton, I. N. Roy, D. S. Sergeev, and V. N. Zenin, *Plasma Phys. Control. Fusion* **58**, 055008 (2016).
82. Р. В. Шурыгин, А. В. Мельников, *Физика плазмы* **45**, 240 (2019).
83. C. Gutierrez-Tapia, J. J. Martinell, D. Lopez-Bruna, A. V. Melnikov, L. Eliseev, C. Rodriguez, M. A. Ochando, F. Castejón, J. García, and B. P. van Milligen, *Plasma Phys. Control. Fusion* **57**, 115004 (2015).
84. А. В. Мельников, *Электрический потенциал в плазме тороидальных установок*, ред. С. Е. Лысенко, НИЯУ МИФИ, М. (2015).
85. А. В. Мельников, *Computational nanotechnology* **2**, 13 (2017).
86. A. V. Melnikov, *Electric Potential in Toroidal Plasmas*, Springer Nature, Switzerland AG (2019).
87. С. В. Серов, С. Н. Тугаринов, Л. А. Ключников, В. А. Крупин, M. von Hellermann, *Физика плазмы* **43**, 957 (2017).
88. В. А. Крупин, Л. А. Ключников, К. В. Коробов, А. Р. Немец, М. Р. Нургалиев, А. В. Горбунов, Н. Н. Науменко, В. И. Тройнов, С. Н. Тугаринов, Ф. В. Фомин, ВАНТ, Сер. Термоядерный синтез **37**(4), 60 (2014).
89. В. А. Крупин, Л. А. Ключников, М. Р. Нургалиев, А. Р. Немец, К. В. Коробов, И. А. Земцов, Н. Н. Науменко, С. Н. Тугаринов, ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез **39**(4), 68 (2016).
90. В. А. Крупин, А. Р. Немец, Л. А. Ключников, К. В. Коробов, М. Р. Нургалиев, Н. Н. Науменко, С. Н. Тугаринов, ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез **39** (1), 81 (2016).
91. И. А. Земцов, В. А. Крупин, М. Р. Нургалиев, Л. А. Ключников, А. Р. Немец, А. Ю. Днестровский, Д. В. Сарычев, ВАНТ, Сер. Термоядерный синтез **40**(2), 30 (2017).
92. X. Garbet, P. Mantica, C. Angioni et al. (Collaboration), *Plasma Phys. Control. Fusion* **46**, B557 (2004).
93. К. А. Разумова, С. Е. Лысенко, Н. Н. Тимченко, ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез **39**(4), 78 (2016).
94. К. А. Разумова, А. А. Борщевский, Е. П. Горбунов и др. (Collaboration), *Физика плазмы* **43**, 879 (2017).
95. Ю. Н. Днестровский, В. А. Вершков, А. В. Данилов, А. Ю. Днестровский, В. Н. Зенин, С. Е. Лысенко, А. В. Мельников, Д. А. Шелухин, Г. Ф. Субботин, С. В. Черкасов, *Физика плазмы* **42**, 197 (2016).
96. Ю. Н. Днестровский, В. А. Вершков, А. В. Данилов, А. Ю. Днестровский, В. Н. Зенин, С. Е. Лысенко, А. В. Мельников, Д. А. Шелухин, Г. Ф. Субботин, С. В. Черкасов, *Физика плазмы* **44**, 3 (2018).
97. Ю. Н. Днестровский, В. А. Вершков, А. В. Данилов, А. Ю. Днестровский, С. Е. Лысенко, А. В. Мельников, Г. Ф. Субботин, Д. Ю. Сычуглов, С. В. Черкасов, Д. А. Шелухин, *Физика плазмы* **45**, 207 (2019).
98. A. V. Danilov, Yu. N. Dnestrovskij, A. V. Melnikov, S. V. Cherkasov, L. G. Eliseev, A. Yu. Dnestrovskij, S. E. Lysenko, G. F. Subbotin, V. A. Vershkov, J. Havlíček, J. Urban, J. Stöckel, P. Bilková, P. Böhm,

- and M. Sos, *Proc. 45th EPS Conf. on Plasma Physics, 2–6 July 2018, Prague, Czech Republic*, ECA (2018), v. 42A, Rep. P5.1088.
99. L. Klyuchnikov, V. Krupin, K. Korobov, A. Nemets, M. Nurgaliev, A. Dnestrovskij, A. Barsukov, N. Naumenko, S. Tugarinov, S. Serov, V. Troinov, A. Gorbunov, and D. Denshchikov, *Proc. 42nd EPS Conf. on Plasma Physics, 22–26 June, 2015 Lisbon, Portugal*, ECA (2015), v. 39E, Rep. P5.161.
 100. L. A. Klyuchnikov, V. A. Krupin, M. R. Nurgaliev, A. R. Nemets, I. A. Zemtsov, D. V. Ryjakov, and D. V. Sarychev, *J. Phys. Conf. Ser.* **907**, 012009 (2017).
 101. I. A. Zemtsov, V. A. Krupin, M. R. Nurgaliev et al. (Collaboration), *44th EPS Conf. on Plasma Physics, 26–30 June 2017, Belfast, North. Ireland*, Rep. P4.175.
 102. I. A. Zemtsov, V. A. Krupin, M. R. Nurgaliev, L. A. Klyuchnikov, A. R. Nemets, A. Yu. Dnestrovskij, G. Asadulin, T. Myalton, D. Sarychev, V. Vershkov, S. Grashin, A. Borschegovskij, D. Sergeev, N. Solovyev, and A. Sushkov, *45th EPS Conf. on Plasma Physics, 2–6 July 2018, Prague, Czech Republic* (2018), Rep. P4.1086.
 103. M. R. Nurgaliev, V. A. Krupin, L. A. Klyuchnikov, A. R. Nemets, A. Yu. Dnestrovskij, I. A. Zemsov, D. V. Sarychev, A. A. Borschegovskij, D. S. Sergeev, N. A. Mustafin, N. N. Naumenko, and S. N. Tugarinov, *43rd EPS Conf. on Plasma Physics, 4–8 July 2016, Leuven, Belgium* (2016), Rep. P2.069.
 104. М. Р. Нургалиев, В. А. Крупин, Л. А. Ключников, А. Р. Немец, И. А. Земцов, А. Ю. Днестровский, Д. В. Сарычев, В. С. Лисица, С. А. Грашин, Д. В. Рыжаков, Д. С. Сергеев, Н. А. Мустафин, *ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез* **40**(2), 36 (2017).
 105. V. A. Krupin, L. A. Klyuchnikov, M. R. Nurgaliev, A. R. Nemets, I. A. Zemsov, A. V. Melnikov, T. B. Myalton, D. V. Sarychev, D. S. Sergeev, A. V. Sushkov, V. M. Trukhin, S. N. Tugarinov, and N. N. Naumenko, *Plasma Phys. Control. Fusion* **60**, 115003 (2018).
 106. V. A. Krupin, M. R. Nurgaliev, L. A. Klyuchnikov et al. (Collaboration), *Nucl. Fusion* **57**, 066041 (2017).
 107. S. A. Grashin, I. I. Arkhipov, V. P. Budaev, A. V. Karpov, L. A. Klyuchnikov, L. N. Khimchenko, A. V. Melnikov, D. V. Sarychev, N. S. Sergeev, and I. A. Zemsov, *Fusion Eng. Des.* **146**, 2100 (2019).
 108. M. Garcia-Munoz, S. E. Sharapov, M. A. van Zeeland et al. (Collaboration), *Plasma Phys. Control. Fusion* **61**, 054007 (2019).
 109. A. V. Melnikov, M. Ochando, E. Ascasibar et al. (Collaboration), *Nucl. Fusion* **54**, 123002 (2014).
 110. B. Zurro, J. L. Velasco, E. M. Hollmann, A. Baciero, M. A. Ochando, R. Dux, K. J. McCarthy, F. Medina, I. Pastor, R. J. Hajjar, J. M. Garcia-Regaña, D. López-Bruna, A. V. Melnikov, and L. G. Eliseev, Collaborations HIBP Team and TJ-II team, *42nd EPS Conf. on Plasma Physics, 22–26 June 2015, Lisbon, Portugal* (2015), Rep. P4.160.
 111. A. V. Melnikov, L. G. Eliseev, E. Ascasibar et al. (Collaboration), *Nucl. Fusion* **56**, 076001 (2016).
 112. F. Castejon, D. Alegre, A. Alonso et al. (Collaboration), *Nucl. Fusion* **57**, 102022 (2017).
 113. A. V. Melnikov, E. Ascasibar, A. Cappa et al. (Collaboration), *Nucl. Fusion* **58**, 082019 (2018).
 114. A. V. Melnikov, L. G. Eliseev, F. Castejón, C. Hidalgo, P. O. Khabanov, A. S. Kozachek, L. I. Krupnik, M. Liniers, S. E. Lysenko, J. L. de Pablos, S. E. Sharapov, M. V. Ufimtsev, and V. N. Zenin, Collaborations HIBP Group and TJ-II Team, *Nucl. Fusion* **56**, 112019 (2016).
 115. A. Rakha, M. J. Mantsinen, A. V. Melnikov, S. E. Sharapov, D. A. Spong, A. López-Fraguas, F. Castejón, and J. L. de Pablos, *45th EPS Conf. on Plasma Physics, 2–6 July 2018 Prague, Czech Republic* (2018), Rep. P4.1004.
 116. A. Rakha, M. J. Mantsinen, A. V. Melnikov, S. E. Sharapov, D. A. Spong, A. López-Fraguas, F. Castejón, A. Gutierrez-Milla, J. L. de Pablos, and X. Saez, *Nucl. Fusion* **59**, 056002 (2019).
 117. M. Gryaznevich, G. van Oost, J. Stöckel, R. Kamendje, B. Kuteev, A. Melnikov, T. Popov, and V. Svoboda, *Nucl. Fusion* **55**, 104019 (2015).
 118. T. Markovic, A. Melnikov, J. Seidl, L. Eliseev, J. Havlicek, A. Havranek, M. Hron, M. Imrisek, K. Kovarik, K. Mitosinkova, J. Mlynar, D. Naydenkova, R. Panek, J. Stokel, J. Varju, and V. Weinzettl, *44th EPS Conf. on Plasma Physics, June 26–30 2017, Belfast, North. Ireland*, ECA (2017), Rep. P5.140.
 119. T. Markovic, J. Seidl, A. Melnikov et al. (Collaboration), *42nd EPS Conf. Plasma Physics, 22–26 June 2015, Lisbon, Portugal* (2015), Rep. P4.104.
 120. A. V. Melnikov, T. Markovic, L. G. Eliseev et al. (Collaboration), *Plasma Phys. Control. Fusion* **57**, 065006 (2015).
 121. T. Markovic, A. Melnikov, J. Seidl, J. Havlicek, A. Havranek, M. Hron, M. Imrisek, K. Kovarik, K. Mitosinkova, J. Mlynar, D. Naydenkova, R. Panek, J. Varju, and V. Weinzettl, *43rd EPS Conf. Plasma Physics, 4–8 July 2016, Leuven, Belgium*, Rep. P5.005.
 122. L. G. Eliseev, A. V. Melnikov, E. Ascasibar et al. (Collaboration), *Phys. Plasmas* **28**, 072510 (2021).

Линейные и нелинейные эффекты в структурах на основе магнонных кристаллов и полупроводников

О. В. Матвеев¹⁾, Д. В. Романенко, М. А. Морозова

Саратовский государственный университет, 410012 Саратов, Россия

Поступила в редакцию 16 декабря 2021 г.

После переработки 25 января 2022 г.

Принята к публикации 11 февраля 2022 г.

В работе представлены результаты теоретического исследования распространения спиновых волн в гетероструктуре магнонный кристалл–полупроводник. Показано, что постоянный ток в полупроводнике позволяет управлять характеристиками запрещенных зон в такой структуре. Исследованы особенности распространения солитоноподобных импульсов и способов электрического управления количеством и скоростью таких импульсов.

DOI: 10.31857/S1234567822060052

Введение. Ферромагнитные материалы, в которых могут распространяться спиновые волны – важный объект исследования в радиофизике. Спиновые волны распространяются в микроволновом диапазоне, обладают малым затуханием и могут управляться внешним магнитным полем. Изучение электрических способов управления свойствами спиновых волн является актуальной задачей микроволновой электроники, поскольку электрическое управление обычно является более энергоэффективным и быстрым по сравнению с магнитным [1, 2].

В данной работе проведено исследование особенностей распространения спиновых волн в магнонном кристалле (МК) и влияния постоянного тока, прикладываемого к полупроводниковой пластине (ПП), нагруженной на МК. Ранее было показано, что спиновые волны могут быть усилены электрическим током в полупроводнике GaAs [3]. Кроме того, проводились теоретические исследования периодических структур с полупроводниками [4]. В настоящее время исследование взаимного влияния тока в полупроводниках и спиновых волн в пленках железо-иттриевого граната (ЖИГ) проводится с целью интеграции спин-волновых компонентов в полупроводниковые устройства [5]. Также проводились теоретические исследования нелинейных эффектов в неперiodической структуре на основе ферромагнитной пленки и полупроводника и была показана возможность формирования светлых солитонов на основе нелинейного уравнения Шредингера [6].

Целью данной работы было исследование возможностей управления с помощью постоянного элек-

трического тока положением брэгговских запрещенных зон в спектре спиновых волн в гетероструктуре магнонный кристалл–полупроводник (МК/ПП). Кроме того, было исследовано формирование и распространение целевых солитонов [7] и возможности электрического управления их количеством и скоростью.

Математическая модель. В работе исследуется магнонный кристалл на основе ферромагнитной пленки намагниченности M_0 с периодической системой канавок и столбиков с периодом L , глубиной канавок Δ и шириной b , высотой столбиков a . Магнонный кристалл нагружен полубесконечным слоем полупроводника (см. рис. 1). Полупроводниковый слой

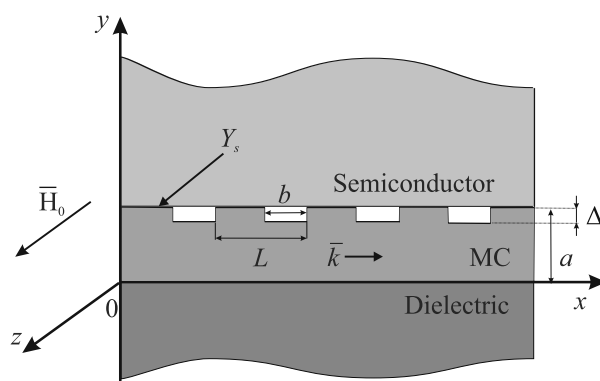


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема исследуемой структуры

обладает проводимостью σ , к слою полупроводника приложено электрическое поле с напряженностью E . При приложении электрического поля к полупроводнику, в нем протекает электрический ток, т.е. имеет

¹⁾e-mail: olvmatveev@gmail.com

место упорядоченное движение носителей зарядов со скоростью $v_0 = \mu_{cc}E$, где μ_{cc} – подвижность носителей заряда. Структура бесконечна в плоскости (x, z) . Внешнее магнитное поле $\vec{H}_0$ направлено вдоль оси z , таким образом, вдоль оси x в структуре распространяются поверхностные магнитостатические волны (ПМСВ).

Для получения дисперсионного уравнения ПМСВ в исследуемой структуре, вместо сшивания высокочастотных полей на границах слоев был использован метод сшивания их отношений, т.е. поверхностных магнитных проницаемостей. Введем поверхностную магнитную проницаемость в виде $\mu_s = -j \frac{k_0 b_y}{h_x}$, где b_y – нормальная компонента переменной магнитной индукции, h_x – тангенциальная компонента переменного магнитного поля, $k_0 = \omega/c$, ω – частота, c – скорость света, j – мнимая единица [8].

Подробный вывод дисперсионного уравнения с использованием метода сшивания магнитных проницаемостей приведен в работе [9]. Дисперсионное соотношение для ПМСВ в однородной ферромагнитной пленке толщины d , нагруженной слоем полупроводника с поверхностной проводимостью Y_s , имеет вид:

$$\mu(1 - jY_s) - [jY_s(\mu^2 - \mu_a^2) + \mu_a(1 + jY_s) - 1] \tanh kd = 0, \quad (1)$$

где $\mu = \frac{\omega_H(\omega_H + \omega_M) - \omega^2}{\omega_H^2 - \omega^2}$, $\mu_a = \frac{\omega_M \omega}{\omega_H^2 - \omega^2}$ – компоненты тензора магнитной проницаемости ферромагнитного слоя, $\omega_H = \gamma H_0$, $\omega_M = 4\pi\gamma M$ (в линейном случае продольная компонента намагниченности ферромагнитной пленки $M = M_0$), γ – гиромагнитное отношение. Поверхностная проводимость Y_s интерфейса ферромагнитная пленка – полупроводник может быть определена как:

$$Y_s = j \sqrt{1 + j \frac{\sigma}{c^2 k^2} (\omega - kv_0)}. \quad (2)$$

В длинноволновом приближении ($kd \ll 1$) уравнение (1) будет иметь следующий вид:

$$-\omega^2 + \omega_\perp^2 + Dkd = 0, \quad (3)$$

где $D = \frac{1}{1 - jY_s} (\omega_M(1 + jY_s)(\omega + \omega_H) - j\omega_M^2 Y_s)$, $\omega_\perp^2 = \omega_H(\omega_H + \omega_M)$.

Волновое уравнение может быть восстановлено из дисперсионного уравнения (3) с помощью замен $\omega \rightarrow j \frac{\partial}{\partial t}$, $k \rightarrow -j \frac{\partial}{\partial x}$:

$$\frac{\partial^2 m}{\partial t^2} = -\omega_\perp^2 m + \frac{S}{(1 - jY_s)} \left(\omega_M(1 + jY_s) \times \right. \\ \left. \times \left(S \frac{\partial}{\partial t} + j\omega_H \right) + j\omega_M^2 Y_s \right) d \frac{\partial m}{\partial x}, \quad (4)$$

где $m = m_x/M_0$ – нормированная высокочастотная компонента вектора намагниченности, m_x – проекция x высокочастотной компоненты вектора намагниченности, $S = \pm 1$ (знак “–” отвечает волне, распространяющейся в положительном направлении оси x , знак “+” – в отрицательном направлении оси x).

Для получения дисперсионного соотношения ПМСВ в периодической структуре было учтено, что величина d в (4) представляет собой периодическую функцию от продольной координаты x и имеет вид [10, 11]:

$$d = d_0 + \delta \cos(\pi x/L), \quad (5)$$

где $d_0 = a - \Delta + \Delta b/L$, $\delta = \frac{2\Delta}{\pi d_0} \sin(\pi b/L)$. В этом случае, уравнение (4) становится уравнением с периодически меняющимися параметрами. Для решения этого уравнения (при $\Delta \ll d_0$) воспользуемся методом связанных волн, основанном на предположении, что волны, распространяющиеся в прямом и встречном (волны, отраженные от пространственных неоднородностей решетки) направлении в периодической структуре, рассматриваются независимо, но периодическая структура обеспечивает их связь. Решение волнового уравнения (4) с учетом (5) может быть представлено в виде суммы пространственных гармоник прямых и отраженных волн [12]:

$$m = A \exp[j(\omega t - k_0 x)] + B \exp[j(\omega t + k_{-1} x)], \quad (6)$$

где A и B – медленно меняющиеся комплексные амплитуды огибающих прямых и отраженных волн, f – частота, $\omega = 2\pi f$, k_0 – волновое число нулевой гармоники прямой волны, k_{-1} – волновое число “–1” гармоники отраженной волны. Величины k_0 и k_{-1} связаны соотношением Брэгга: $k_{-1} = -k_0 + 2k_B$, где $k_B = \pi/L$ – волновое число Брэгга [12].

При высоких уровнях входной мощности ферромагнитная пленка представляет собой нелинейную среду. Основную роль в нелинейных процессах в ферромагнетиках играет увеличение угла прецессии магнитных моментов при увеличении мощности входного сигнала, что приводит к изменению продольной компоненты магнитного момента. Учтем нелинейность ферромагнитной пленки в следующем виде [13]:

$$M \approx M_0(1 - q|m|^2), \quad (7)$$

где $q = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\omega_H^2}{\omega_\perp^2} \right)$.

Подставляя (6) в систему волновых уравнений (4) и учитывая нелинейность согласно формуле (7), получим следующую систему:

$$\begin{aligned} j \left(\frac{\partial A}{\partial t} + V_0 \frac{\partial A}{\partial x} \right) + \eta_0 A + \kappa_0 B + \\ + \beta_0 (|A|^2 + 2|B|^2) A = 0, \\ j \left(\frac{\partial B}{\partial t} - V_{-1} \frac{\partial B}{\partial x} \right) + \eta_{-1} B + \kappa_{-1} A + \\ + \beta_{-1} (|B|^2 + 2|A|^2) B = 0, \end{aligned} \quad (8)$$

где $V_{0,-1} = D_{0,-1}(Y_s)d_0/2\omega$ – групповые скорости, $D_{0,-1} = \frac{1}{1-jY_s}(-jY_s\omega_M^2 + \omega_M(\omega_H \pm \omega)(1+jY_s))$, $\kappa_{0,-1} = \delta V_{0,-1}k_{0,-1}/2$ – параметры периодичности, $\beta_{0,-1} = -\frac{\omega_H\omega_M + 8D_{0,-1}(Y_s)d_0k_{0,-1}}{4\omega} + j\frac{\omega_M^2 d_0 k_{0,-1} Y_s}{2\omega(1-jY_s)}$ – параметры нелинейности, $\eta_{0,-1} = \frac{\omega_{\perp}^2 - \omega^2 + D_{0,-1}(Y_s)d_0k_{0,-1}}{2\omega}$ – частотная отстройка. Система уравнений (8) представляет собой систему нелинейных уравнений связанных волн и описывает динамику огибающих ПМСВ в структуре МК/ПП. Все коэффициенты в системе зависят от поверхностной проводимости, которая в свою очередь зависит от дрейфовой скорости носителей заряда.

Приравнявая определитель системы (8) к нулю, в линейном случае получим дисперсионное соотношение для ПМСВ в рассматриваемой структуре в следующем виде:

$$\begin{aligned} (-\omega^2 + \omega_{\perp}^2 + D_0 k d_0) (-\omega^2 + \omega_{\perp}^2 + D_{-1} k_{-1} d_0) = \\ = D_0 D_{-1} \cdot k k_{-1} \delta^2. \end{aligned} \quad (9)$$

Линейные эффекты. Результаты расчета дисперсионных характеристик по уравнению (9) для различных значений дрейфовой скорости электронов v_0 в слое ПП представлены на рис. 2а. На этом рисунке показаны дисперсионные характеристики прямой и отраженной ПМСВ при отсутствии связи между ними. Запрещенные зоны для ПМСВ в структуре МК/ПП образуются на пересечении дисперсионных характеристик этих типов волн (выделены темными кругами). Если скорость дрейфа электронов сонаправлена с ПМСВ, увеличение скорости дрейфа сдвигает запрещенную зону вниз по частоте.

При $v_0 = 0$ центральная частота запрещенной зоны соответствует точке пересечения синих кривых и равна ω_1 . Запрещенная зона в одиночном МК образуется при $k_B = \pi/L$ [7]. В структуре МК/ПП запрещенная зона формируется на волновых числах, отличных от брэгговского волнового числа Брэгга: при $k_0 = k_{-1} \neq k_B$. Это явление можно объяснить невзаимностью ПМСВ в исследуемой структуре. Для

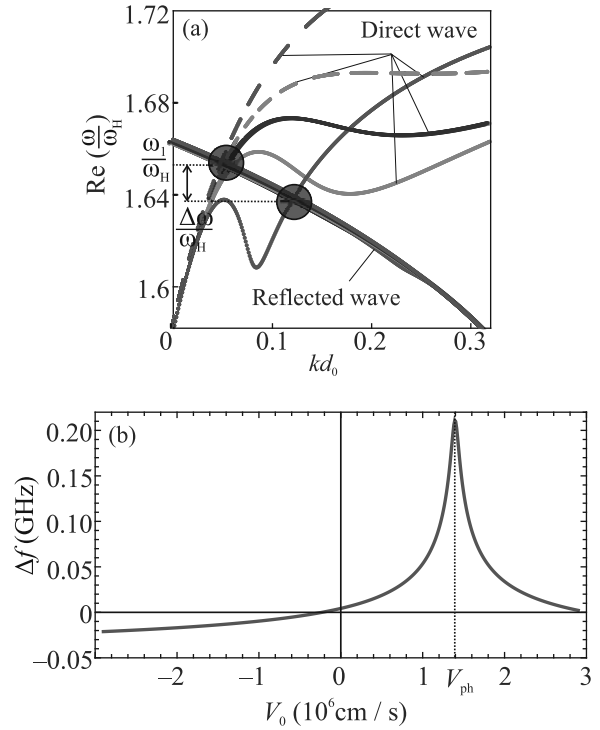


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Дисперсионные характеристики прямых и отраженных ПМСВ при различных значениях дрейфовой скорости v_0 в полупроводнике: $v_0 = 0$ (синяя сплошная кривая), $v_0 = 0.4 \cdot 10^6$ см/с (зеленая сплошная кривая), $v_0 = 1.3 \cdot 10^6$ см/с (красная сплошная кривая), $v_0 = -0.4 \cdot 10^6$ см/с (зеленая пунктирная кривая), $v_0 = -1.3 \cdot 10^6$ см/с (красная пунктирная кривая). (б) – Теоретическая зависимость сдвига запрещенной зоны от дрейфовой скорости

ПМСВ, распространяющейся в плоскости $x = a$ в прямом направлении, распределение магнитного потенциала сосредоточено на границе раздела между ферромагнитной пленкой и полупроводником, соответственно, эта волна более чувствительна к проводимости полупроводника. Формирование запрещенной зоны при волновом числе, отличном от брэгговского волнового числа, ранее рассматривалось в магнитных кристаллах с металлизацией [14, 15]. Как показано на рис. 2а, увеличение скорости дрейфа влияет только на поведение дисперсионных характеристик только прямых волн, распространяющихся по поверхности МК, контактирующей с ПП, но не на поведение отраженных волн, которые распространяются по противоположной поверхности, контактирующей с диэлектриком. Если скорость дрейфа сонаправлена с направлением ПМСВ ($v_0 > 0$), увеличение скорости дрейфа приводит к сдвигу запрещенной зоны вниз по частоте на величину $\Delta\omega$, если же скорость дрейфа противоположна направлению

ПМСВ ($v_0 < 0$), то положение запрещенной зоны не меняется.

Зависимость сдвига частоты запрещенной зоны от величины и направления скорости носителей заряда показана на рис. 2b. Видно, что этот сдвиг максимален при $v_0 = V_{ph}$, где V_{ph} – фазовая скорость ПМСВ. Из формулы (2) видно, что при $v_0 = V_{ph}$ имеем $Y_s = j$, т.е. реализуется предельный переход к структуре МК, нагруженной диэлектрической пластиной, сдвиг запрещенной зоны в этом случае максимален. Дисперсионное уравнение (9) является несимметричным относительно значения $v_0 = 0$ и нелинейным относительно v_0 , в результате, как видно из рис. 2b, в случае, когда направление скорости зарядов и ПМСВ сонаправлены ($v_0 > 0$), запрещенная зона сдвигается намного больше, чем в обратном случае (встречные волны ($v_0 < 0$)).

Нелинейные эффекты. Среди нелинейных эффектов в МК/ПП было исследовано формирование целевых солитонов [7]. Такие солитоны формируются при распространении сигнала в периодических структурах на частотах брэгговских запрещенных зон. Одной из основных особенностей целевых солитонов является то, что их скорость оказывается меньше скорости волны в однородных ферромагнитных структурах.

Рассмотрим особенности распространения импульсов амплитуды огибающей ПМСВ в исследуемой структуре. Система уравнений (8) решалась численно со следующими начальными и граничными условиями: $A(x, 0) = B(x, 0) = B(l, t) = 0$, $A(0, t) = A_0 f(t)$, где A_0 – амплитуда входного импульса, $f(t)$ – функция, которая определяет форму входного прямоугольного импульса (показан пунктирной линией на рис. 3), l – длина структуры. Введем коэффициент пропускания структуры МК/ПП в следующем виде: $T = \int_0^{t_{\max}} |A(l, t)|^2 dt / \int_0^{t_{\max}} |A(0, t)|^2 dt$, где $t_{\max}$ – время наблюдения.

Вставка к рис. 3 показывает зависимость коэффициента пропускания от частоты сигнала в трех случаях: линейном случае в отсутствие дрейфа зарядов ($|A_0|^2 = 1 \cdot 10^{-4}$, $v_0 = 0$), нелинейном случае в отсутствие дрейфа зарядов ($|A_0|^2 = 1.6 \cdot 10^{-3}$, $v_0 = 0$) и нелинейном случае при наличии дрейфа зарядов ($|A_0|^2 = 1.6 \cdot 10^{-3}$, $v_0 = 1.7 \cdot 10^5$ см/с). В линейном случае при малой амплитуде входного сигнала и отсутствии дрейфа зарядов центральная частота запрещенной зоны равна f_{lin} (черная кривая). При увеличении входной амплитуды происходит нелинейный сдвиг запрещенной зоны в низкочастотную область (зеленая кривая). Центральная частота запрещенной зоны оказывается равной f_{nl} . Отметим, что

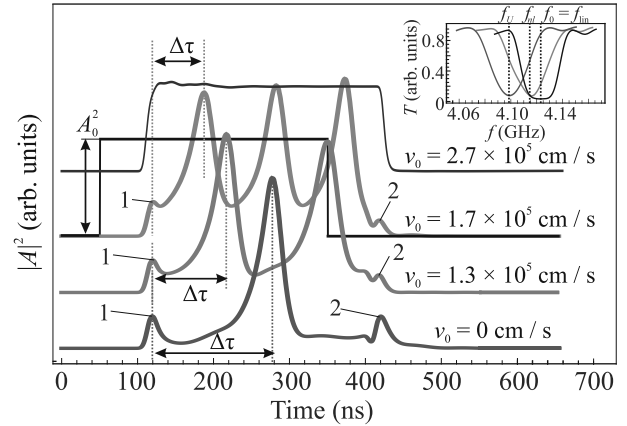


Рис. 3. (Цветной онлайн) Временные профили входного импульса (пунктирная кривая) и выходных импульсов (на длине $x = l$, сплошные кривые) при различных значениях дрейфовой скорости носителей заряда v_0 в полупроводнике. На вставке показаны зависимости коэффициента пропускания T от частоты входного сигнала при $|A_0|^2 = 1 \cdot 10^{-4}$ и $v_0 = 0$ (черная кривая), $|A_0|^2 = 1.6 \cdot 10^{-3}$ и $v_0 = 0$ (зеленая кривая), $|A_0|^2 = 1.6 \cdot 10^{-3}$ и $v_0 = 1.7 \cdot 10^5$ см/с (красная кривая)

эффект нелинейного сдвига запрещенной зоны ранее был описан теоретически для спиновых волн в однородных и связанных магнитных кристаллах без полупроводникового слоя [7, 16]. При увеличении скорости дрейфа зарядов запрещенная зона сдвигается еще ниже по частоте (красная кривая), центральная частота запрещенной зоны становится равной f_U .

Дисперсионные уравнения для прямой и отраженной волн в отсутствие связи (в этом случае правая часть уравнения (9) равна нулю) будут иметь следующий вид: $-\omega^2 + \omega_{\perp}^2 + D_{0,-1}k_{0,-1}d_0 = 0$. Условие фазового синхронизма, при котором взаимодействие прямой и отраженной волн приводит к формированию запрещенной зоны для ПМСВ, выполняется при $k_0 = k_{BG}$, которое может быть найдено из условия $D_0k_0 = D_{-1}k_{-1}$. Если частота входного сигнала лежит в малой окрестности центра запрещенной зоны, можно положить $k_0 = k_{-1}$, и тогда $V_{0,-1} = V$, $\kappa_{0,-1} = \kappa$, $\beta_{0,-1} = \beta$, $\eta_{0,-1} = \eta$. Для рассмотрения нелинейных эффектов и зависимости от скорости дрейфа зарядов, выберем частоту входного сигнала f_0 в центре запрещенной зоны в линейном случае ($f_0 = f_{lin}$), тогда $f_0 > f_{nl}$. В таком случае в системе уравнений (8) получаем, что $\eta \approx \omega_{BG} - \omega < 0$ – отстройка от центральной частоты запрещенной зоны при заданном значении скорости дрейфа зарядов.

Обсудим особенности прохождения импульсов в зависимости от скорости дрейфа зарядов в полупроводнике на основе численного решения системы (8).

На рисунке 3 показаны формы входного импульса (пунктирная кривая) и формы выходного импульса при различных значениях дрейфовой скорости. При амплитуде входного сигнала $|A_0|^2 = 1 \cdot 10^{-4}$ и $v_0 = 0$ (красная кривая) целевой солитон формируется между импульсами 1 и 2 (данные импульсы отвечают фронту и срезу входного прямоугольного импульса и являются следствием его дифференцирования). Видно, что увеличение дрейфовой скорости ($v_0 = 1.3 \cdot 10^5$ см/с, оранжевая кривая) приводит к тому, что формируется второй целевой солитон, при этом первоначальный целевой солитон оказывается ближе к импульсу 1, т.е. его скорость увеличивается. При дальнейшем увеличении скорости дрейфа ($v_0 = 1.7 \cdot 10^5$ см/с, зеленая кривая) также наблюдается увеличение скорости солитонов и их количества. Основную роль в данном случае играет увеличение отстройки $|\eta|$ частоты входного сигнала от частоты запрещенной зоны при увеличении дрейфовой скорости. При этом изменения групповой скорости, параметров периодичности и нелинейности при изменении дрейфовой скорости оказываются незначительными. Дальнейшее увеличение скорости дрейфа ($v_0 = 2.7 \cdot 10^5$ см/с, синяя кривая) приводит к тому, что выходной импульс получает прямоугольную форму, т.е. проходит без формирования целевых волитонов. Данный эффект объясняется тем, что при данной величине дрейфовой скорости запрещенная зона сдвигается вниз по частоте (см. красную кривую на вставке к рис. 3), и частота входного сигнала f_0 оказывается за пределами запрещенной зоны.

Заключение. Таким образом, в данной работе на основе теоретических исследований показана возможность электрического управления характеристиками запрещенных зон в структуре МК/ПП. Был обнаружен способ электрического управления параметрами солитонов, в частности, количеством импульсов и их скоростью с помощью тока в полупроводнике. Полученные в работе результаты позволяют рассматривать периодические гетероструктуры на основе ферромагнитных и полупроводниковых слоев в качестве перспективных кандидатов для интеграции магнанных элементов в полупроводниковую архитектуру. Исследования нелинейных эф-

фектов формирования и распространения солитонов важны в телекоммуникационных задачах сжатия импульсов и увеличения скорости передачи данных.

Работа выполнена при поддержке Министерства высшего образования и науки РФ в рамках выполнения государственного задания (проект #FSRR-2020-0005).

1. Al. A. Nikitin, An. A. Nikitin, A. V. Kondrashov, A. B. Ustinov, B. A. Kalinikos, and E. Lähderanta, J. Appl. Phys. **122**, 153903 (2017).
2. Y. K. Fetisov and G. Srinivasan, Appl. Phys. Lett. **88**, 143503 (2006).
3. S. Yamada, N. S. Chang, and Y. Matsuo, J. Appl. Phys. **53**, 5979 (1982).
4. Ю. В. Гуляев, С. А. Никитов, ФТТ **25**, 1446 (1983).
5. L. V. Lutsev, A. I. Stognij, N. N. Novitskii, V. E. Bursian, A. Maziewski, and R. Gieniusz, J. Phys. D: Appl. Phys. **51**, 355002 (2018).
6. A. S. Kindyak, A. D. Boardman, and V. V. Kindyak, J. Magn. Magn. Mater. **253**, 8 (2002).
7. S. E. Sheshukova, M. A. Morozova, E. N. Beginin, Y. P. Sharaevskii, and S. A. Nikitov, Phys. Wave Phenom. **21**, 304 (2013).
8. P. R. Emtage, J. Appl. Phys. **49**, 4475 (1978).
9. M. A. Morozova, D. V. Romanenko, A. A. Serdobintsev, O. V. Matveev, Yu. P. Sharaevskii, and S. A. Nikitov, J. Magn. Magn. Mater. **514**, 167202 (2020).
10. M. A. Morozova, S. V. Grishin, A. V. Sadovnikov, Yu. P. Sharaevskii, and S. A. Nikitov, IEEE Trans. Magn. **50**, 4007204 (2014).
11. M. A. Morozova, S. V. Grishin, A. V. Sadovnikov, D. V. Romanenko, Yu. P. Sharaevskii, and S. A. Nikitov, Appl. Phys. Lett. **107**, 242402 (2015).
12. Д. Маркузе, *Оптические волноводы*, Мир, М. (1974).
13. В. П. Лукомский, Укр. физ. журн. **23**, 134 (1978).
14. M. Mruczkiewicz, E. S. Pavlov, S. L. Vysotsky, M. Krawczyk, Yu. A. Filimonov, and S. A. Nikitov, Phys. Rev. B **90**, 174416 (2014).
15. V. D. Bessonov, M. Mruczkiewicz, R. Gieniusz, U. Guzowska, A. Maziewski, A. I. Stognij, and M. Krawczyk, Phys. Rev. B **91**, 104421 (2015).
16. A. B. Ustinov, A. V. Drozdovskii, and B. A. Kalinikos, Appl. Phys. Lett. **96**, 142513 (2010).

Двухслойный графен – Стоун-Уэльсовский графен: структура, устойчивость и межслоевая теплопроводность

А. И. Подливаев¹⁾

Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, 115409 Москва, Россия

Поступила в редакцию 31 января 2022 г.

После переработки 17 февраля 2022 г.

Принята к публикации 17 февраля 2022 г.

В рамках неортогональной модели сильной связи исследована межслоевая теплопроводность двух несимметричных двухслойных углеродных структур. Один слой первой структуры (эта структура впервые предложена в данной работе) состоит из графена, второй слой – из Стоун-Уэльсовского графена (недавно предложенного аллотропа углерода). Вторая несимметричная структура является двухслойным графеном, один слой которого состоит из изотопа углерода ^{12}C , второй – из более редкого изотопа ^{13}C . Показано, что при криогенных температурах межслоевая теплопроводность несимметричных структур более чем на порядок величины ниже, чем у их симметричных аналогов – двухслойного графена и двухслойного Стоун-Уэльсовского графена с одинаковым изотопным составом. Высокая межслоевая теплопроводность симметричных структур по сравнению с несимметричными обусловлена резонансным взаимодействием фононных подсистем отдельных слоев (фононные спектры отдельных слоев в симметричных структурах совпадают, а в несимметричных – различаются). Показано, что в ненапряженной структуре графен – Стоун-Уэльсовский графен графеновый слой является плоским, а слой Стоун-Уэльсовского графена – гофрированным. При двухосном растяжении этой структуры на 5 % оба слоя становятся плоскими. Для ненапряженной и деформированной структуры определены энергия межслоевого притяжения, межслоевое расстояние, энергия активации параллельного сдвига слоев и модуль упругости при вертикальном сжатии.

DOI: 10.31857/S1234567822060064

Введение. Создание монослоя графита – графена [1] с высокой прочностью [2] и проводимостью [3] стимулировало активный поиск других планарных структур на основе углерода. Были синтезированы графан [4], графин [5], графдин [6], алмаз на подложке SiC (0001) [7], фторированный алмаз (F-алмаз) на подложке CuNi (111) [8], а также квазидвумерный композит полианилина и оксида графена [9]. В рамках различных моделей межатомного взаимодействия определен ряд устойчивых двумерных аллотропов углерода. Только в прошедшем 2021 г. были предложены металлический R-10 графен [10], углеродный монослой, обозначенный авторами [11] как 123-E8Y24-1, предсказаны две $sp^2 + sp^3$ -гибридизованные структуры с уникальными электронными свойствами [12], РНН-графен [13] и другие. Наибольшей термодинамической устойчивостью из множества однослойных углеродных структур обладают предсказанные в 2019 г. азуграфен [14] и Стоун-Уэльсовский графен (Stone–Wales Graphene, SWG) [15]. Структура SWG может быть получена из обычного графена путем создания в нем

множества периодически расположенных дефектов Стоуна–Уэльса (Stone–Wales, SW) [16]. Дефект SW образуется в графене поворотом C–C связи на 90° , при этом из четырех шестиугольных колец образуется пара пяти и пара семиугольных колец (см. рис. 1). Азуграфен менее энергетически выгоден по сравнению с SWG. Энергия связи азуграфена определена в рамках теории функционала плотности, на 16 мэВ/атом выше аналогичной величины SWG. В свою очередь, энергия связи SWG, определенная из первых принципов [15], только на 149 мэВ/атом выше энергии графена. Аналогичная величина, определенная в работе [17] в рамках неортогональной модели сильной связи [18], равна 161 мэВ/атом.

Помимо однослойных, внимание исследователей привлекают двухслойные планарные углеродные структуры. В 2006 году был синтезирован двухслойный графен (Bilayer Graphene, BG) с управляемой шириной запрещенной зоны [19]. Двухслойная углеродная структура, образованная двумя графеновыми плоскостями, повернутыми друг относительно друга на 1.1° и отнесенная авторами работы [20] к категории “странных металлов”, обладает необычной температурной зависимостью проводимости при

¹⁾e-mail: AIPodlivayev@mephi.ru

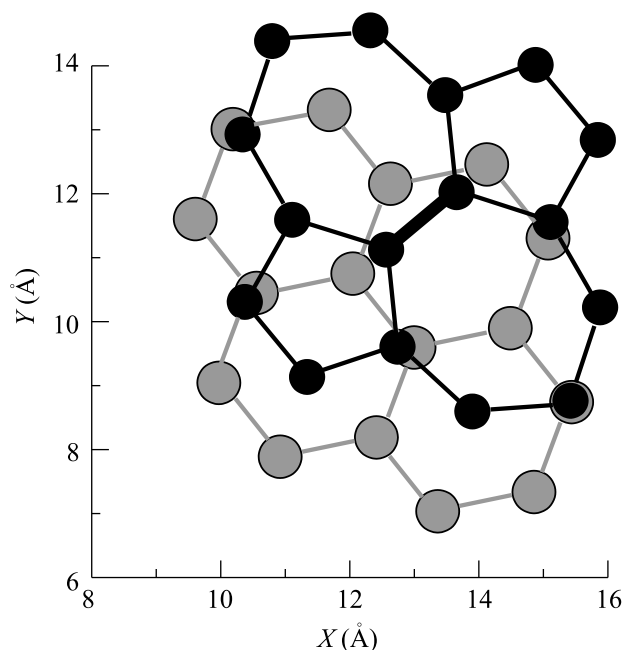


Рис. 1. Элементарная ячейка структуры двухслойного кристалла UBG. Серыми шариками обозначена нижняя графеновая плоскость, черными – Стоун-Уэльсовский графен

низких температурах. Кроме того, она является сверхпроводником с критической температурой $T_c = 1.7\text{ K}$ [21]. В работах [22, 23] отмечена возможность применения BG при создании нового типа полевых транзисторов. Возможно также использование BG в качестве датчика влажности [24]. В работе [25] исследованы свойства перфорированного BG с межслоевыми перемычками, а в работе [26] – проводимость BG лент. В работе [27] определялась межслоевая теплопроводность BG.

Двухслойная структура может быть сформирована не только из графена, но также на основе его аллотропов и производных. Сильная ковалентная связь между слоями гидрогенизированного графена предсказана в структуре, названной авторами работы [28] диаманом. Азуграфен и SWG также способны формировать двухслойное вещество [14, 29]. В отличие от диамана, межслоевая связь в двухслойных азуграфене и Стоун-Уэльсовском графене (Bilayer Stone-Wales Graphene, BSWG) слабая (аналогично BG).

В настоящей работе будет исследована несимметричная двухслойная углеродная структура, один слой которой образован графеном, второй – Стоун-Уэльсовским графеном (Unsymmetrical Bilayer Graphene, UBG). Перспективность исследования графена с плотно расположенным на нем множеством дефектов Стоуна-Уэльса отмечается в

работе [30]. Однако в этой же работе указывается на сложность создания таких дефектов по сравнению, например, с дивакансиями графена. Насколько известно автору данной работы, к настоящему времени не было предложено практически реализуемых методик создания структуры. Надежду на синтез SWG дает не только аномально высокая энергия связи этой структуры, которая по термодинамической устойчивости только незначительно уступает графену. Созданию двухслойной структуры UBG может способствовать сочетание следующих факторов: во-первых, это возможность управляемого одноосным сжатием BG формирования в этой структуре гофров желаемого направления [27]. Во-вторых, предпочтительная адсорбция атомов водорода выпуклой поверхностью графенового гофра. Эта тенденция следует из результатов экспериментальной работы [31], где методами сканирующей туннельной микроскопии выявлены локальные адсорбатные структуры односторонне гидрированного графена на подложке SiC. Водород собирался в устойчивые кластеры преимущественно на выступающих (за счет профиля подложки) участках графеновой поверхности. И, в-третьих, локализованный в желаемых областях адсорбированный водород может выполнять роль катализатора, заметно понижающего энергию активации возникновения дефектов SW. Так, в рамках неортогональной модели сильной связи энергия активации формирования дефектов Стоуна-Уэльса в чистом графене равна 8.03 эВ . Адсорбция атома водорода на дефект Стоуна-Уэльса понижает эту величину до 6.51 эВ [32], что соответствует расчетам, проведенным в рамках DFT (6.8 эВ [33]). К объединению SW-дефектов в плотные упорядоченные скопления может приводить также взаимное притяжение этих дефектов на расстояниях, превышающих размеры элементарной ячейки графена и отталкивание на малых [34].

Методы расчета. Для описания межатомного взаимодействия в работе выбран потенциал на основе неортогональной модели сильной связи [18], менее точной, чем методы *ab initio*, но требующей меньших затрат компьютерных ресурсов. Программная реализация на языке FORTRAN межатомного потенциала [18] опубликована в работе [35]. Результаты данного подхода хорошо согласуются с результатами теории функционала плотности, для структур, содержащих атомы углерода в состояниях с различными типами гибридизации [36]. Данная модель успешно применялась для исследования множества систем, состоящих из атомов углерода, водорода, азота и кислорода (см., например, работы [17, 27, 29, 37–39] и

ссылки в них). Адекватность данного подхода признается также в работе [40]. Незначительная модификация этого потенциала, проведенная в работе [27], позволила учитывать ван-дер-ваальсовое межслоевое взаимодействие в графите и двухслойном графене. Эта модификация применяется и в настоящей работе.

На рисунке 1 представлен фронтальный вид элементарной ячейки UBG. Большими серыми шариками обозначены атомы графеновой плоскости, а маленькими черными – атомы SWG. Жирной линией выделена С-С связь, поворот которой на угол 90° переводит верхний слой Стоун-Уэльсовского графена в обычный графен.

Все детали методики численного исследования структуры UBG аналогичны применяемому в работах [27] и [29] для BG и BSWG, соответственно. Это позволяет провести корректное сопоставление характеристик всех трех двухслойных структур. Расчетный кластер UBG состоит из $2 \times 2 = 4$ элементарных ячеек и содержит 128 атомов. Граничные условия в плоскости (X, Y) периодические, а в направлении вертикальной оси Z – свободные. Ячейка периодичности образована двумя векторами $\mathbf{V}_1 = (X_1, Y_1, 0)$ и $\mathbf{V}_2 = (X_2, Y_2, 0)$. Для определения стабильной конфигурации UBG проводилась градиентная минимизация энергии связи структуры по координатам атомов и размерам периодической расчетной ячейки. В получившейся равновесной структуре определялось межплоскостное расстояние и модуль упругости $C_{ZZ} = \partial^2 E_b / \partial \varepsilon_{ZZ}^2$, где E_b – энергия связи UBG (эВ/атом), ε_{ZZ} – нормальная диагональная компонента тензора деформации. Аналогично работам [27, 29], в начальный момент времени графеновая плоскость имела нулевую температуру, а SW-графен нагревался до 77, 300, 1000, 3000, 5000 и 7000 К. Полученные в рамках неортогональной модели сильной связи температуры плавления однослойного графена и SWG равны 5100 и 3800 К соответственно [17, 39]. Принимая во внимание более низкую, чем в графене температуру плавления SWG, для температур 5000 и 7000 К возможны несколько вариантов поведения структуры UBG. Если время термического распада слоя SWG меньше, чем время теплообмена между слоями UBG, то следует ожидать реализации этого распада. В противном случае из-за перераспределения тепловой энергии между слоями температура “горячего” слоя упадет в ~ 2 раза до 2500 и 3500 К и плавление станет невозможным. В таком случае можно ожидать расслоение структуры или параллельный сдвиг слоев. Динамическое моделирование, проводимое в настоящей работе и позволяет опре-

делить – какой из перечисленных сценариев реализуется. Неоднородный нагрев может быть получен, например, при пропускании импульсного тока через верхний слой, в случае, если нижний “холодный” слой имеет пониженную проводимость из-за функционализации (наличие областей, допированных фтором [41, 42], хлором [43] или водородом [5], что может блокировать протекание тока по этому слою).

Имитация нагрева проводилась соответствующим стохастическим смещением атомов SWG и придания им случайных скоростей, подчиняющихся распределению Максвелла. Динамическое моделирование UBG проводилось в рамках микроканонического ансамбля [44]. Временная эволюция движения атомов рассчитывалась методом Верле с шагом, равным 0.3 фс.

Характерное время τ установления общей для обоих слоев UBG равновесной температуры вследствие межплоскостной теплопередачи определялось алгоритмом экспоненциальной интерполяции временной зависимости кинетических энергий обоих слоев. Детально алгоритм интерполяции представлен в работе [27]. Для каждой температуры рассчитывалось четыре варианта движения системы, различающихся начальным стохастическим распределением скоростей и смещений атомов, что позволяет определить дисперсию изучаемых физических величин.

Результаты и обсуждение. Статические характеристики. Градиентная релаксация потенциальной энергии E_b по координатам всех атомов и по координатам векторов $\mathbf{V}_1 = (X_1, Y_1, 0)$ и $\mathbf{V}_2 = (X_2, Y_2, 0)$, образующих ячейку периодичности, определила геометрические и энергетические характеристики структуры UBG (см. табл. 1 и 2). То, что полученная конфигурация является локальным минимумом энергетической поверхности кластера в пространстве координат атомов, подтверждается фоновым спектром данной структуры, в котором отсутствуют мнимые частоты. Более того, полученная структура обладает минимальной потенциальной энергией из всех конфигураций, получаемых при параллельном смещении в плоскости (X, Y) SW-графена над графеновой плоскостью (см. рис. 2).

На рисунке 2 наблюдаются несколько локальных минимумов (черные области), энергия которых совпадает с исходной, что связано с периодичностью изучаемой структуры. На этом рисунке светлой пунктирной линией обозначена одна из оптимальных траекторий скольжения SW-графена по нижней графеновой плоскости. При движении по этой траектории отклонение потенциальной энергии от исход-

Таблица 1. Геометрические характеристики равновесных и напряженных конфигураций двухслойного графена BG [27], двухслойного Стоун-Уэльсовского графена BSWG [29] и несимметричного двухслойного графена UBG

$\epsilon_{XX}, \epsilon_{YY}$		$\mathbf{V}_1 = (X_1, Y_1)$ (Å)	$\mathbf{V}_2 = (X_2, Y_2)$ (Å)	d (Å)
0	BSWG	(13.48709, 0)	(3.68070, 13.13365)	3.31
	BG	(13.24146, 0)	(1.91756, 13.101229)	3.35
	UBG	(13.25552, 0)	(2.56063, 13.00585)	3.70
0.05	BSWG	(14.16145, 0)	(3.86474, 13.79033)	3.34
	BG	(13.90353, 0)	(2.01344, 13.75629)	3.33
	UBG	(13.91829, 0)	(2.68866, 13.65614)	3.34

Таблица 2. Энергетические характеристики равновесных и напряженных конфигураций двухслойного графена BG [27], двухслойного Стоун-Уэльсовского графена BSWG [29] и несимметричного двухслойного графена UBG.

$\epsilon_{XX}, \epsilon_{YY}$		E_{lay} (мэВ/атом)	E_{shift} (мэВ/атом)	C_{ZZ} (эВ/атом)
0	BSWG	23.8	1.9	1.73
	BG	25	2.8	2.08
	UBG	19.4	0.7	0.67
0.05	BSWG	21.6	1.4	1.45
	BG	23	1.8	2.04
	UBG	22.3	1.2	1.66

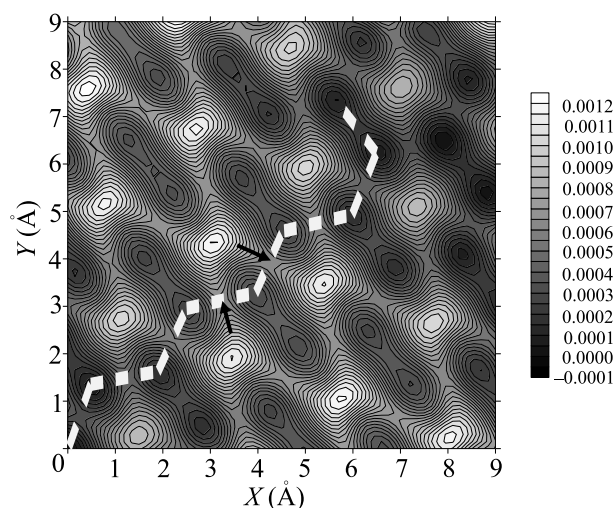


Рис. 2. Линии уровней потенциальной энергии (эВ/атом) при смещении верхнего слоя (Стоун-Уэльсовский графен) относительно нижнего (графен) на вектор трансляции с координатами (X, Y) . Уровни отсчета энергии и координат вектора трансляции ведутся от равновесной структуры UBG. Интервал между линиями – 0.05 мэВ/атом

ной не превышает величины $E_{\text{shift}} = 0.7$ (мэВ/атом). Сплошными черными стрелками на траектории отмечены точки максимальных энергетических барьеров, препятствующих скольжению.

Величина d , представленная в табл. 1 – межслоевое расстояние в структуре UBG определяется следующим образом:

$$d = \sum_{i=1}^{64} (Z_{\text{SWG}i} - Z_{gi}) / 64,$$

где Z_{gi} и $Z_{\text{SWG}i}$ – вертикальные координаты атомов графеновой плоскости и SWG соответственно. Величина E_{lay} , представленная в табл. 2, – это энергия межслоевого взаимодействия, которая определяется следующим образом:

$$E_{\text{lay}} = -(E_{\text{UBG}} - E_G - E_{\text{SWG}}) / 64,$$

где E_{UBG} – потенциальная энергия структуры UBG, состоящей из 128 атомов. E_G и E_{SWG} – потенциальные энергии уединенных ячеек графена и SWG соответственно, каждая из которых включает 64 атома.

Исследованы также характеристики структуры с двухосным растяжением на 5% (диагональные компоненты тензора деформаций $\epsilon_{XX} = \epsilon_{YY} = 0.05$). Результаты расчетов деформированной структуры также представлены в табл. 1 и 2. Данные этих таблиц показывают, что в ненапряженной структуре UBG межслоевое расстояние d существенно больше, а вертикальная жесткость, энергия межслоевого притяжения и энергия активации скольжения (величины C_{ZZ} , E_{lay} и E_{shift} соответственно) меньше, чем в ненапряженных структурах BG и BSWG. Это различие объясняется гофрированной формой верхнего листа SWG в структуре UBG (см. рис. 3а и б). Возникновение гофра на SWG и его отсутствие на графене следует из различия двумерных плотностей ненапряженных листов графена и SWG. Действительно, размеры ячейки периодичности BG меньше, а BSWG – больше, чем в UBG (см. компоненты X векторов $\mathbf{V}_1$ и $\mathbf{V}_2$ в табл. 1). Вследствие этого графеновый слой в составе UBG оказывается растянутым, а SWG слой – сжатым. Сжатие приво-

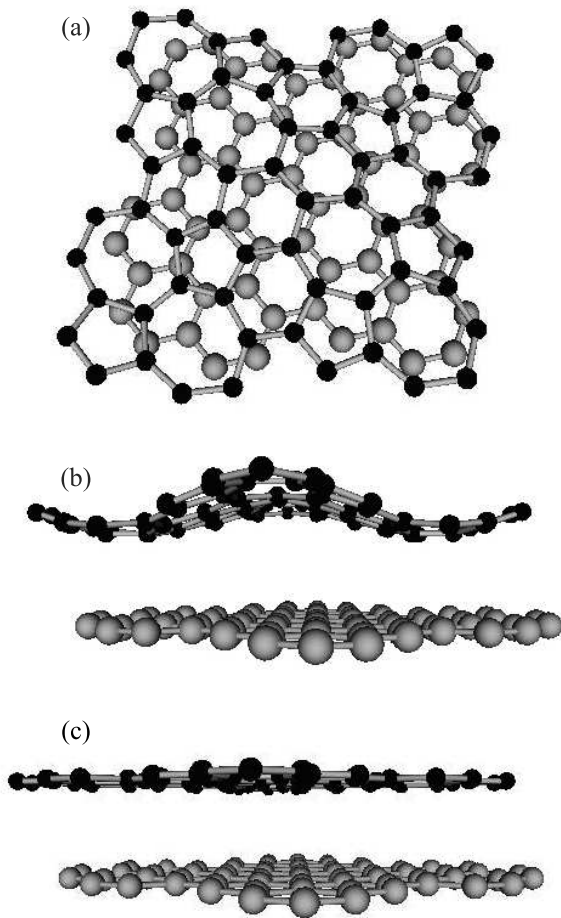


Рис. 3. Структура UBГ. Равновесная структура, фронтальный вид (а), профиль (б). Деформированная (двухосное растяжение на 5 %) структура, профиль (с)

дит к возникновению гофра не только в однослойной, но и в двухслойных структурах графена и SWG [27, 29]. При двухосном растяжении UBГ на 5 % растянутыми оказываются обе части данной структуры (см. компоненты X векторов $\mathbf{V}_1$ и $\mathbf{V}_2$ в табл. 1 при $\epsilon_{XX} = \epsilon_{YY} = 0.05$). В этом случае верхняя часть структуры становится плоской (см. рис. 3с), а величины d , C_{ZZ} , E_{lay} и E_{shift} отличаются от аналогичных в BG и BSWG значительно слабее. Иная картина наблюдается при изучении динамических процессов перераспределения тепла в неоднородно нагретых структурах.

Результаты и обсуждение. Динамические характеристики. Рассчитанное методом молекулярной динамики характерное время τ термализации в структурах BG, BSWG и UBГ представлено в табл. 3, а также на рис. 4а и б. При криогенной температуре время термализации τ в структуре UBГ существенно превосходит аналогичную величину в

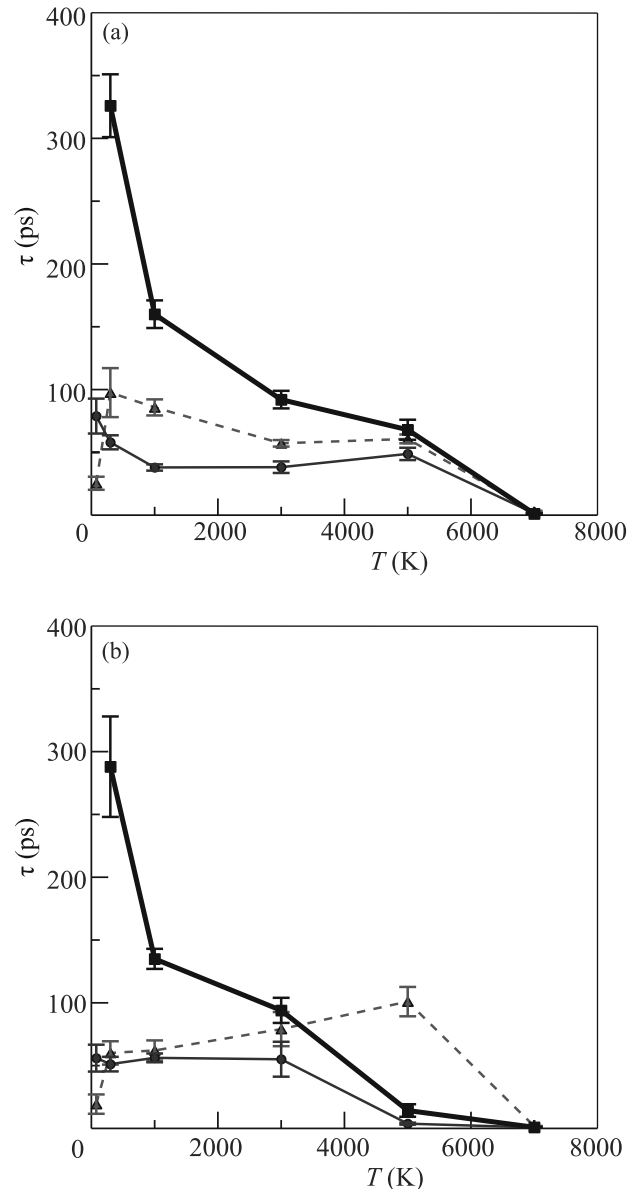


Рис. 4. (Цветной онлайн) Температурные зависимости времени межплоскостной теплопередачи в структуре UBГ (жирные сплошные линии, квадраты), в структуре BG (красные тонкие пунктирные линии, треугольники) и в структуре BSWG (синие тонкие сплошные линии, кружки). Ненапряженный кристалл (а). Двухосно-растянутый (на 5 %) кристалл (б)

структурах BG, BSWG. По этой причине на графиках 4а и б не были нанесены данные структуры UBГ при $T = 77$ К. В оставшемся температурном интервале время термализации τ структуры UBГ также превалирует при температурах ниже температуры плавления нагретого слоя.

Аномально высокое значение времени термализации τ ненапряженной структуры UBГ не может быть

Таблица 3. Время межслоевого теплообмена τ (пс) двухслойного графена BG [27], двухслойного Стоун-Уэльсовского графена BSWG [29] и несимметричного двухслойного графена UBG

$\varepsilon_{XX}, \varepsilon_{YY}$	T (K)	77	300	1000	3000	5000	7000
0	BSWG	78.9 ± 13.9	58.0 ± 5.6	38 ± 2.5	38.2 ± 4.6	48.8 ± 4.9	$1.4 \pm 0.3^*$
	BG	25.4 ± 5.2	97.6 ± 19.5	85.8 ± 6.4	57.2 ± 2.6	60.7 ± 3.5	$2.7 \pm 0.8^*$
	UBG	1218 ± 125	326 ± 25	160 ± 11	92 ± 7	68 ± 8	$1.13 \pm 0.31^*$
0.05	BSWG	56.0 ± 10.7	51.2 ± 5.8	56.2 ± 3.5	55.1 ± 13.9	$3.8 \pm 0.8^*$	$0.8 \pm 0.15^*$
	BG	19.4 ± 7.7	60.1 ± 9.3	62.1 ± 8	79.1 ± 13.6	101 ± 11.7	$1.7 \pm 0.3^*$
	UBG	1087 ± 152	288 ± 40	135 ± 8	94 ± 10	$14.3 \pm 5^*$	$0.96 \pm 0.28^*$

* – Отмечены варианты расчетов, в которых наблюдалось плавление “горячей” плоскости.

обусловлено гофрированным характером SWG, поскольку в деформированной структуре гофры отсутствуют (см. рис. 3с), а величина τ при низких температурах остается высокой. Наиболее вероятной причиной этого эффекта может быть резонансное взаимодействие фононных подсистем слабо связанных “горячей” и “холодной” частей двухслойных структур. Фононный спектр отдельного верхнего слоя симметричных структур BG и BSWG идентичен спектру отдельного нижнего слоя. Межслоевое ван-дер-ваальсовое взаимодействие является слабым по сравнению с ковалентными связями внутри слоя. Поэтому на начальном этапе, когда энергия верхнего слоя превосходит энергию нижнего, “горячий” слой может рассматриваться как генератор, а “холодный” – как приемник фононов. Интенсивность передачи энергии в таком случае максимальна при условии резонанса – совпадения частот приемника и передатчика. Фононный спектр отдельного верхнего слоя несимметричной структуры UBG существенно отличается от спектра отдельного нижнего слоя (см. рис. 5). Резонанс между фононными подсистемами отсутствует, что снижает интенсивность передачи тепловой энергии (увеличивает время теплообмена τ).

Для подтверждения резонансного характера межслоевой теплопроводности в симметричных двухслойных структурах было определено время термализации τ структуры ненапряженного двухслойного графена с неоднородным изотопным составом. Были рассчитаны 4 варианта релаксации тепла в двухслойном недеформированном графене с начальным нагревом “горячей” плоскости до температуры 77 К. Начальные условия тепловых смещений и скоростей атомов в этих вариантах совпадали с теми, которые применялись в работе [27]. Однако, если в работе [27] обе графеновые плоскости состояли из изотопа углерода ^{12}C , то в данном случае из этого изотопа состояла только “горячая” плоскость, а “холодная” была образована более редким изотопом ^{13}C . Увеличение массы пропорционально уменьшило фононные частоты от-

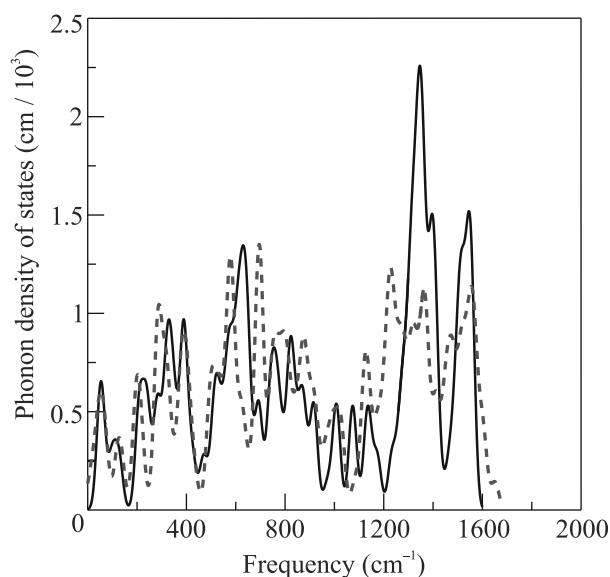


Рис. 5. (Цветной онлайн) Нормированные плотности фононных состояний графена (черная сплошная линия) и SW-графена (красная пунктирная линия). Плотность фононных состояний графена, полученная в данной работе в рамках неортогональной модели сильной связи для кластера, состоящего из 64 атомов ^{12}C , качественно соответствует полученной в работе [45] в рамках теории функционала плотности

дельной нижней плоскости на $\sim 4\%$, что нарушило условие резонанса между фононными подсистемами двух слоев. Проведенное моделирование показало, что в этом случае время межслоевого теплообмена $\tau = 564 \pm 93$ пс, что в ~ 22 раза выше, чем в структуре BG с однородным изотопным составом (см. табл. 3). Предположение о резонансном характере взаимодействия фононных подсистем в симметричных структурах может также объяснить уменьшение различия между величинами τ в UBG и симметричных структурах, которое наблюдается с ростом температуры (см. данные табл. 3 и рис. 4). Действительно, в симметричных структурах одновременно с резонансным теплообменом между модами с одинаковой частотой присутствует нерезонансный

теплообмен между модами с различными частотами, который обусловлен ангармоническими процессами. При увеличении температуры растет и вклад в теплообмен ангармонических процессов, для которых строгое совпадение фононных частот не требуется. Этот механизм нивелирует различие между симметричной резонансной и несимметричной системами при температурах до 3000 К включительно. При температуре 7000 К в напряженной и ненапряженной структурах, а также при температуре 5000 К в напряженной структуре UBG определяющую роль в межслоевой теплопроводности играет плавление “горячего” слоя. Характер плавления SW-графена в структуре аналогичен представленному в работах [17, 27, 29, 34, 39] и заключается в образовании многоатомных колец, которые в дальнейшем трансформируются в длинные карбиновые цепочки из *sp*-гибридизованных атомов. После плавления о двухслойной структуре вряд ли можно говорить, хотя присоединения атомов “горячей” плоскости к “холодной” в структуре UBG не отмечалась, как и при плавлении структур BG и BSWG [27, 29].

Неожиданным было поведение ненапряженной структуры UBG при температуре 5000 К. Во всех 4-х вариантах плавление отсутствует, но присутствует, во-первых, параллельный сдвиг плоскостей друг относительно друга, и, во-вторых, интенсивный отжиг дефектов Стоуна–Уэльса вплоть до их полного исчезновения. Вследствие этого отжига структура UBG трансформируется в структуру BG, из-за чего времена межслоевого теплообмена исходно различающихся структур совпадают (см. табл. 3). В температурном интервале 300–3000 К сдвиг плоскостей наблюдается, но отжиг дефектов за время термализации не отмечается. При температуре 77 К сдвиг отсутствует. В напряженной структуре UBG сдвиг наблюдается в четырех вариантах при $T = 3000$ К и только в одном при $T = 1000$ К, а при более низких температурах сдвиг отсутствует. Различие в температурных интервалах возникновения сдвига в напряженном и ненапряженном кристаллах UBG объясняется различной энергией активации сдвига в этих структурах – 1.2 и 0.7 мэВ/атом соответственно.

Заключение. Исследование статических характеристик несимметричной двухслойной структуры UBG показало, что в ненапряженной структуре межслоевое расстояние, жесткость структуры в вертикальном направлении и энергия активации параллельного сдвига слоев существенно отличаются от аналогичных параметров структур BG и BSWG, а в растянутых системах различие слабо выражено. Это объясняется различной поверхностной плотностью

графена и SW-графена, из-за которой SW-графен является сжатым, и в нем возникают гофры. При растяжении гофры исчезают, и структура становится планарной, аналогично BG и BSWG.

Молекулярно-динамическое исследование показало, что в симметричных двухслойных структурах существенную роль играет резонанс между фононными системами отдельных слоев. При различающихся фононных спектрах слоев несимметричной двухслойной структуры (UBG или двухслойный графен с неоднородным изотопным составом) время межслоевого теплообмена заметно превышает эту характеристику симметричных структур BG и BSWG. В связи с радикальным влиянием рассогласования фононных спектров на межслоевую теплопроводность, в дальнейшем было бы интересно исследовать влияние на эту характеристику несимметричной функционализации двухслойного графена фтором, хлором или водородом. Это исследование может иметь практическое значение при оценке режимов охлаждения элементов быстродействующей электроники. Если одностороннее нанесение этих атомов на структуру BG (для создания диэлектрических областей) существенно снизит теплопроводность, то это может оказаться препятствием к созданию быстродействующих логических элементов.

Показано, что под воздействием температуры в UBG происходят следующие структурные изменения: скольжение слоев относительно друг друга при температурах вплоть до комнатных и плавление (фрагментация) нагретого слоя при высоких температурах. Также в ненапряженном кристалле UBG при $T = 5000$ К был обнаружен полный отжиг дефектов Стоуна–Уэльса. Отметим, что этот эффект не наблюдался при плавлении однослойного и двухслойного SW-графена [17, 29]. В связи с этим в дальнейшем было бы интересно детально исследовать возможность отжига отдельного дефекта Стоуна–Уэльса в одноосно деформированном в различных направлениях кристалле BG.

Автор благодарен К. П. Катину за обсуждение результатов работы.

Работа выполнена при поддержке программы НИЯУ МИФИ Приоритет 2030.

1. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
2. А. Е. Галашев, О. Р. Рахманова, *УФН* **184**, 1045 (2014).

3. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, *Nature* **438**, 197 (2005).
4. J. O. Sofo, A. S. Chaudhari, and G. D. Barber, *Phys. Rev. B* **75**, 153401 (2007).
5. D. C. Elias, R. R. Nair, T. M. G. Mohiuddin, S. V. Morozov, P. Blake, M. P. Halsall, A. C. Ferrari, D. W. Boukhvalov, M. I. Katsnelson, A. K. Geim, and K. S. Novoselov, *Science* **323**, 610 (2009).
6. Y. Li, L. Xu, H. Liu, and Y. Li, *Chem. Soc. Rev.* **43**, 2572 (2014).
7. Y. Gao, T. Cao, F. Cellini, C. Berger, W. A. de Heer, E. Tosatti, E. Riedo, and A. Bongiorno, *Nat. Nanotechnol.* **13**, 133 (2018).
8. P. V. Bakharev, M. Huang, M. Saxena, S. W. Lee, S. H. Joo, S. O. Park, J. Dong, D. Camacho-Mojica, S. Ji, Y. Kwon, M. Biswal, F. Ding, S. K. Kwak, Z. Lee, and R. S. Ruoff, (2019) - arxiv.org <https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1901/1901.02131.pdf>.
9. G. M. de Araujo, L. Codognoto, and F. R. Simões, *J. of Sol. St. Electrochemistry* (2020), <https://doi.org/10.1007/s10008-020-04517-1>.
10. Zh.-L. Lv, Q. Lu, D.-H. Huang, and F.-T. Liu, *Diam. Relat. Mater.* **114**, 108315 (2021).
11. P. L. Yan, T. Ouyang, and J. X. Zhong, *Nanoscale* **13**(6), 3564 (2021).
12. W. Zhang, C. C. Chai, and Y. T. Yang, *Applied Surface Science* **537**, 147885 (2021).
13. J. Li, Sh. Li, T. Ouyang, Ch. Zhang, Ch. Tang, Ch. He, and J. Zhong, *J. Phys. Chem. Lett.* **12**(2), 732 (2021).
14. J. Liu and H. Lu, *RSC Adv.* **9**, 34481 (2019).
15. H. Yin, X. Shi, C. He, M. Martinez-Canales, J. Li, C. J. Pickard, C. Tang, T. Ouyang, C. Zhang, and J. Zhong, *Phys. Rev. B* **99**, 041405 (2019).
16. A. J. Stone and D. J. Wales, *Chem. Phys. Lett.* **128**, 501 (1986).
17. Л. А. Опенов, А. И. Подливаев, *Письма в ЖЭТФ* **109**, 746 (2019).
18. M. M. Maslov, A. I. Podlivaev, and K. P. Katin, *Molecular Simulation* **42**, 305 (2016).
19. T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg, *Science* **313**, 951 (2006).
20. Y. Cao, D. Chowdhury, D. Rodan-Legrain, O. Rubies-Bigorda, K. Watanabe, T. Taniguchi, T. Senthil, and P. Jarillo-Herrero, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 076801 (2020).
21. Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, *Nature* **556**, 43 (2018).
22. Y. Zhang, T. Tang, C. Girit, Z. Hao, M. C. Martin, A. Zettl, M. F. Crommie, Y. R. Shen, and F. Wang, *Nature* **459**, 820 (2009).
23. G. Fiori and G. Iannaccone, *IEEE Electron Device Letters* **30**, 261 (2009).
24. M.-C. Chen, C.-L. Hsu, and T.-J. Hsueh, *IEEE Electron Device Letters* **35**, 590 (2014); <https://doi.org/10.1038/nmat2082>.
25. А. А. Артюх, Л. А. Чернозатонский, *Письма в ЖЭТФ* **109**, 481 (2019).
26. В. А. Демин, Д. Г. Квашнин, П. Ванчо, Г. Марк, Л. А. Чернозатонский, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 328 (2020).
27. А. И. Подливаев, К. С. Гришаков, К. П. Катин, М. М. Маслов, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 182 (2021).
28. Л. А. Чернозатонский, П. Б. Сорокин, А. Г. Квашнин, Д. Г. Квашнин, *Письма в ЖЭТФ* **90**, 144 (2009).
29. А. И. Подливаев, К. С. Гришаков, К. П. Катин, М. М. Маслов, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 172 (2021).
30. F. L. Thiemann, P. Rowe, A. Zen, E. A. Müller, and A. Michaelides, *Nano Lett.* **21**, 8143 (2021).
31. R. Balog, B. Jørgensen, J. Wells, E. Lægsgaard, P. Hofmann, F. Besenbacher, and L. Hornekær, *J. Am. Chem. Soc.* **131**, 8744 (2009).
32. А. И. Подливаев, Л. А. Опенов, *ФТТ* **57**, 2485 (2015).
33. A. J. M. Nascimento and R. W. Nunes, *Nanotechnology* **24**, 435707 (2013).
34. А. И. Подливаев, Л. А. Опенов, *Письма в ЖЭТФ* **101**, 190 (2015).
35. K. P. Katin, K. S. Grishakov, A. I. Podlivaev, and M. M. Maslov, *J. Chem. Theory Comput.* **16**, 2065 (2020).
36. K. P. Katin and M. M. Maslov, *J. Phys. Chem. Solids* **108**, 82 (2017).
37. А. И. Подливаев, К. П. Катин, *Письма в ЖЭТФ* **92**, 54 (2010).
38. М. М. Маслов, К. П. Катин, А. И. Авхадиева, А. И. Подливаев, *Химическая физика* **33**, 27 (2014).
39. Л. А. Опенов, А. И. Подливаев, *ФТТ* **58**, 821 (2016).
40. Ю. С. Нечаев, Е. А. Денисов, Н. А. Шурыгина, А. О. Черетаева, Е. К. Костикова, С. Ю. Давыдов, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 372 (2021).
41. J. T. Robinson, J. S. Burgess, C. E. Junkermeier, S. C. Badescu, T. L. Reinecke, F. K. Perkins, M. K. Zalalutdniov, J. W. Baldwin, J. C. Culbertson, P. E. Sheehan, and E. S. Snow, *Nano Lett.* **10**, 3001 (2010).
42. K. S. Grishakov, K. P. Katin, V. S. Prudkovskiy, and M. M. Maslov, *Applied Surface Science* **463**, 1051 (2019).
43. B. Li, L. Zhou, D. Wu, H. Peng, K. Yan, Y. Zhou, and Z. Liu, *ACS Nano* **5**, 5957 (2011).
44. E. M. Pearson, T. Halicioglu, and W. A. Tiller, *Phys. Rev. A* **32**, 3030 (1985).
45. F. Liu, P. Ming, and J. Li, *Phys. Rev. B* **76**, 064120 (2007).

A chiral triplet quasi-two-dimensional superconductor in a parallel magnetic field

A. G. Lebed¹⁾

Department of Physics, University of Arizona, 1118 E. 4-th Street, Tucson, AZ 85721, USA

L. D. Landau Institute for Theoretical Physics, Russian Academy of Sciences, 17334 Moscow, Russia

Submitted 6 February 2022
Resubmitted 21 February 2022
Accepted 21 February 2022

DOI: 10.31857/S1234567822060076

Since discovery of superconductivity in the quasi-two-dimensional (Q2D) conductor Sr_2RuO_4 [1], it has been intensively investigated for more than 25 years (for reviews, see [2, 3]). Some analogy of this Q2D superconductor with the superfluid ^3He was recognized from the beginning and the existence of a chiral triplet superconducting phase in the Sr_2RuO_4 was suggested [4]. This scenario of superconducting pairing was supported by the observations of no change of the Knight shift between normal and superconducting phases [5, 6] and breaking of the time reversal symmetry in the superconducting phase [7, 8]. On the other hand, there were arguments against the chiral triplet superconductivity scenario, which were almost ignored that time by scientific community. One of the first argument was the paramagnetic limitation of the parallel upper critical magnetic field in Sr_2RuO_4 [9, 10]. In addition, the predicted in the chiral triplet scenario edge currents were not found in the Sr_2RuO_4 [11, 12] but were found zeros of superconducting gap on Q2D Fermi surface (FS) [13, 14], which is against the fully gaped chiral triplet scenario [4]. Recently, the strongest experimental argument against the triplet scenario of superconductivity in Sr_2RuO_4 was published [15], where strong drop of the Knight shift in superconducting state of the above mentioned material was experimentally discovered.

As seen from the above discussion, the situation with the chiral triplet scenario of superconductivity in Sr_2RuO_4 is still rather controversial. The goal of our Letter is two-fold. First, we improve and make our pioneering argument [9] in favor of singlet superconductivity in Sr_2RuO_4 to be firm. The point is that in [9] (see also recent [16]) we calculated the ratio $H_{\parallel}(0)/(|dH_{\parallel}^{GL}/dT|_{T=T_c} T_c) = 0.75$, where $|dH_{\parallel}^{GL}/dT|_{T=T_c}$ is the so-called Ginzburg–Landau (GL) slope, for s -wave Q2D superconductivity and compared

it with the experimental one, 0.45–0.5 [17–19]. To make our argument against the chiral triplet scenario to be firm, below we calculate the above mentioned ratio exactly for the in-plane isotropic chiral triplet superconductor with $\mathbf{d}$ vector order parameter [4, 20],

$$\mathbf{d} = \mathbf{z} \Delta_0 (k_x \pm i k_y), \quad (1)$$

and obtain even stronger inconsistency,

$$H_{\parallel}(0) = 0.815 |dH_{\parallel}^{GL}/dT|_{T=T_c} T_c, \quad (2)$$

with the experimental values [17–19], where, to the best of our knowledge, Eq. (2) is the first time obtained in the Letter. The second our goal is to suggest one more test for chiral triplet superconductivity, which may already exist in the slightly in-plane anisotropic Q2D triplet superconductor UTe_2 [21] and, as we hope, will be discovered in some other Q2D compounds in the future.

Let us consider a layered superconductor with the following in-plane isotropic Q2D electron spectrum:

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \epsilon(p_x, p_y) - 2t_{\perp} \cos(p_z c^*), \quad t_{\perp} \ll \epsilon_F, \quad (3)$$

where

$$\epsilon(p_x, p_y) = \frac{(p_x^2 + p_y^2)}{2m}, \quad \epsilon_F = \frac{p_F^2}{2m}. \quad (4)$$

[In Equations (3) and (4), $t_{\perp}$ is the integral of overlapping of electron wave functions in a perpendicular to the conducting planes direction, m is the in-plane electron mass, ϵ_F and p_F are the Fermi energy and Fermi momentum, respectively; $\hbar \equiv 1$.] In a parallel magnetic field, which is applied along $\mathbf{x}$ axis

$$\mathbf{H} = (H, 0, 0), \quad (5)$$

it is convenient to choose the vector potential of the field in the form:

$$\mathbf{A} = (0, 0, Hy). \quad (6)$$

¹⁾e-mail: lebed@arizona.edu

Using the Matsubara's Green functions technique [22], it is possible to derive the following so-called linearized Gor'kov's equation, determining the parallel upper critical magnetic field in the isotropic chiral superconductor (1):

$$\Delta(\phi, y) = \int_0^{2\pi} \frac{d\phi_1}{2\pi} g \cos(\phi - \phi_1) \int_{|y-y_1|>d|\sin\phi_1|}^{\infty} \times \\ \times \frac{2\pi T dy_1}{v_F |\sin\phi_1| \sinh\left(\frac{2\pi T |y-y_1|}{v_F |\sin\phi_1|}\right)} \times \\ \times J_0\left[\frac{2t_\perp \omega_c}{v_F |\sin\phi_1|} (y^2 - y_1^2)\right] \Delta(\phi_1, y_1), \quad (7)$$

where g is the effective electron coupling constant, d is the cut-off distance, $J_0(\dots)$ is the zero order Bessel function. In Equation (7) the superconducting gap $\Delta(\phi, y)$ depends on a center of mass of the BCS pair, y , and on the position on the cylindrical FS (4), where ϕ and ϕ_1 are the polar angles counted from $\mathbf{x}$ axis.

By means of the Ginzburg–Landau (GL) procedure [16] to the Gor'kov's Eq. (7) we find the so-called GL slope for parallel upper critical magnetic field:

$$H_{\parallel}^{GL}(T) = \left(\frac{\phi_0}{2\pi\xi_{\parallel}\xi_{\perp}}\right)\tau = \left[\frac{8\sqrt{2}\pi^2 c T_c^2}{7\zeta(3)ev_F t_{\perp} c^*}\right]\tau, \quad (8)$$

where $\tau = (T_c - T)/T_c$.

More complicated problem is to solve Eq. (7) at $T = 0$ and, thus, to find the upper critical magnetic field at zero temperature, $H_{\parallel}(0)$. This is possible to do only by means of numerical calculations. Here, we summarize procedure of the numerical solution of Eq. (7) and obtain the following new result:

$$H_{\parallel}(0) = 10.78 \frac{c T_c^2}{ev_F t_{\perp} c^*}. \quad (9)$$

Note that solution for the superconducting gap, $\Delta(y)$ of Eq. (7) is not of an exponential shape and changes its sign several times in space, in contrast to the 3D case. Using Eqs. (8) and (9), it is possible to obtain Eq. (2).

As we already mentioned, in the candidate for the chiral triplet in-plane isotropic superconductivity, Sr_2RuO_4 , the corresponding experimental coefficients [17–19] are almost two times smaller than the calculated in this Letter (2), which is a strong argument against the chiral triplet scenario.

The author is thankful to N. N. Bagmet (Lebed) for useful discussions.

This is an excerpt of the article “A chiral triplet quasi-two-dimensional superconductor in a parallel magnetic field”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S002136402200267

1. Y. Maeno, H. Hashimoto, K. Yoshida, S. Nishizaki, T. Fujita, J. G. Bednorz, and F. Lichtenberg, *Nature* **372**, 532 (1994).
2. A. P. Mackenzie and Y. Maeno, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 657 (2003).
3. C. Kallin, *Rep. Progr. Phys.* **75**, 042501 (2012).
4. T. M. Rice and M. Sigrist, *J. Phys.: Condens. Matter* **7**, L643 (1995).
5. K. Ishida, H. Mukuda, Y. Kitaoka, K. Asayama, Z. Q. Mao, Y. Mori, and Y. Maeno, *Nature* **396**, 658 (1998).
6. J. A. Duffy, S. M. Hayden, Y. Maeno, Z. Mao, J. Kulda, and G. J. McIntyre, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5412 (2000).
7. G. M. Luke, Y. Fudamoto, K. M. Kojima, M. I. Larkin, J. Merrin, B. Nachumi, Y. J. Uemura, Y. Maeno, Z. Q. Mao, Y. Mori, H. Nakamura, and M. Sigrist, *Nature* **394**, 558 (1998).
8. J. Xia, Y. Maeno, P. T. Beyersdorf, M. M. Fejer, and A. Kapitul'nik, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 167002 (2006).
9. A. G. Lebed and N. Hayashi, *Physica C* **341–348**, 1677 (2000).
10. K. Machida, *JPS Conf. Proc.* **30**, 011038 (2020).
11. P. G. Björnsson, Y. Maeno, M. E. Huber, and K. A. Moler, *Phys. Rev. B* **72**, 167002 (2005).
12. C. A. Watson, A. S. Gibbs, A. P. MacKenzie, C. W. Hicks, and K. A. Moler, *Phys. Rev. B* **98**, 094521 (2018).
13. E. Hassinger, P. Bourgeois-Hope, H. Taniguchi, S. Ren de Cotret, G. Grissonnache, M. S. Anwar, Y. Maeno, N. Doiron-Leyraud, and L. Taillefer, *Phys. Rev. X* **7**, 011032 (2017).
14. S. Kittaka, *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 093703 (2018).
15. A. Pustogow, Y. Luo, A. Chronister, Y.-S. Su, D. Sokolov, F. Jerzembeck, A. P. MacKenzie, C. W. Hicks, N. Kikugawa, S. Radhu, E. D. Bauer, and S. E. Brown, *Nature* **574**, 72 (2019).
16. A. G. Lebed, *JETP Lett.* **110**, 173 (2019) [Pis'ma v ZhETF **110**, 163 (2019)].
17. Z. Q. Mao, Y. Maeno, S. Nishizaki, T. Akima, and T. Ishiguro, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 991 (2000).
18. S. Kittaka, T. Nakamura, Y. Aono, S. Yonezawa, K. Ishida, and Y. Maeno, *Phys. Rev. B* **80**, 147514 (2009).
19. S. Yonezawa, T. Kajikawa, and Y. Maeno, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 077008 (2013).
20. V. P. Mineev and K. V. Samokhin, *Introduction to Unconventional Superconductivity*, Gordon and Breach Science Publisher, Sydney, Australia (1999).
21. L. Jiao, S. Howard, S. Ran, Z. Wang, J. O. Rodriguez, M. Sigrist, Z. Wang, N. P. Butch, and V. Madhavan, *Nature* **579**, 523 (2020).
22. A. A. Abrikosov, L. P. Gor'kov, and I. E. Dzyaloshinskii, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Mechanics*, Dover, N.Y. (1963).

Коллапс и возрождение электронного спинового эха примесных ионов Yb^{3+} на скрытых частотных гребенках сверхтонких взаимодействий в монокристалле Y_2SiO_5

Н. К. Соловаров⁺, А. А. Суханов⁺, В. Ф. Тарасов⁺¹⁾, Ю. Д. Заварцев*, С. А. Кутовой*

⁺Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского – обособленное структурное подразделение
Федерального государственного бюджетного учреждения науки “Федеральный исследовательский центр
“Казанский научный центр Российской академии наук”, 420029 Казань, Россия

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

Поступила в редакцию 9 февраля 2022 г.

После переработки 22 февраля 2022 г.

Принята к публикации 22 февраля 2022 г.

Обнаружены коллапс и возрождение сигналов электронного спинового эха Хана, возбуждаемого на электронно-ядерных спиновых уровнях примесного иона $^{173}\text{Yb}^{3+}$ в ортосиликате иттрия (Y_2SiO_5). Предложена модель явления, основанная на объединении обычного механизма формирования двухимпульсного эха Хана и механизма формирования сигналов эха на скрытых в неоднородной ширине резонансных линий спиновых частотных гребенках, обязанных сверхтонкому взаимодействию электронного спина Yb^{3+} с окружающими ядерными спинами ^{89}Y .

DOI: 10.31857/S1234567822060088

Введение. Диэлектрические кристаллы, легированные редкоземельными ионами, активно изучаются в качестве материалов, подходящих для практической реализации твердотельных квантовых информационных систем, включая квантовые вычисления и квантовую память [1–4]. В качестве кристаллической матрицы для квантовой памяти оптического и микроволнового диапазонов большое внимание привлекают монокристаллы ортосиликата иттрия Y_2SiO_5 (YSO), моноизотопно легированные нечетными изотопами редкоземельных элементов с ненулевым значением ядерного спина [5–12]. Это связано с тем, что электронно-ядерные спиновые системы этих ионов позволяют реализовать обратимый перенос квантовой информации между фотонами и электронно-ядерными спиновыми уровнями, обладающими при низких температурах длительным временем фазовой памяти [13–16]. Моноизотопный состав примесных ионов позволяет достичь оптимальной оптической плотности резонансной среды при минимальной концентрации примесей. При этом уменьшается неоднородное уширение резонансных переходов примесных ионов и предотвращается уменьшение времени жизни когерентности в электронно-ядерной спиновой системе за счет взаимодействия с другими, неактивными, изотопами.

Перспективы реализации квантовой памяти на нечетных изотопах примесных ионов Yb^{3+} в YSO также активно обсуждаются в последнее десятилетие [17–20].

Были определены параметры сверхтонкого взаимодействия (СТВ) электронного спина иттербия с ядерными спинами ^{171}Yb и ^{173}Yb в монокристалле YSO, легированном иттербием с природным содержанием изотопов [17] и с ядерными спинами ^{171}Yb в моноизотопно легированном YSO [18]. В работах [19–21] измерены времена жизни когерентных состояний электронно-ядерных спиновых систем изотопа ^{171}Yb в YSO в оптическом и микроволновом диапазонах.

Данная работа посвящена исследованию импульсными методами электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) примесных ионов $^{173}\text{Yb}^{3+}$ в моноизотопно легированном монокристалле YSO. При этом обнаружена аномальная немонотонная зависимость интенсивности сигналов двухимпульсного эха Хана от временной задержки между импульсами. Обсуждается физическая природа данного явления.

Образцы и условия эксперимента. Изотопически чистый монокристалл YSO, в котором присутствовал только один изотоп кремния ^{28}Si , не обладающий собственным ядерным моментом, был выращен в слабо окислительной атмосфере методом Чохральского на промышленной установке “Кристалл-3М” из расплава, содержащего 0.001 ат. % иттербия,

¹⁾e-mail: tarasov@kfti.knc.ru

обогащенного изотопом ^{173}Yb (92.7 %). Кристаллическая структура YSO характеризуется моноклинной симметрией $I2/a$ с параметрами элементарной ячейки $a = 1.04$ нм, $b = 0.67$ нм, $c = 1.25$ нм [22] и имеет одну ось симметрии второго порядка b с перпендикулярной ей плоскостью скользящего отражения. Примесные ионы иттербия могут замещать иттрий в двух структурно неэквивалентных позициях 1 и 2 (site 1 и site 2) с точечной группой симметрии C_1 [17]. В обозначениях [22] это позиции Y2 и Y1, соответственно. Каждая из этих позиций имеет по две магнитно неэквивалентные позиции, которые становятся эквивалентными, если внешнее магнитное поле направлено параллельно оси b или лежит в плоскости (ac). Измерения проводились для иона $^{173}\text{Yb}^{3+}$ при ориентации магнитного поля близкой к направлению кристаллографической оси c на спектрометре ЭПР ELEXSYS E680 с диэлектрическим резонатором ER4118MD5-W1 в X-диапазоне при температуре 7 К. Образец для измерений был вырезан в виде параллелограмма размерами $2 \times 2.5 \times 3$ мм. Для возбуждения сигналов эхо использовалась двух-импульсная последовательность Хана ($\pi/2 - \tau - \pi - \tau$ -echo) с длительностями первого ($\pi/2$) и второго (π) импульсов $\tau_1 = 16$ нс и $\tau_2 = 32$ нс соответственно. Задержка между импульсами τ изменялась от 180 до 32736 нс с шагом 32 нс.

Результаты и обсуждение. На рисунке 1 представлен эхо-детектированный спектр ЭПР монокристалла YSO, легированного ионами $^{173}\text{Yb}^{3+}$, замещающими иттрий в кристаллографической позиции 1. Спектр представляет собой зависимость интегральной интенсивности двух-импульсного спигового эхо от магнитного поля при задержке между импульсами $\tau = 320$ нс.

Магнитные свойства основного состояния Yb^{3+} в YSO характеризуются эффективным спином $S = 1/2$ с сильно анизотропным эффективным g -фактором ($0.31 < |g_{\text{eff}}| < 6.53$ и $0.13 < |g_{\text{eff}}| < 3.3$ для Yb^{3+} в позициях 1 и 2 соответственно) [18]. Ядерный спин изотопа ^{173}Yb $I = 5/2$. Поэтому каждый электронный уровень расщепляется на $2I + 1 = 6$ ядерных подуровней. Между электронно-ядерными подуровнями возможны 6 “разрешенных” переходов, происходящих без изменения проекции ядерного спина на ось квантования ($\Delta I_z = 0$), и “запрещенные” переходы, происходящие с изменением величины I_z .

Резонансные линии на рис. 1 образуют 7 групп. Шесть из них соответствуют числу разрешенных переходов для изотопа ^{173}Yb . Эти переходы обозначены вертикальными линиями в нижней части рис. 1. Направление магнитного поля было отклонено от

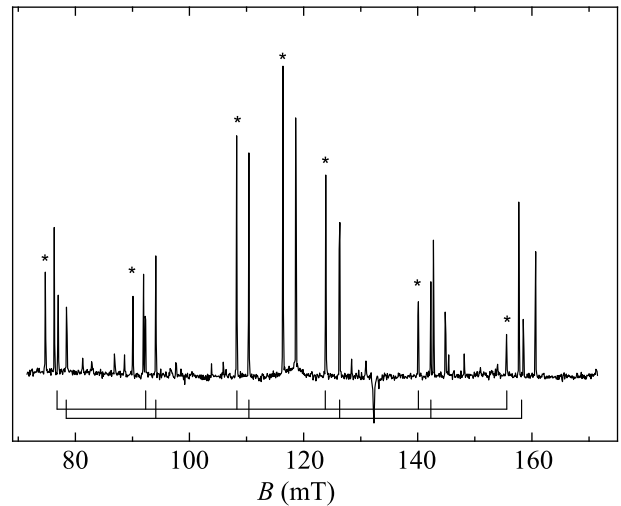


Рис. 1. Эхо-детектированный спектр монокристалла YSO, легированного ионами $^{173}\text{Yb}^{3+}$. Частота спектрометра 9.64 ГГц, температура 7 К. Линиями в нижней части рисунка отмечены разрешенные резонансные переходы для двух магнитно неэквивалентных ионов $^{173}\text{Yb}^{3+}$ в позиции 1. Звездочками отмечены резонансные переходы, для которых измерялась временная зависимость спада сигнала эхо

плоскости ac на 7° . Поэтому в каждой группе присутствуют пары линий, соответствующие двум магнитно неэквивалентным ионам. В центре спектра находятся две линии, обязанные присутствию в образце четных изотопов иттербия с $I = 0$. Для двух низкополевых и высокополевых групп линий, соответствующих $I_z = \pm 3/2$ и $I_z = \pm 5/2$, в спектре присутствуют дополнительные пары линий. Природа появления этих линий достоверно не установлена. В [17] высказывается предположение, что эти линии могут быть обязаны “запрещенным” переходам с участием квадрупольных взаимодействий. Ширина резонансных переходов на спектре составляет около 0.15 мТл, что соответствует $\Delta\nu = 12$ МГц в единицах частоты. Это меньше ширины спектра возбуждающих импульсов (54 и 27 МГц для $\tau_1 = 16$ и $\tau_2 = 32$ нс, соответственно). Поэтому можно считать, что возбуждение носит неселективный характер, при котором микроволновые импульсы действуют на все спины, присутствующие в неоднородно уширенном резонансном переходе.

Самым простым способом определения времени релаксации когерентности электронных спиновых систем является измерение временной зависимости интенсивности сигналов двух-импульсного эхо Хана при увеличении времени задержки между импульсами. На рисунке 2 представлены временные зависимости интегральной интенсивности сигналов эхо, полу-

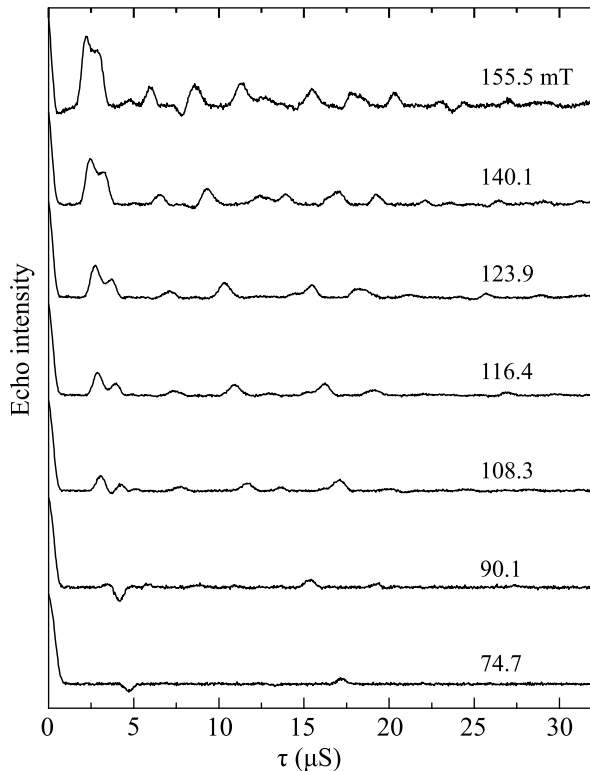


Рис. 2. Временная зависимость интегральной интенсивности сигналов спинового эхо для ионов Yb^{3+} в YSO. Цифры соответствуют величине магнитного поля, при которой проводились измерения. $T = 7 \text{ K}$

ченные для переходов, отмеченных на рис. 1 звездочками. Видно, что эти зависимости существенно отличаются от обычного экспоненциального спада интенсивности, поэтому определение времени релаксации когерентности в таких условиях требует специального исследования. Для всех резонансных линий при увеличении τ быстро, за время около 1 мкс, наблюдается спад сигналов эхо вплоть до их исчезновения (collapse), а затем происходит возрождение (revival) сигналов эхо при определенных значениях интервала τ . При малых магнитных полях (74.7 мТл, 90.1 мТл) единичные сигналы эхо появляются только при определенных значениях τ . Используемые нами термины коллапс-возрождение первоначально были введены при теоретическом описании динамики населенности и когерентности двухуровневого атома в резонансном слабом (несколько фотонов) одномодовом квантованном поле [23, 24]. Предсказанная и экспериментально обнаруженная квазипериодическая по времени динамика была обусловлена квантовой (дискретное число фотонов: 0, 1, 2, ...) природой электромагнитного поля [25, 26].

Те же термины использованы при описании динамики одиночных фотонов в квантовой памяти на

основе ансамбля холодных атомов [27] и для качественной характеристики наблюдаемой нерегулярной зависимости интенсивности фотонного эхо от τ на ионах эрбия в YSO [28]. В последнем случае число фотонов в когерентном поле возбуждающих импульсов было большим, и квантовые (дискретные) свойства поля не играли роли. В рассматриваемом нами случае электронного спинового эхо квантовые свойства поля тоже несущественны, и мы используем термины “коллапс-возрождение” эха для качественного отличия наблюдаемых зависимостей интенсивности двух-импульсного эха от известных случаев модуляции временного спада сигналов эхо (electron spin echo envelope modulation, ESEEM) [29–31].

Известные периодические по времени сигналы эха наблюдаются в случае одноимпульсного возбуждения многочастичных систем, спектр которых представляет собой периодическую дискретную последовательность зубцов с частотным интервалом Δ (эхо на частотной гребенке – frequency comb echo). Первая наглядная модель формирования таких сигналов предложена в работе [32] на примере динамики ансамбля $(N + 1)$ осцилляторов с собственными частотами $\Omega_n = \Omega + n\Delta$ ($n = 0, 1, 2, \dots, N$, $\Delta < \Omega$). Одновременно возбужденные осцилляторы из-за разности собственных частот через время t приобретут сдвиг фаз $\delta\varphi(n) = 2\pi n\Delta t$. При $t = T = 1/\Delta$ все маятники сфазированы и сформируют сигнал эхо. Такие сигналы эхо будут формироваться периодически при $t = mT$, ($m = 1, 2, 3, \dots$).

Точно так же после возбуждающего импульса возникают сигналы эхо от оптической частотной гребенки вследствие периодической конструктивной интерференции ансамбля поперечных компонент дипольных моментов (когерентностей), прецессирующих с отличающимися на $2\pi\Delta n$ угловыми скоростями. В оптическом диапазоне частотные гребенки формируются искусственно в спектрах неоднородно уширенных резонансных переходов [20, 33]. Развитие методов создания и применения оптических гребенок и решеток представлено в обзорах [34, 35]. В микроволновом диапазоне естественные частотные гребенки, на которых наблюдались периодические сигналы эха после одного импульса, представляли хорошо разрешенную сверхтонкую структуру резонансных переходов между электронными спиновыми уровнями, обусловленную сверхтонким взаимодействием электронного спина с близлежащими ядерными спинами [36, 37]. В нашем случае при возбуждении одного резонансного перехода резонансные линии (см. рис. 1) имеют гауссову форму, т. е. явной разрешен-

ной структуры в форме частотной гребенки не наблюдается.

Для проверки связи наблюдаемого эффекта коллапса-возрождения эха Хана с возможным наличием скрытых в неоднородной ширине линий частотных гребенок мы провели фурье-анализ временной зависимости сигналов эха. Преобразование было выполнено в программном пакете Xepx (XepxSoftware) фирмы Брукер. Результаты представлены на рис.3. Оказалось, что в малых

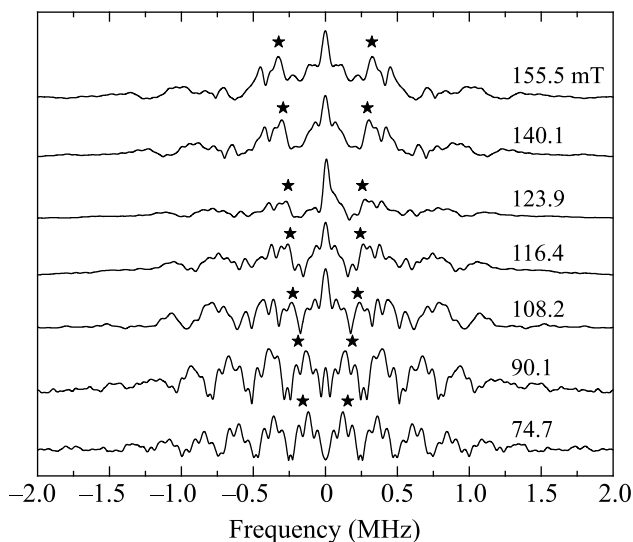


Рис. 3. Спектры Фурье, соответствующие временным зависимостям сигналов эха на рис. 2. Звездочками отмечена величина зеемановского расщепления ядерного спина ^{89}Y в соответствующем магнитном поле

магнитных полях в спектре Фурье присутствуют хорошо выраженные гребенки равномерно распределенных частот, параметры которых зависят от величины магнитного поля. Для магнитного поля 74.7 мТл присутствуют две гребенки с частотными интервалами $\Delta_1 = 0.244$ МГц и $\Delta_2 = 0.061$ МГц. При увеличении магнитного поля до 90.1 мТл частотные интервалы гребенок увеличиваются до $\Delta_1 = 0.264$ МГц и $\Delta_2 = 0.067$ МГц. В более сильных полях частотные гребенки теряют свою регулярность и размываются.

Существует принципиальное отличие между эхо после одного импульса на естественной частотной гребенке со спектрально разрешенными зубцами [36, 37] и нашим случаем коллапса и возрождения эхо в двух-импульсной последовательности Хана на скрытой в неоднородной ширине линии частотной гребенке. В обоих случаях после возбуждающего импульса происходит интерференционное сложение поперечных компонент дипольных моментов ансамбля

атомов, в спектре каждого из которых существуют одинаковые частотные гребенки. Но одновременно существуют механизмы неоднородного уширения, сдвигающие случайным образом частотные гребенки разных атомов относительно друг друга и определяющие форму линии зубцов и всей резонансной линии. Поэтому одновременно происходят два интерференционных процесса – расфазирование-сфазирование компонент частотных гребенок на каждом атоме и расфазирование-сфазирование частотных гребенок разных атомов при двух-импульсном возбуждении эха Хана. Соотношение характерных времен этих двух процессов определяет возможность формирования эха на частотной гребенке. В работах [20, 33, 36, 37] время обратимой расфазировки поперечных компонент дипольного момента (обратное ширине зубцов) значительно превышает период формирования сигналов эха на частотной гребенке T , поэтому наблюдается эхо после одного импульса. В нашем случае эхо такого типа после первого $\pi/2$ импульса не возникает, так как вследствие большой неоднородной ширины резонансного перехода $\Delta\nu = 12$ МГц время спада сигнала свободной индукции $T_2^* = 1/2\pi\Delta\nu = 0.13$ мкс много короче времени формирования эхо от частотных гребенок $T_i = 1/\Delta_i$. Другими словами – расфазирование гребенок происходит значительно быстрее, чем сфазировуются зубцы гребенки на каждом атоме.

В то же время частотные гребенки, скрытые в неоднородной ширине резонансного перехода, проявляются в двух-импульсной последовательности Хана за счет механизма переноса когерентности между зубцами частотной гребенки во время второго импульса аналогично хорошо известному в импульсном ЭПР эффекту ESEEM [29–31]. Двух-импульсный ESEEM в электронно-ядерных спиновых системах возникает вследствие интерференции поперечных компонент электронного спина, которые прецессируют во вращающейся системе координат с различными частотами, определяющимися спектром сверхтонких взаимодействий (СТВ) электронного спина с близлежащими ядерными спинами. Наблюдаемый нами коллапс-возрождение двух-импульсного эха Хана обусловлен двумя причинами: 1) наличием частотной гребенки в спектре СТВ иона Yb^{3+} с близлежащими ядрами ^{89}Y и 2) переносом когерентности между зубцами гребенки во время второго импульса. Сигнал эхо возникает при совпадении временной задержки между двумя импульсами со временем формирования эхо от частотной гребенки $\tau = mT$. При $m = 1$ частотная гребенка с интервалом $\Delta_1 = 0.244$ МГц должна формировать спино-

вое эхо при $\tau_1 = 1/\Delta_1 = 4.1$ мкс, а гребенка с интервалом $\Delta_2 = 0.061$ МГц должна формировать эхо при $\tau_2 = 1/\Delta_2 = 16.4$ мкс. Экспериментально сигналы эхо наблюдаются при очень близких значениях τ , равных 4.75 и 17.2 мкс, соответственно. Мы полагаем, что две группы ядерных спинов, формирующих гребенки с Δ_1 и Δ_2 , могут принадлежать ядрам иттрия в первой и второй координационных сферах иона иттербия, соответственно. Анализ взаимосвязи между спектром частотной гребенки и характером сигналов эхо выходит за рамки данной статьи и будет представлен в отдельной публикации. Обсудим причину формирования гребчатого спектра СТВ ионов Yb^{3+} в YSO. Во многих случаях СТВ электронного спина с соседними ядерными спинами носит диполь-дипольный характер, и энергия взаимодействия зависит как от расстояния между спинами, так и от ориентации взаимодействующих магнитных моментов относительно радиус-векторов, соединяющих спины. В высокосимметричной кристаллической решетке энергия СТВ электронного спина с эквивалентными соседними ядерными спинами одинакова. В таких условиях сверхтонкая структура спектра электронного перехода представляет эквидистантную гребенку [38]. Именно по такому механизму сформирована частотная гребенка в [36].

В монокристалле YSO лигандное окружение примесного иона имеет низкую симметрию. В таком случае форму спектра СТВ в виде частотной гребенки можно объяснить, если предположить, что значительную роль в СТВ играет контактное взаимодействие Ферми, которое не зависит от взаимной ориентации взаимодействующих магнитных моментов и соединяющего их радиус-вектора. В кристаллической решетке YSO расстояния между примесным редкоземельным ионом и ионами иттрия в первой координационной сфере отличаются не очень сильно. Для Yb^{3+} в позиции 1 эти расстояния лежат в пределах 3.45–3.74 нм [39]. Поэтому при контактном взаимодействии Ферми энергия СТВ иона Yb^{3+} со всеми ионами иттрия первой координационной сферы будет примерно одинакова, и спектр СТВ будет иметь вид эквидистантной решетки.

Сильная зависимость формы сверхтонкой частотной гребенки от величины магнитного поля объясняется большой анизотропией электронного g -фактора. В этом случае направление магнитного момента электронного спина не совпадает с направлением внешнего магнитного поля. Если представить СТВ в виде произведения ядерного магнитного момента на какое-то эффективное сверхтонкое поле [40], то полное магнитное поле, относительно которого кван-

туется ядерный спин, будет суммой сверхтонкого и внешнего магнитных полей. При изменении величины внешнего магнитного поля направление полного магнитного поля и направление оси квантования ядерного спина изменяются [40, 41]. В малых магнитных полях, когда зеемановская энергия ядерного спина меньше энергии СТВ, ось квантования будет близка к направлению эффективного сверхтонкого поля. Частота перехода между ядерными уровнями будет определяться, в основном, СТВ, а несекулярные по отношению к оси квантования компоненты внешнего магнитного поля не будут влиять на частоту модуляции в ESEEM. В противоположном случае, когда зеемановская энергия ядер во внешнем магнитном поле превышает энергию СТВ, ось квантования ядерных спинов будет близка к направлению внешнего магнитного поля, а несекулярные компоненты эффективного сверхтонкого поля не будут влиять на величину расщепления между ядерными уровнями. При этом возрастает роль анизотропного диполь-дипольного взаимодействия, и эквидистантная частотная гребенка распадается на набор частот, индивидуальных для каждого ядра иттрия. На рисунке 3 видно, что в нашем случае энергия СТВ и зеемановская энергия ядерных спинов одного порядка. Поэтому поворот оси квантования ядерных спинов, связанный с изменением величины внешнего магнитного поля, кардинально меняет характер ESEEM.

Выводы.

1. Импульсными методами ЭПР-спектроскопии исследованы особенности модуляции временного спада интенсивности двух-импульсного эхо Хана (ESEEM) для примесных ионов Yb^{3+} в монокристалле ортосиликата иттрия Y_2SiO_5 , моноизотопно легированном изотопом Yb-173 . Измерения проведены при семи различных значениях внешнего магнитного поля, соответствующих разрешенным резонансным переходам для шести различных состояний ядерного спина Yb-173 с величиной ядерного спина $Y = 5/2$, и одного резонансного перехода, соответствующего четным изотопам иттербия, присутствующим в образце в виде неконтролируемой примеси.

2. Установлено, что характер ESEEM сильно зависит от величины магнитного поля, в котором проводились измерения. В малых магнитных полях временная зависимость сигналов эхо после второго возбуждающего импульса характеризуется быстрым коллапсом за время 1–2 мкс и последующим возрождением на временах 15–20 мкс. Фурье-анализ временной зависимости ESEEM показал, что коллапс и воз-

рождение сигналов эхо могут быть связаны с особенностью частотного спектра СТВ электронного спина иттербия с ядерными спинами соседних ионов иттрия, в малых магнитных полях имеющего форму эквидистантных частотных гребенок. Появление сигналов эхо после второго возбуждающего импульса происходит при сфазировании компонент частотных гребенок на каждом примесном ионе и одновременном сфазировании частотных гребенок разных ионов при двух-импульсном возбуждении эха Хана.

3. Гребенчатый вид спектра СТВ обусловлен большим вкладом контактного взаимодействия Ферми в СТВ электронного спина иттербия с ядерными спинами иттрия, энергия которого не зависит от взаимной ориентации ядерного и электронного магнитных моментов относительно соединяющего их радиус-вектора.

4. Спектр СТВ электронных спинов иттербия и ядерных спинов иттрия сильно зависит от величины внешнего магнитного поля. Эта зависимость возникает вследствие изменения направления пространственной оси квантования ядерных спинов при изменении величины внешнего магнитного поля в условиях конкуренции разнонаправленных внешнего и сверхтонкого магнитных полей, действующих на ядерный спин.

1. H. de Riedmatten, M. Afzelius, M. U. Staudt, C. Simon, and N. Gisin, *Nature* **456**, 773 (2008).
2. C. W. Thiel, T. Böttger, and R. L. Cone, *J. Lumin.* **131**, 353 (2011).
3. M. Bonarota, J.-L. Le Gouët, and T. Chanelière, *New J. Phys.* **13**, 013013 (2011).
4. C. W. Thiel, R. M. Macfarlane, Y. Sun, T. Böttger, N. Sinclair, W. Tittel, and R. L. Cone, *Laser Phys.* **24**, 106002 (2014).
5. M. Rancic, M. P. Hedges, R. L. Ahlefeldt, and M. J. Sellars, *Nature Phys.* **14**, 50 (2018).
6. Y.-H. Chen, X. Fernandez-Gonzalvo, S. P. Horvath, J. V. Rakonjac, and J. J. Longdell, *Phys. Rev. B* **97**, 024419 (2018).
7. G. Wolfowicz, H. Maier-Flaig, R. Marino, A. Ferrier, H. Vezin, J. J. L. Morton, and Ph. Goldner, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 170503 (2015).
8. G. Dold, C. W. Zollitsch, J. O'Sullivan, S. Welinski, A. Ferrier, Ph. Goldner, S. E. de Graaf, T. Lindstrom, and J. J. L. Morton, *Phys. Rev. Appl.* **11**, 054082 (2019).
9. R. M. Eremina, V. F. Tarasov, K. B. Konov, T. P. Gavrilova, A. V. Shestakov, V. A. Shustov, S. A. Kutovoi, and Yu. D. Zavartsev, *Appl. Magn. Reson.* **49**, 53 (2018).
10. M. Gündogan, P. M. Ledingham, K. Kutluer, M. Mazzer, and H. de Riedmatten, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 230501 (2015).
11. P. Jobez, C. Laplane, N. Timoney, N. Gisin, A. Ferrier, Ph. Goldner, and M. Afzelius, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 230502 (2015).
12. A. A. Суханов, В. Ф. Тарасов, Ю. Д. Заварцев, А. И. Загуменный, С. А. Кutowой, *Письма в ЖЭТФ* **108**, 211 (2018) [A. A. Sukhanov, V. F. Tarasov, Yu. D. Zavartsev, A. I. Zagumennyi, and S. A. Kutovoi, *JETP Lett.* **108**, 210 (2018)].
13. A. Louchet, Y. Le Du, F. Bretenaker, T. Chaneliere, F. Goldfarb, I. Lorgere, J.-L. Le Gouët, O. Guillot-Noel, and Ph. Goldner, *Phys. Rev. B* **77**, 195110 (2008).
14. M. Afzelius, I. Usmani, A. Amari, B. Lauritzen, A. Walther, C. Simon, N. Sangouard, J. Minar, H. de Riedmatten, N. Gisin, and S. Kroll, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 040503 (2010).
15. M. Lovrić, D. Suter, A. Ferrier, and Ph. Goldner, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 020503 (2013).
16. M. Zhong, M. P. Hedges, R. L. Ahlefeldt, J. G. Bartholomew, S. E. Beavan, S. M. Wittig, J. J. Longdell, and M. J. Sellars, *Nature* **517**, 177 (2015).
17. S. Welinski, A. Ferrier, M. Afzelius, Ph. Goldner, *Phys. Rev. B* **94**, 155116 (2016).
18. A. Tiranov, A. Ortu, S. Welinski, A. Ferrier, Ph. Goldner, N. Gisin, and M. Afzelius, *Phys. Rev. B* **98**, 195110 (2018).
19. H.-J. Lim, S. Welinski, A. Ferrier, Ph. Goldner, J. J. L. Morton, *Phys. Rev. B* **97**, 064409 (2018).
20. M. Businger, A. Tiranov, K. T. Kaczmarek, S. Welinski, Z. Zhang, A. Ferrier, Ph. Goldner, and M. Afzelius, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 053606 (2020).
21. A. Ortu, A. Tiranov, S. Welinski, F. Fröwis, N. Gisin, A. Ferrier, Ph. Goldner, and M. Afzelius, *Nature Mater.* **17**, 671 (2018).
22. Б. А. Максимов, Ю. А. Харитонов, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, *ДАН* **183**, 1072 (1968) [B. A. Maksimov, Yu. A. Kharitonov, V. V. Ilyukhin, and N. V. Belov, *Sov. Phys. Dokl.* **13**, 1313 (1968)].
23. J. H. Eberly, N. B. Narozhny, and J. J. Sanchez-Mondragon, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 1323 (1980).
24. N. B. Narozhny, J. J. Sanchez-Mondragon, and J. H. Eberly, *Phys. Rev. A* **23**, 236 (1981).
25. G. Rempe, H. Walther, and N. Klein, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 353 (1987).
26. M. Brune, F. Schmidt-Kaler, A. Maali, J. Dreyer, E. Hagley, J. M. Raimond, and S. Haroche, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1800 (1996).
27. D. N. Matsukevich, T. Chanelie're, S. D. Jenkins, S.-Y. Lan, T. A. B. Kennedy, and A. Kuzmich, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 033601 (2006).
28. B. Car, J.-L. Le Gouët, and T. Chaneliere, *Phys. Rev. B* **102**, 115119 (2020).

29. W. B. Mims, *Phys. Rev. B* **5**, 2409 (1972).
30. К. М. Салихов, А. Г. Семенов, Ю. Д. Цветков, *Электронное спиновое эхо и его применение*, Наука, Новосибирск (1976), гл. 5 [К. М. Salikhov, A. G. Semenov, Yu. D. Tsvetkov, *Electron spin echo and its application* (on Russian), Nauka, Novosibirsk (1976), ch. 5].
31. A. Schweiger, G. Jeschke, *Principles of Pulse Electron Paramagnetic Resonance*, Oxford Univ. Press, N.Y. (2001), ch. 10.
32. Б. Я. Дубецкий, В. П. Чеботаев, *Письма в ЖЭТФ* **41**, 267 (1985) [B. Ya. Dubetskii and V. P. Chebotaev, *JETP Lett.* **41**, 328 (1985)].
33. M. Afzelius, C. Simon, H. de Riedmatten, and N. Gisin, *Phys. Rev. A* **79**, 052329 (2009).
34. Р. М. Архипов, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 636 (2021) [R. M. Arkhipov, *JETP Lett.* **113**, 611 (2021)].
35. T. Fortier and F. Baumann, *Commun. Phys.* **2**, 153 (2019).
36. K. I. Gerasimov, S. A. Moiseev, and R. B. Zaripov, *Appl. Magn. Reson.* **48**, 795 (2017).
37. K. I. Gerasimov, S. A. Moiseev, V. I. Morosov, and R. B. Zaripov, *Phys. Rev. A* **90**, 042306 (2014).
38. А. Абрагам, Б. Блинни, *Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов*, Мир, М. (1972), т. 1, гл. 10 [A. Abragam and B. Bleaney, *Electron paramagnetic resonance of transition ions*, Clarendon Press, Oxford (1970), ch. 10].
39. R. F. Likierov, V. F. Tarasov, A. A. Sukhanov, A. V. Shestakov, R. M. Eremina, Yu. D. Zavartsev, and S. A. Kutovoi, *Magnetic Resonance in Solids. Electronic Journal.* **22**, 20201 (2020).
40. J. A. Weil and J. H. Anderson, *J. Chem. Phys.* **35**, 1410 (1961).
41. J. A. Weil and J. R. Bolton, *Paramagnetic Resonance. Elementary Theory and Practical Applications*, second edition, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey (2007), ch. 5.

Качественное рассмотрение эффекта Шарнхорста

А. М. Ишханян⁺*, В. П. Крайнов^{×1)}

⁺Российско-Армянский университет, 0051 Ереван, Армения

*Институт физических исследований НАН Армении, 0203 Аштарак, Армения

[×]Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 29 декабря 2021 г.

После переработки 21 января 2022 г.

Принята к публикации 17 февраля 2022 г.

Эффект Шарнхорста состоит в том, что фотон, летящий поперек щели между большими параллельными друг другу проводящими пластинами, имеет скорость, немного превышающую скорость света в вакууме вследствие поляризации системы. В статье приводится качественное рассмотрение этого эффекта.

DOI: 10.31857/S123456782206009X

1. Введение. Флуктуационное поле электромагнитного вакуума проявляет себя в самых различных задачах [1–5]. Так, ван-дер-ваальсово притяжение между атомами и молекулами на расстояниях R , больших по сравнению с размерами атомов и молекул, есть следствие различных электромагнитных сил между телами. Эти силы обусловлены как непосредственным взаимодействием зарядов, так и полем электромагнитного вакуума. В случае $R \gg a_B/\alpha$, где a_B – боровский радиус, а $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$ – постоянная тонкой структуры, притяжение между атомами создается именно полем электромагнитного вакуума, которое производит поляризацию атомов [2, 3], а не кулоновскими силами.

Другой пример – это лэмбовский сдвиг в атоме водорода [4]. Сдвиг энергии основного состояния атома водорода в α^3 раз меньше его энергии из-за “дрожания” электрона [5] в поле электромагнитного вакуума (если не учитывать слабый логарифмический фактор). Квадрат напряженности электрического поля вакуума оценивается как отношение лэмбовского сдвига к объему атома водорода. Эта напряженность имеет порядок величины 10^6 В/см.

Третий пример – это притяжение проводящих пластин, параллельных друг другу, силами электромагнитного вакуума (сила Казимира [4]). Поляризация системы в этой задаче и рассматривается в данной статье.

2. Флуктуационное поле в задаче Казимира. Сначала приведем упрощенный вывод энергии Казимира электромагнитного вакуума между двумя

параллельными проводящими пластинами (расстояние между пластинами равно a). Используем систему единиц $c = \hbar = m = 1$. Рассмотрим кубик с длиной грани $L \gg a$, ограниченный со всех сторон проводящими пластинами. Без ограничения общности можно считать $L = 1$. Все осцилляторы поля электромагнитного вакуума находятся в основном состоянии и энергия каждого осциллятора равна $\omega/2$. Обсудим возможные длины стоячих волн в этом кубике. Максимальная длина волны, например, вдоль направления X , равна 2 (т.е., на длине грани кубика укладывается полволны поперечного электрического поля осциллятора, чтобы оно обращалось в нуль на проводящих пластинах по известному условию для тангенциальных компонент поля). А произвольная длина волны в этом направлении равна $\lambda_n = 2/n_x$, где n_x – целое неотрицательное число. Соответствующее волновое число равно $k_x = 2\pi/\lambda_n = \pi n_x$, $n_x = 0, 1, 2, 3 \dots$. Следовательно, частота осциллятора $\omega = \pi \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$. Полная энергия поля электромагнитного вакуума в кубике равна сумме энергий осцилляторов

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 &= \pi \sum_{n_x, n_y, n_z} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} = \\ &= \int_0^\infty \frac{dk_x}{\pi} \int_0^\infty \frac{dk_y}{\pi} \int_0^\infty \frac{dk_z}{\pi} \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}. \end{aligned} \quad (1)$$

Дополнительный фактор 2 возник из-за двух поперечных поляризаций каждого фотона.

Теперь поместим еще одну проводящую пластину перпендикулярно оси Z на малом расстоянии $a \ll 1$

¹⁾e-mail: vpkrainov@mail.ru

от верхней плоскости рассматриваемого кубика. Вычислим энергию $\varepsilon(a)$ электромагнитного вакуума, заключенную в малой области между этой пластиной и верхней плоскостью кубика. Аналогично (1) имеем

$$\varepsilon(a) = \int_0^\infty \frac{dk_x}{\pi} \int_0^\infty \frac{dk_y}{\pi} \sum_{n_z=1}^\infty \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + \left(\frac{\pi n_z}{a}\right)^2} + \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{dk_x}{\pi} \int_0^\infty \frac{dk_y}{\pi} \sqrt{k_x^2 + k_y^2}. \quad (2)$$

Второе слагаемое в (2) отвечает значению $n_z = 0$. Фактор $1/2$ в этом слагаемом обусловлен тем, что при движении в двумерной плоскости имеется только одна поляризация фотона. Вводя полярные координаты в плоскости (x, y) и обозначая $\kappa = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, перепишем выражение (2) в виде

$$\varepsilon(a) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \kappa d\kappa \left\{ \sum_{n_z=1}^\infty \sqrt{\kappa^2 + \left(\frac{\pi n_z}{a}\right)^2} + \frac{\kappa}{2} \right\}. \quad (3)$$

В соответствии с (3) характерная длина волны фотона в задаче Казимира порядка размера щели a . Коротковолновые фотоны устраняются при последующем вычитании энергии в отсутствие пластин.

Если проводящая пластина отсутствует, то энергия поля электромагнитного вакуума в том же малом объеме, очевидно, равна $\varepsilon_0(a) = a\varepsilon_0$. Подставляя (1) и заменяя $\kappa^2 = u$, получим

$$\varepsilon_0(a) = \frac{a}{4\pi^2} \int_0^\infty dk_z \int_0^\infty du \sqrt{u + k_z^2}. \quad (4)$$

Заменяя $k_z = \pi n_z/a$, перепишем (4) в виде

$$\varepsilon_0(a) = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dn_z \int_0^\infty du \sqrt{u + \left(\frac{\pi n_z}{a}\right)^2}. \quad (5)$$

Вычисляя элементарный интеграл в (5), находим

$$\varepsilon_0(a) = \frac{1}{6\pi} \int_0^\infty dn_z \left\{ A^{3/2} - \left(\frac{\pi n_z}{a}\right)^3 \right\}; \quad A \rightarrow \infty. \quad (6)$$

Величина A – верхний предел интегрирования по переменной u . Аналогично вычисляем интеграл (3) по u :

$$\begin{aligned} \varepsilon(a) &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty du \left\{ \sum_{n_z=0}^\infty \sqrt{u + \left(\frac{\pi n_z}{a}\right)^2} - \frac{\sqrt{u}}{2} \right\} = \\ &= \frac{1}{6\pi} \left\{ \sum_{n_z=0}^\infty \left[A^{3/2} - \left(\frac{\pi n_z}{a}\right)^3 \right] - \frac{A^{3/2}}{2} \right\}. \end{aligned} \quad (7)$$

Для вычисления суммы в (7) используем формулу Эйлера–Маклорена

$$\sum_{n_z=0}^\infty f(n_z) \approx \int_0^\infty f(n_z) dn_z + \frac{1}{2}f(0) - \frac{1}{12}f'(0) + \frac{1}{720}f'''(0). \quad (8)$$

В данном случае

$$f(n_z) = A^{3/2} - \left(\frac{\pi n_z}{a}\right)^3. \quad (9)$$

Следовательно,

$$f(0) = A^{3/2}; \quad f'(0) = f''(0) = 0; \quad f'''(0) = -6\pi^3/a^3. \quad (10)$$

Изменение энергии поля при внесении в кубик проводящей пластины равно $\Delta\varepsilon = \varepsilon(a) - \varepsilon_0(a)$. Оно обусловлено квантованием поля вдоль оси Z и порождает силу, действующую между внесенной пластиной и пластиной на верхней плоскости кубика. Из формул (6)–(10) видно, что при вычитании происходит взаимоуничтожение слагаемых $\int_0^\infty f(n_z) dn_z + \frac{1}{2}f(0)$ в формуле Эйлера–Маклорена. При этом исчезает произвольное большое число A . Получаем

$$\Delta\varepsilon = -\frac{\pi^2 c \hbar L^2}{720 a^3}. \quad (11)$$

Плотность энергии Казимира согласно (11) равна

$$W = -\frac{\pi^2 c \hbar}{720 a^4}. \quad (12)$$

Далее в качественном подходе мы опустим все численные факторы в зависимостях, сохраняя знаки равенства вместо знака “равно по порядку величины”. Плотность энергии Казимира (12) равна квадрату напряженности E флуктуационного электрического поля электромагнитного вакуума. Таким образом, получаем $E = \sqrt{c\hbar}/a^2$. Например, для полости с шириной $a = 1$ мкм, восстанавливая размерности, получим $E = 100$ В/см. Конечно, электрическое поле различно на разных длинах волн. В соответствии со сказанным выше эта оценка относится к длине волны порядка размера щели.

3. Ненулевые температуры. Теперь обратимся к случаю ненулевой температуры [6]. В этом случае энергия осциллятора равна

$$\varepsilon(\omega) = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\omega/T) - 1} \right) \omega. \quad (13)$$

Она получается из квантово-механической энергии осциллятора $(n + 1/2)\omega$ подстановкой ее в распределение Гиббса и суммированием по квантовым числам n .

Мы рассматриваем идеальный газ фотонов вакуума с нулевым химическим потенциалом как совокупность независимых частиц, помещенных в термостат с температурой T . Под этими частицами мы понимаем частицы бозе-газа, находящихся в данном одночастичном квантовом состоянии, а под термостатом – остальной газ. Таким образом, малая температурная поправка к энергии при $T \ll 1/a$ на основе (4) определяется вторым слагаемым в (13), т.е.

$$\delta\varepsilon_0(a, T) = \frac{a}{2\pi^2} \int_0^\infty dk_z \int_0^\infty d\kappa \frac{\kappa \sqrt{\kappa^2 + k_z^2}}{\exp\left\{\frac{\hbar c}{T} \sqrt{\kappa^2 + k_z^2}\right\} - 1}. \quad (14)$$

Переходим в (14) к новым полярным координатам $\kappa = k \sin \alpha$; $k_z = k \cos \alpha$. Тогда получаем

$$\delta\varepsilon_0(a, T) = \frac{a}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^3 dk}{\exp\left\{\frac{\hbar c k}{T}\right\} - 1} \int_0^{\pi/2} \sin \alpha d\alpha. \quad (15)$$

Вычисляя, находим температурную поправку к энергии:

$$\delta\varepsilon_0(a, T) = \frac{\pi^2 a T^4}{30}. \quad (16)$$

Для (безразмерной) теплоемкости электромагнитного вакуума, заключенного в области между пластинами, получаем:

$$C(T) = \frac{2\pi^2}{15} \left(\frac{T}{T_0}\right)^3 \left(\frac{L}{a}\right)^2; \quad T \ll T_0 = \frac{\hbar c}{a}. \quad (17)$$

Отметим аналогию (17) с теплоемкостью кристалла при низких температурах. Величина a в кристалле – это постоянная решетки, а T_0 – дебаевская температура.

4. Поляризация вакуума. Под действием низкочастотного флуктуационного электрического поля электромагнитного вакуума электроны могут виртуально переходить из нижнего континуума (“моря Дирака”) в верхний континуум через щель в спектре и обратно. В результате релятивистски инвариантная плотность лагранжиана электромагнитного поля $L = (E^2 - H^2)/8\pi$ приобретает малую добавку (так называемый эффективный лагранжиан Гейзенберга–Эйлера [4, 7]). Эта добавка квадратична по релятивистским инвариантам, т.е. содержит линейную комбинацию $(E^2 - H^2)^2$ и $(\mathbf{E}\mathbf{H})^2$. Она носит общий характер и не связана с конкретными задачами.

Качественно такую малую радиационную поправку к плотности энергии Казимира (12) из-за поляризации вакуума можно записать в виде $\delta W = -e^4 E^4$. Остальные факторы порядка единицы в используемой системе единиц $c = \hbar = m = 1$. Она отрицательна из-за отрицательности поправки к энергии

во втором порядке теории возмущений для основного состояния. Определяем поляризацию (дипольный момент единицы объема) $P = \partial(\delta W)/\partial E = -e^4 E^3$ и диэлектрическую восприимчивость $\chi = \partial P/\partial E = -e^4 E^2$. Показатель преломления равен корню из диэлектрической проницаемости. Поэтому полученная величина представляет собой малое отклонение показателя преломления от единицы: $\Delta n = -e^4 E^2 = -e^4/a^4$.

Речь идет о показателе преломления поперек щели. Вдоль щели показатель преломления строго равен единице в соответствии с лоренцевой инвариантностью к трансляции. Восстанавливая обычные единицы, получим:

$$\Delta n = -\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \left(\frac{\hbar}{mca}\right)^4. \quad (18)$$

Для ширины щели в полости $a = 1$ мкм отсюда получим оценку $\Delta n = -10^{-34}$. В расчете всех поправок второго порядка теории возмущений Шарнхорстом [1] и (другим способом) Бартоном [8] численный фактор в (18) оказался равным 0.013.

Из (18) получаем, что фотон, летящий поперек щели, имеет скорость несколько больше, чем скорость света в вакууме (эффект Шарнхорста), хотя это превышение ничтожно мало. Конечно, речь идет здесь о фазовой скорости. Для фактического распространения такой волны ее длина должна быть меньше ширины щели a , но, разумеется, много больше, чем для комптоновской волны.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 20-52-05012), Комитета по науке Армении (грант # 20RF-171) и Армянского национального фонда науки и образования (грант # PS-5701). Работа поддержана Министерством науки и Высшего образования РФ (#FSMG-2021-0005).

1. K. Scharnhorst, Phys. Lett. B **236**, 354 (1990).
2. Ю. С. Бараш, *Силы Ван-дер-Ваальса*, Наука, М. (1988).
3. А. М. Ишханян, В. П. Крайнов, ЖЭТФ **159**, 1013 (2021).
4. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, 4-е изд., Физматлит, М. (2002).
5. А. Б. Мигдал, В. П. Крайнов, *Приближенные методы квантовой механики*, Наука, М. (1966).
6. Sh.-I. Tadaki and Sh. Takagi, Progress of Theoretical Physics **75**, 262 (1986).
7. W. Heisenberg and H. Euler, Z. Phys. **98**, 714 (1936).
8. G. Barton, Phys. Lett. B **237**, 559 (1990).

Текущий авторский указатель тома 115

- Barash Yu. S. **115**, 304 ()
 Batulin R. G. **115**, 108 ()
 Deviatov E. V. **115**, 304 ()
 Kiiamov A. G. **115**, 108 ()
 Kolesnikov N. N. **115**, 304 ()
 Kuznetsov M. D. **115**, 108 ()
 Shvetsov O. O. **115**, 304 ()
 Tayurskii D. A. **115**, 108 ()
 Timonina A. V. **115**, 304 ()
 Volovik G. E. **115**, 306 ()
 Агамалян М. А. **115**, 322 ()
 Агеев Э. И. **115**, 213 ()
 Алешин А. Н. **115**, 10 ()
 Алешин П. А. **115**, 10 ()
 Алиев В. Ш. **115**, 89 ()
 Андрианов А. В. **115**, 10 ()
 Аронин А. С. **115**, 308 ()
 Арсланов Т. Р. **115**, 218 ()
 Архипов М. В. **115**, 3 ()
 Архипов Р. М. **115**, 3 ()
 Афонин Г. В. **115**, 110 ()
 Батулин Р. Г. **115**, 190 ()
 Белослудов В. Р. **115**, 144 ()
 Белослудов Р. В. **115**, 144 ()
 Белотелов В. И. **115**, 224 ()
 Бержанский В. Н. **115**, 224 ()
 Благов А. Е. **115**, 170 ()
 Богач А. В. **115**, 150 ()
 Божко Ю. Ю. **115**, 144 ()
 Болдырев К. Н. **115**, 40 ()
 Борисов А. Э. **115**, 270 ()
 Бутько В. Г. **115**, 47 ()
 Валеев Б. Ю. **115**, 103 ()
 Васильев П. П. **115**, 35 ()
 Васин К. В. **115**, 190 ()
 Вахитов Р. М. **115**, 123 ()
 Волков В. А. **115**, 163 ()
 Высоцкий М. И. **115**, 67 ()
 Габбасов Б. Ф. **115**, 190 ()
 Гамзатов А. Г. **115**, 218 ()
 Гелаш А. А. **115**, 51 ()
 Гец К. В. **115**, 144 ()
 Глазкова Д. А. **115**, 241 ();
115, 315 ()
 Глезер А. М. **115**, 110 ()
 Гоголев А. С. **115**, 170 ()
 Годунов С. И. **115**, 67 ()
 Головенчиц Е. И. **115**, 262 ()
 Голяшов В. А. **115**, 315 ()
 Гриценко В. А. **115**, 89 ()
 Гудин С. А. **115**, 218 ()
 Гудовских А. С. **115**, 213 ()
 Гусев А. А. **115**, 47 ()
 Данилов П. А. **115**, 287 ()
 Дворецкий С. А. **115**, 230 ()
 Демин В. А. **115**, 184 ()
 Демишев С. В. **115**, 150 ()
 Долганов В. К. **115**, 236 ()
 Долганов П. В. **115**, 236 ()
 Дормидонов А. Е. **115**, 15 ()
 Еремин М. В. **115**, 190 ()
 Естюнин Д. А. **115**, 241 ();
115, 315 ()
 Жаховский В. В. **115**, 20 ();
115, 80 ()
 Жданов Р. К. **115**, 144 ()
 Жемчугов Е. В. **115**, 67 ()
 Жидовцев Н. А. **115**, 71 ()
 Жукова М. О. **115**, 3 ()
 Заболотных А. А. **115**, 163 ()
 Залозная Е. Д. **115**, 15 ()
 Захарян А. А. **115**, 322 ()
 Звездин А. К. **115**, 224 ()
 Зипунова Е. В. **115**, 176 ()
 Зуев Д. А. **115**, 213 ()
 Иванов А. В. **115**, 176 ()
 Иногамов Н. А. **115**, 20 ();
115, 80 ()
 Исмагилов А. О. **115**, 3 ()
 Исхакзай Просвири Р. М. Х. И. П.
115, 89 ()
 Иудин В. А. **115**, 213 ()
 Кандидов В. П. **115**, 15 ()
 Каркарьян Е. К. **115**, 67 ()
 Кауль А. Р. **115**, 218 ()
 Кац Е. И. **115**, 236 ()
 Квашнин А. Г. **115**, 322 ()
 Квашнин Д. Г. **115**, 103 ()
 Квон З. Д. **115**, 230 ()
 Киямов А. Г. **115**, 190 ()
 Климовских И. И. **115**, 315 ()
 Клумов Б. А. **115**, 117 ()
 Кобелев Н. П. **115**, 110 ();
115, 308 ()
 Ковалев М. С. **115**, 287 ()
 Ковальчук М. В. **115**, 170 ()
 Козлов Д. А. **115**, 230 ()
 Компанец В. О. **115**, 15 ()
 Кончаков Р. А. **115**, 308 ()
 Коржов В. А. **115**, 170 ()
 Королева А. В. **115**, 315 ()
 Кох К. А. **115**, 315 ()
 Кочарян В. Р. **115**, 170 ()
 Красиков К. М. **115**, 150 ()
 Кретьова М. А. **115**, 110 ()
 Кудряшов С. И. **115**, 287 ()
 Кузьмин Е. В. **115**, 287 ()
 Куковицкий Е. Ф. **115**, 270 ()
 Кустов П. Н. **115**, 213 ()
 Лебедев В. Г. **115**, 256 ()
 Левченко А. О. **115**, 287 ()
 Леднев В. Н. **115**, 287 ()
 Лосев А. С. **115**, 59 ()
 Лункин А. В. **115**, 328 ()
 Магадеев Е. Б. **115**, 123 ()
 Майдыковский А. И. **115**, 297 ()
 Макаров А. С. **115**, 110 ();
115, 308 ()
 Макарова Т. П. **115**, 315 ()
 Макаров Г. Н. **115**, 292 ()
 Мамонов Е. А. **115**, 297 ()
 Маркелова М. Н. **115**, 218 ()
 Мельников А. А. **115**, 40 ()
 Митетело Н. В. **115**, 297 ()
 Михайлова Ю. В. **115**, 213 ()
 Михайлов Н. Н. **115**, 230 ()
 Мкртчян А. Г. **115**, 170 ()
 Мнев П. Н. **115**, 59 ()
 Мовсисян А. Е. **115**, 170 ()
 Могилевский М. М. **115**, 28 ()
 Моргун Л. А. **115**, 270 ()
 Москалюк О. А. **115**, 10 ()
 Мурзина Т. В. **115**, 297 ()
 Мухин И. С. **115**, 213 ()
 Низамов Б. А. **115**, 281 ()
 Новиков В. А. **115**, 67 ()
 Остриков С. А. **115**, 287 ()
 Пахомов А. В. **115**, 3 ()
 Перевалов Т. В. **115**, 89 ()
 Перов Е. А. **115**, 80 ()
 Петин А. Н. **115**, 292 ()
 Петрова Е. А. **115**, 213 ()
 Петров Ю. В. **115**, 80 ()
 Половец С. Е. **115**, 150 ()
 Полулях С. Н. **115**, 224 ()
 Попов З. И. **115**, 322 ()
 Потемкин Ф. В. **115**, 71 ()
 Прекул А. Ф. **115**, 139 ()
 Пудалов В. М. **115**, 270 ()
 Пширков М. С. **115**, 281 ()
 Расковалов А. А. **115**, 51 ()
 Розанов А. Н. **115**, 67 ()
 Розанов Н. Н. **115**, 3 ()
 Рыжков М. С. **115**, 230 ()
 Сазонов С. В. **115**, 207 ()
 Санина В. А. **115**, 262 ()
 Сахин В. О. **115**, 270 ()
 Сдвиженский П. А. **115**, 287 ()
 Селиванов Ю. Г. **115**, 40 ()
 Семук Е. Ю. **115**, 224 ()
 Случанко Н. Е. **115**, 150 ()
 Сориа С. **115**, 297 ()
 Сулейманова Д. З. **115**, 71 ()
 Сун Я. **115**, 213 ()
 Суханова Е. В. **115**, 322 ()
 Таланов Ю. И. **115**, 270 ()
 Тарасенко С. В. **115**, 94 ()
 Таргонский А. В. **115**, 170 ()
 Тейгельбаум Г. Б. **115**, 270 ()
 Терещенко О. Е. **115**, 315 ()
 Токсумаков А. Н. **115**, 103 ()
 Усольцев А. С. **115**, 270 ()
 Федянин А. А. **115**, 157 ()
 Филипов В. Б. **115**, 150 ()
 Филипов А. В. **115**, 197 ()
 Фортова С. В. **115**, 80 ()
 Ханнанов Б. Х. **115**, 262 ()
 Хачатурова Т. А. **115**, 47 ()
 Хилков С. А. **115**, 176 ()
 Хоник В. А. **115**, 110 ();
115, 308 ()
 Хорошилов А. Л. **115**, 150 ()
 Хохлов В. А. **115**, 20 ()
 Худайбердиев Д. А. **115**, 230 ()
 Цзиао Ц. Ч. **115**, 110 ()
 Цышкин А. Н. **115**, 3 ()
 Чекалин С. В. **115**, 15 ();
115, 40 ()
 Чекерес О. С. **115**, 59 ()

- Чен Л. -Дж. **115**, 144 ()
Чень Ц. **115**, 287 ()
Чернозатонский Л. А. **115**, 103 ();
115, 184 ()
Чернышов А. А. **115**, 28 ()
Черосов М. А. **115**, 190 ()
Чутунин Д. В. **115**, 28 ()
- Шавров В. Г. **115**, 94 ()
Шепелев В. В. **115**, 80 ()
Шикин А. М. **115**, 241 ();
115, 315 ()
Шилкин Д. А. **115**, 157 ()
Шицевалова Н. Ю. **115**, 150 ()
Щеголихина Н. И. **115**, 139 ()
- Элиович Я. А. **115**, 170 ()
Юдин В. Е. **115**, 10 ()
Юманс Д. Р. **115**, 59 ()
Юсупов Р. **115**, 190 ()
Ярошенко В. В. **115**, 213 ()

Содержание

Том 115, выпуск 5

Астрофизика и космология

Низамов Б.А., Пширков М.С. Ограничения на популяцию космических лучей в радиогало галактики М87 по данным гамма-наблюдений	281
--	-----

Оптика, лазерная физика

Кудряшов С.И., Данилов П.А., Сдвиженский П.А., Леднев В.Н., Чень Ц., Остриков С.А., Кузьмин Е.В., Ковалев М.С., Левченко А.О. Трансформации спектра оптического фотона, возбуждаемого в комбинационном рассеянии в объеме алмаза ультракороткими лазерными импульсами варьируемой длительности	287
--	-----

Макаров Г.Н., Петин А.Н. Индуцированное мощным ИК лазером радиационно-столкновительное вовлечение молекул, не поглощающих лазерное излучение, в резонанс с лазерным полем в двухкомпонентной молекулярной среде	292
---	-----

Майдыковский А.И., Мамонов Е.А., Митетело Н.В., Сория С., Мурзина Т.В. Двухфотонная лазерная литография активных резонаторных микроструктур	297
---	-----

Конденсированное состояние

Shvetsov O.O., Barash Yu.S., Timonina A.V., Kolesnikov N.N., Deviatov E.V. Josephson spin-valve realization in the magnetic nodal-line topological semimetal Fe_3GeTe_2	304
---	-----

Volovik G.E. Vortices in polar and β phases of ^3He	306
--	-----

Кончаков Р.А., Макаров А.С., Аронин А.С., Кобелев Н.П., Хоник В.А. Упругие диполи в кристаллических и стеклообразных алюминии и высокоэнтропийном сплаве $\text{Fe}_{20}\text{Ni}_{20}\text{Cr}_{20}\text{Co}_{20}\text{Cu}_{20}$	308
---	-----

Глазкова Д.А., Естюнин Д.А., Климовских И.И., Макарова Т.П., Терещенко О.Е., Кох К.А., Голяшов В.А., Королева А.В., Шикин А.М. Электронная структура магнитных топологических изоляторов серии $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ при изменении концентрации атомов Sb	315
--	-----

Суханова Е.В., Квашнин А.Г., Агамалян М.А., Захарян А.А., Попов З.И. Карта двумерных соединений халькогенидов вольфрама (W-S, W-Se, W-Te) на основе эволюционного поиска USPEX	322
--	-----

Разное

Лункин А.В. Эффект бабочки в системе квантовых точек в модели Сачдева–Йе–Китаева	328
--	-----

Содержание
Том 115, выпуск 6
Поля, частицы, ядра

Осипов А.А. Массы легких кварков в теории с динамическим нарушением киральной симметрии 339

Оптика, лазерная физика

Саргсян А., Пихлер Г., Саркисян Д. Исследование взаимодействия атомов калия с поверхностью сапфира с использованием сверхтонкой спектроскопической ячейки 346

Моисеев С.А., Перминов Н.С., Желтиков А.М. Многорезонаторная квантовая память с одиночными атомами 353

Плазма, гидро- и газодинамика

Мельников А.В., Вершков В.А., Грашин С.А., Драбинский М.А., Елисеев Л.Г., Земцов И.А., Крупин В.А., Лахин В.П., Лысенко С.Е., Немец А.Р., Нургалиев М.Р., Харчев Н.К., Хабанов Ф.О., Шелухин Д.А. Исследование геодезических акустических и альвеновских колебаний в тороидальных термоядерных установках (Миниобзор) 360

Конденсированное состояние

Матвеев О.В., Романенко Д.В., Морозова М.А. Линейные и нелинейные эффекты в структурах на основе магнитных кристаллов и полупроводников 379

Подливаев А.И. Двухслойный графен – Стоун-Уэльсовский графен: структура, устойчивость и межслоевая теплопроводность 384

Lebed A.G. A chiral triplet quasi-two-dimensional superconductor in a parallel magnetic field 392

Соловаров Н.К., Суханов А.А., Тарасов В.Ф., Заварцев Ю.Д., Кутовой С.А. Коллапс и возрождение электронного спинового эха примесных ионов Yb^{3+} на скрытых частотных гребенках сверхтонких взаимодействий в монокристалле Y_2SiO_5 394

Разное

Ишханян А.М., Крайнов В.П. Качественное рассмотрение эффекта Шарнхорста 401

Текущий авторский указатель тома 115 404

