

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 114

Выпуск 5

10 сентября 2021

*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.ru>

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

© Российская академия наук, 2021

© Редколлегия журнала “Письма в ЖЭТФ” (составитель), 2021

Сличение трех ультрастабильных лазеров через фемтосекундную гребенку частот

К. С. Кудеяров⁺¹⁾, А. А. Головизин⁺, А. С. Борисенко⁺, Н. О. Жаднов⁺, И. В. Заливако⁺, Д. С. Крючков⁺,
Э. О. Чиглинец^{*}, Г. А. Вишнякова⁺, К. Ю. Хабарова⁺⁺, Н. Н. Колачевский^{++*}

⁺ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

^{*} Российский квантовый центр, территория инновационного центра “Сколково”, 121205 Москва, Россия

Поступила в редакцию 7 августа 2021 г.

После переработки 9 августа 2021 г.

Принята к публикации 10 августа 2021 г.

Сличение оптических осцилляторов используется как для определения их спектральных характеристик, так и в качестве инструмента для проведения фундаментальных исследований. Для описания каждой индивидуальной лазерной системы требуется сличение как минимум трех независимых лазерных осцилляторов. Нами выполнено сличение ультрастабильных лазеров с длинами волн 1140, 1550 и 871 нм, расположенных в разных лабораториях ФИАН. Для переноса стабильности между различными спектральными диапазонами использовалась фемтосекундная гребенка частот. При помощи метода “треуголки” получена относительная нестабильность частоты и проанализированы фазовые шумы каждого из лазеров. С использованием данного метода показано, что характеристики лазерной системы на длине волны 871 нм удовлетворяют требованиям для управления квантовым состоянием оптического кубита на квадрупольном переходе в ионе иттербия с естественной шириной 3.1 Гц.

DOI: 10.31857/S1234567821170018

1. Введение. На протяжении последних двадцати лет происходит активное развитие атомных стандартов частоты, обусловленное переходом от микроволнового диапазона частот к оптическому. Современные оптические часы достигли относительной точности, превышающей единицу восемнадцатого знака [1], и относительной нестабильности $3.5 \times 10^{-17}/\sqrt{\tau}$ на времени усреднения τ (в секундах) [2]. Большого прогресса удалось добиться также в увеличении стабильности лазерных источников, являющихся важнейшей частью оптических стандартов [3]. Измерение точности и стабильности оптических стандартов частоты или лазерных осцилляторов требует их сличения между собой. Отметим, что сличение различных стандартов частоты позволяет проводить фундаментальные исследования, такие как поиск темной материи [4], проверка специальной теории относительности [5], измерение гравитационного потенциала Земли [6]. В последние годы высокостабильные лазерные осцилляторы находят все более широкое применение в области квантовых вычислений [7] при манипуляции оптическими кубитами в одиночных ионах [8], где требуется высокая спектральная чистота излучения при возбуж-

дении долгоживущих электронных состояний иона. Исследование характеристик таких лазерных систем является неотъемлемой частью работ при создании оптических часов или квантового вычислителя.

Сличение двух осцилляторов позволяет получить полную информацию о каждом из них только в случае их полной идентичности. В противном случае требуется сличение как минимум трех объектов методом “треуголки” (англ. *three-cornered hat method*) [9]. Если оптические осцилляторы или стандарты работают на близких частотах (интервал <50 ГГц), то сличение проводится путем гетеродинирования их сигналов и измерения характеристик сигналов биений.

При сличении лазерных источников с существенно отличными длинами волн напрямую наблюдать сигнал биений оказывается невозможно. Это обстоятельство длительное время сдерживало развитие оптических стандартов частоты, однако создание фемтосекундной гребенки оптических частот [10] позволило переносить стабильность сигнала как между различными оптическими, так и в радиоволновой диапазон частот. Оптическая гребенка имеет спектр в виде эквидистантных пиков в диапазоне от оптических частот до ближнего ИК, что позволяет проводить сличение лазеров с разными длинами волн,

¹⁾e-mail: kost1994@yandex.ru

сформировав биения каждого из источников с соответствующей спектральной компонентой гребенки. При этом сама гребенка фактически не вносит дополнительной нестабильности в процедуру сличения. В одной из возможных схем измерения [11] используется регистрация биений оптических осцилляторов с гребенкой, стабилизированной по микроволновому стандарту. Другим вариантом является привязка частоты повторения гребенки к частоте одного из исследуемых лазеров, что позволяет передать стабильность этого осциллятора всем спектральным компонентам гребенки и сличить их с другими осцилляторами. Аналогичная схема может быть использована для передачи стабильности между лазерами на различных длинах волн [12].

В ФИАНе ведутся работы по созданию оптических часов (на нейтральных атомах тулия [13, 14] и на одиночном ионе иттербия [15]), а также ультрастабильного лазерного источника на длине волны 1550 нм [16]. Создание высокостабильного осциллятора в оптическом С-диапазоне позволит передавать его стабильность лазерным источникам в других лабораториях, используя волоконные [17] и воздушные [18] когерентные каналы передачи. Именно такой подход позволил стронциевому стандарту частоты достичь рекордных показателей стабильности [2].

Часовой электро-квадрупольный переход ${}^2S_{1/2}$ ($F = 0, m_f = 0$) \rightarrow ${}^2D_{3/2}$ ($F = 2, m_f = 0$) в ионе ${}^{171}\text{Yb}^+$ имеет малую чувствительность к внешним полям, не подвержен сдвигу за счёт линейного эффекта Зеемана, обладает малой естественной шириной линии, равной 3.1 Гц. Кроме того, все операции с данным ионом могут быть осуществлены при помощи простых и доступных диодных лазерных источников [19], что объясняет его широкое применение в области оптических стандартов частоты. Указанные свойства также открывают перспективы для использования часового перехода в ионе иттербия в роли кубита. Состояниями оптических кубитов (в отличие от микроволновых) можно управлять при помощи одного лазерного пучка, что дает большую вариативность в проектировании ионных ловушек для задач квантовых вычислений, открывает потенциал для масштабирования и упрощает адресацию. Также на оптических кубитах была продемонстрирована наибольшая достоверность операций приготовления и считывания состояния ионов [20].

Время дефазировки оптических кубитов ограничено величиной, обратной к ширине спектральной линии возбуждающего излучения, поэтому для проведения квантовых вычислений необходимо исполь-

зовать лазерные системы с узкой спектральной линией. Для проведения многокубитных операций на колебательных боковых частотах в ионных квантовых вычислителях особое значение имеет уровень фазовых шумов лазера на расстоянии нескольких МГц от несущей. Шумы излучения в этом диапазоне (например, “серво-пики” системы стабилизации частоты) могут приводить к нежелательным переходам между колебательными подуровнями, что снижает точность операции. Подавить данный эффект можно увеличением ширины петли обратной связи, либо фильтрацией излучения при помощи внешнего резонатора [21].

В данной работе описывается схема и приводятся результаты сличения методом “треуголки” 1550 нм лазера с лазерами, используемыми для возбуждения часовых переходов в атомах тулия (1140 нм) и ионах иттербия (871 нм).

2. Исследуемые лазерные системы. В ходе эксперимента проводилось сличение трех лазерных систем. Одна из них – волоконный эрбиевый лазер Koheras AdjustIK E15 с длиной волны 1550 нм, стабилизированный по резонатору Фабри–Перо длиной 77.5 мм из монокристаллического кремния. Резонатор содержится в вакуумном криостате при температуре нулевого теплового расширения кремния 124 К. В качестве зеркал резонатора используются многослойные кристаллические покрытия из AlGaAs/GaAs на кремниевых подложках [22].

Кроме того, в сличении участвовали лазерные системы с длинами волн 1140 нм (используемая для спектроскопии магнито-дипольного перехода $4f^{13}6s^2(J = 7/2) \rightarrow 4f^{13}6s^2(J = 5/2)$ в атомах ${}^{169}\text{Tm}$ [23]) и 871 нм (после удвоения используемая для спектроскопии квадрупольного перехода ${}^2S_{1/2} \rightarrow {}^2D_{3/2}$ с длиной волны 435.5 нм в ионах ${}^{171}\text{Yb}^+$ [24]). Обе системы включают в себя диодные лазеры Toptica DL-pro, стабилизированные по резонаторам из стекла ULE длиной 77.5 мм. Резонатор для лазера 1140 нм имеет подложки зеркал также из стекла ULE, в то время как в резонаторе для лазера 871 нм подложки выполнены из плавленого кварца, что позволяет понизить уровень нестабильности, вносимой тепловыми шумами, но усложняет процесс стабилизации температуры в точке нулевого теплового расширения [25].

3. Схема сличения. Процедура сличения проводилась в лаборатории ФИАН, в которой расположен репер частоты на одиночном ионе иттербия и фемтосекундная гребенка частот (FFC), изготовленная в России фирмой “Авеста Проект”. Излучение лазеров на длинах волн 1550 и 1140 нм доставляется из

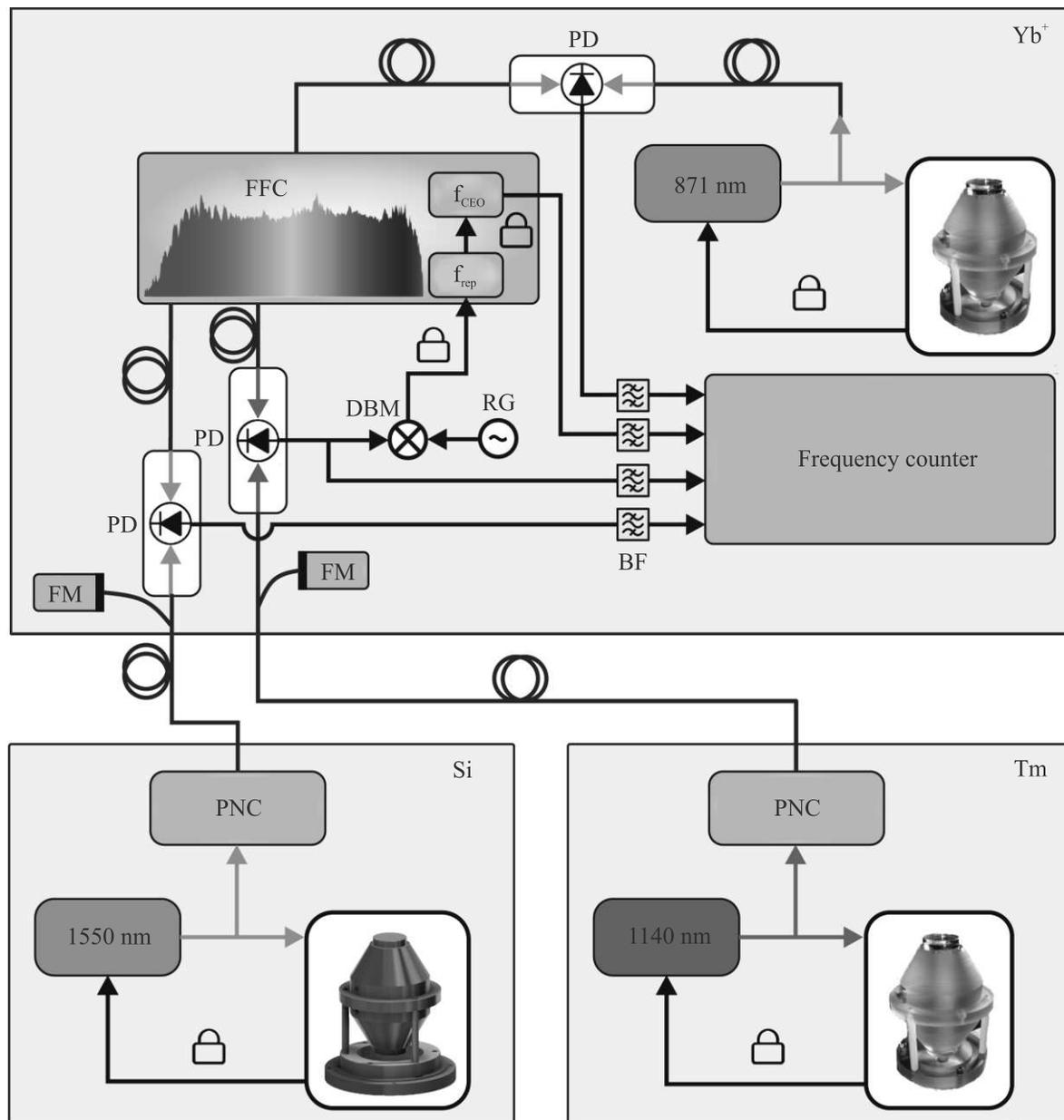


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема сличения трех ультрастабильных лазеров в ФИАНе. Все три лазера размещены в различных лабораториях (Yb^+ , Si, Tm), соединенных волоконными линиями. FFC – фемтосекундная гребенка частот, f_{rep} – частота повторений гребенки, f_{CEO} – офсетная частота гребенки, PD – фотодетектор, FM – фарадеевское зеркало, DBM – двойной балансный смеситель, RG – опорный генератор, PNC – блок компенсации фазовых шумов, BF – полосовые фильтры. Замком обозначена фазовая привязка

других лабораторий по одномодовым оптическим волоконным линиям длиной 10–100 м (рис. 1). Относительная нестабильность частоты, вносимая шумами оптоволоконных каналов передачи из-за флуктуаций температуры и вибраций, может составлять порядка 10^{-15} на временах усреднения 1–1000 с [26]. Блоки компенсации фазовых шумов (PNC) позволяют исключить их влияние, используя для регистрации фа-

зовых шумов часть переданного сигнала, отраженную отправителю обратно.

Сличение осуществляется через фемтосекундную гребенку оптических частот на основе Er^{3+} волокна (Avesta EFO-COMB) с частотой повторений около 100 МГц. Данная гребенка имеет отдельные оптические выходы для каждой длины волны, участвующей в сличении. Так как для каждого из выходов исполь-

зается отдельная цепь преобразования оптического сигнала (оптический усилитель, нелинейное волокно и т.д.), перенос стабильности при помощи такой гребенки может вносить шумы на уровне 10^{-16} , что необходимо учитывать при анализе результатов сличения [27]. Излучение гребенки на каждой из используемых длин волн доставляется по коротким (около 2 м) волоконным линиям к блокам регистрации сигнала оптических биений на основе балансных фотодетекторов (PD). Все сигналы биений, а также регистрируемая офсетная частота гребенки, пропускаются через полосовые фильтры и записываются при помощи счетчика К + К FXE в П-режиме. Частота повторений гребенки выбиралась такой, чтобы все сигналы биений имели частоту в диапазоне работы счетчика (до 60 МГц).

Биения с лазером 1140 нм используются для привязки частоты повторений фемтосекундной гребенки к оптическому реперу. Сигнал биений смешивается на двойном балансном смесителе с сигналом опорного генератора (RG), стабилизированного по пассивному водородному мазеру. Выходной сигнал смесителя используется для подачи обратной связи на электрооптический модулятор и пьезопривод. Офсетная частота гребенки привязывается к сигналу частоты повторений, частота которого делится на 5.

4. Метод “треуголки”. В качестве величины, характеризующей нестабильность частоты осциллятора, обычно используется девиация Аллана σ [28]. В случае, если три независимых осциллятора имеют близкие частоты, и можно напрямую наблюдать их биения на частотах $f_{12} = |f_1 - f_2|$, $f_{13} = |f_1 - f_3|$, $f_{23} = |f_2 - f_3|$, метод “треуголки” позволяет вычислить индивидуальные нестабильности осцилляторов $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ из нестабильностей частот биений $\sigma_{12}, \sigma_{23}, \sigma_{13}$:

$$\begin{aligned}\sigma_1^2 &= \frac{1}{2}(\sigma_{12}^2 + \sigma_{13}^2 - \sigma_{23}^2), \\ \sigma_2^2 &= \frac{1}{2}(\sigma_{23}^2 + \sigma_{12}^2 - \sigma_{13}^2), \\ \sigma_3^2 &= \frac{1}{2}(\sigma_{23}^2 + \sigma_{13}^2 - \sigma_{12}^2).\end{aligned}\quad (1)$$

При этом достаточно измерить частоты биений f_{12}, f_{13} , а частоту биений f_{23} можно вычислить как $f_{23} = |f_{12} \pm f_{13}|$.

При использовании фемтосекундной гребенки частот, которая позволяет переносить стабильность осциллятора в другой спектральный диапазон, требуется модификация формул (1). Пусть измеряются частоты биений оптических осцилляторов A, B, C с гребенкой:

$$f_{A \text{ beat}} = \pm(n_A f_{\text{rep}} + f_{\text{CEO}} - f_A),$$

$$f_{B \text{ beat}} = \pm(n_B f_{\text{rep}} + f_{\text{CEO}} - f_B), \quad (2)$$

$$f_{C \text{ beat}} = \pm(n_C f_{\text{rep}} + f_{\text{CEO}} - f_C),$$

где f_{rep} – частота повторений гребенки, f_{CEO} – офсетная частота гребенки, n_A, n_B, n_C – номера спектральных пиков гребенки, ближайших по частоте к f_A, f_B, f_C (их необходимо определить заранее, например, при помощи измерителя длин волн). Знак “+” выбирается, если частота соответствующей спектральной компоненты гребенки больше частоты оптического осциллятора, знак “–” – в противном случае; для простоты далее выберем знак “+” для всех биений. Тогда можно рассчитать “приведенные” к f_A частоты $f_{12} = \frac{n_A}{n_B}(f_{B \text{ beat}} - f_{\text{CEO}})$, $f_{13} = \frac{n_A}{n_C}(f_{C \text{ beat}} - f_{\text{CEO}})$, $f_{23} = f_{13} - f_{12}$ и вычислить по формулам (1) индивидуальные нестабильности для частот $f_1 = f_A - f_{\text{CEO}} + f_{A \text{ beat}}$, $f_2 = \frac{n_A}{n_B} f_B$, $f_3 = \frac{n_A}{n_C} f_C$. В случае привязки гребенки к осциллятору A нестабильность $f_{A \text{ beat}}$ (приблизительно равная нестабильности опорного генератора) и нестабильность f_{CEO} можно считать пренебрежимо малыми, тогда требуемые нам нестабильности оптических осцилляторов:

$$\begin{aligned}\sigma_A^2 &= \sigma_1^2, \\ \sigma_B^2 &= \left(\frac{n_B}{n_A}\right)^2 \sigma_2^2, \\ \sigma_C^2 &= \left(\frac{n_C}{n_A}\right)^2 \sigma_3^2.\end{aligned}\quad (3)$$

Другой характеристикой осцилляторов является спектральная плотность мощности (СПМ) фазовых шумов S_φ . Так как S_φ связана с девиацией Аллана [29], все приведенные выше рассуждения справедливы и для нее. Чтобы вычислить СПМ фазовых шумов для каждого осциллятора, достаточно вычислить СПМ сигналов f_{12}, f_{13}, f_{23} , а затем воспользоваться формулами, аналогичными (1) и (3):

$$\begin{aligned}S_1 &= \frac{1}{2}(S_{12} + S_{13} - S_{23}), \\ S_2 &= \frac{1}{2}(S_{23} + S_{12} - S_{13}), \\ S_3 &= \frac{1}{2}(S_{23} + S_{13} - S_{12}), \\ S_A &= S_1, \\ S_B &= \left(\frac{n_B}{n_A}\right)^2 S_2, \\ S_C &= \left(\frac{n_C}{n_A}\right)^2 S_3.\end{aligned}\quad (4)$$

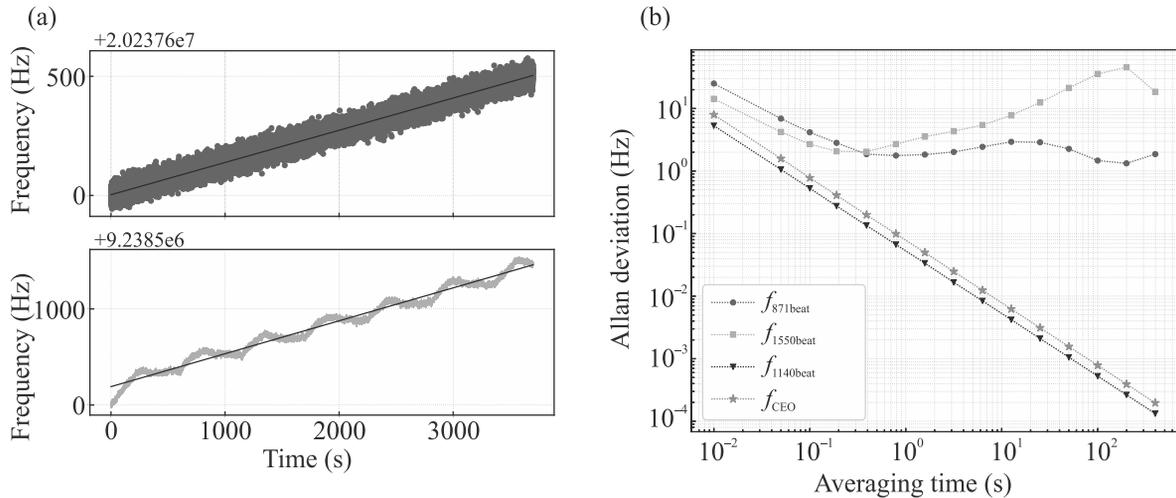


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Частота сигналов биений гребенки, привязанной к лазеру 1140 нм, с лазерами 871 нм (голубой) и 1550 нм (желтый). Черная линия – аппроксимация линейного дрейфа. (б) – Относительная нестабильность частоты биений гребенки, привязанной к лазеру 1140 нм, с лазерами 871 нм (голубые круги), 1550 нм (желтые квадраты), 1140 нм (черные треугольники) и офсетной частоты гребенки (оранжевые звезды)

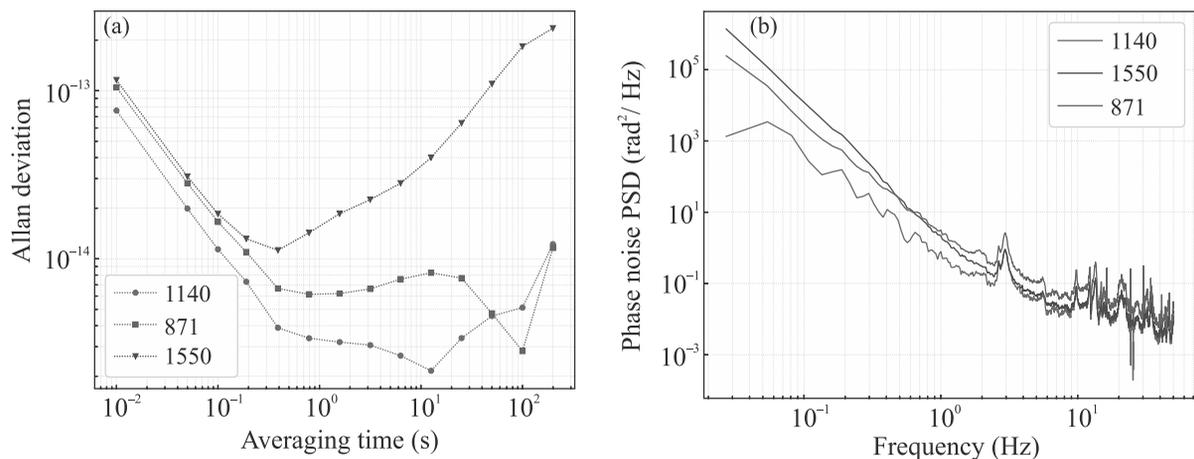


Рис. 3. (Цветной онлайн) Относительная нестабильность частоты (а) и спектральная плотность мощности фазовых шумов (б) лазеров 1140 нм (красные круги), 1550 нм (синие треугольники) и 871 нм (зеленые квадраты)

5. Результаты. Временная зависимость частот биений гребенки, привязанной к лазеру 1140 нм, с лазерами 871 и 1550 нм, приведена на рис. 2а. Линейный дрейф частоты биений с лазером 871 нм составил 145 мГц/с, с лазером 1550 нм – 343 мГц/с. На рисунке 2б приведена нестабильность частоты этих сигналов после вычитания линейного дрейфа, а также нестабильность стабилизируемого сигнала биений лазера 1140 нм с гребенкой и офсетной частоты. Сигналы f_{CEO} и $f_{1140\text{beat}}$ имеют нестабильность на порядок меньше, чем нестабильности $f_{871\text{beat}}$ и $f_{1550\text{beat}}$ на временах усреднения более 40 мс.

На рисунке 3 приведены относительные нестабильности и спектральные плотности фазовых шумов трех исследуемых лазеров, вычисленные по фор-

мулам из предыдущего раздела. На временах усреднения 40 мс – 20 с нестабильность лазеров 871 и 1140 нм остается приблизительно постоянной и составляет $6\text{--}8 \times 10^{-15}$ и $2\text{--}4 \times 10^{-15}$ соответственно. Нестабильность лазера 1550 нм достигает своего минимума на времени усреднения 30 мс и затем возрастает. Это вызвано колебаниями частоты с периодом порядка 600 с, что свидетельствует, по-видимому, о воздействии на систему флуктуаций температуры в лаборатории. Спектральная плотность мощности шумов всех трех лазеров имеет пики похожей формы на частотах 3, 10, 12, 13.5, 21 Гц и далее, что свидетельствует о коррелированности шумов в этом частотном диапазоне. Так как лазеры расположены в различных лабораториях, то наиболее вероятно, что

данные шумы вносятся в уже переданные в лабораторию Yb^+ сигналы в процессе сличения, например, при работе кондиционера.

Продемонстрированные характеристики позволяют использовать лазеры 1140 и 871 нм для спектроскопии узких оптических переходов без существенного уширения спектральных линий переходов (до 10 Гц, что удовлетворяет текущим требованиям). В качестве примера на рис. 4 приведен спектр часо-

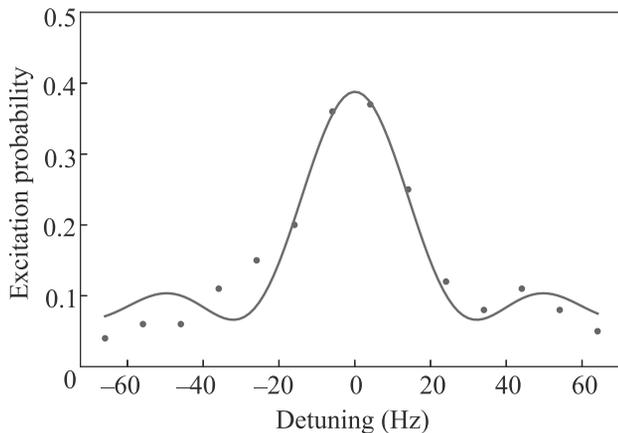


Рис. 4. (Цветной онлайн) Вероятность возбуждения часового перехода в ионе иттербия при возбуждении второй гармоникой лазера на длине волны 871 нм (435.5 нм), охарактеризованной в данной работе. Синие точки – экспериментальные данные, красная линия – аппроксимация функцией sinc. Время возбуждения – 30 мс

го перехода в одиночном ионе иттербия при возбуждении π -импульсами лазера 871 нм длительностью 30 мс. Ширина спектральной линии при аппроксимации функцией sinc составила 30 Гц, что соответствует Фурье-ограничению и указывает на то, что другие виды уширения не вносят существенного вклада. Характеристики лазера с длиной волны излучения 871 нм удовлетворяют требованиям для управления квантовым состоянием оптического кубита на квадрупольном переходе в ионе иттербия и для опроса указанного перехода в оптических часах. Для оценки применимости данного лазера в многокубитных операциях необходимо провести измерение уровня фазовых шумов в диапазоне нескольких МГц от несущей.

6. Заключение. Измерение спектральных характеристик лазеров, являющихся важной частью оптических стандартов частоты и квантовых вычислителей, может быть реализовано методом “треуголки”. В представленной работе было проведено сличение трех лазеров с длинами волн 871, 1140 и 1550 нм с применением переноса стабильности через

фемтосекундную гребенку частот. Результаты сличения свидетельствуют о том, что две лазерные системы (871 и 1140 нм) обладают относительной нестабильностью частоты менее 10^{-14} на временах усреднения 300 мс – 100 с. Данные лазеры используются для возбуждения часовых переходов в ионе иттербия (871 нм) и атомах тулия (1140 нм). Несмотря на то, что вновь созданная лазерная система 1550 нм значительно уступает по характеристикам двум другим, ее использование в данном эксперименте позволило впервые выполнить детальный анализ их спектральных характеристик. Улучшение спектральных характеристик лазера 1550 нм требует доработки оптоэлектронной и вакуумных частей и планируется в ближайшее время.

Основные работы по созданию схемы сличения трех лазерных систем и измерению стабильности их частот были выполнены К. Кудеяровым при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта 20-32-90044. Исследования, связанные с измерением вероятности возбуждения часового перехода в ионе иттербия второй гармоникой лазера на длине волны 871 нм, выполнялись при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках научного проекта 19-12-00274.

1. S. M. Brewer, J.-S. Chen, A. M. Hankin, E. R. Clements, C. W. Chou, D. J. Wineland, D. B. Hume, and D. R. Leibbrandt, *Phys. Rev. Lett.* **123**(3), 033201 (2019).
2. E. Oelker, R. B. Hutson, C. J. Kennedy et al. (Collaboration), *Nature Photon.* **13**(10), 714 (2019).
3. D. G. Matei, T. Legero, S. Häfner, C. Grebing, R. Weyrich, W. Zhang, L. Sonderhouse, J. M. Robinson, J. Ye, F. Riehle, and U. Sterr, *Phys. Rev. Lett.* **118**(26), 263202 (2017).
4. C. J. Kennedy, E. Oelker, J. M. Robinson, T. Bothwell, D. Kedar, W. R. Milner, G. Edward Marti, A. Derevianko, and J. Ye, *Phys. Rev. Lett.* **125**(20), 201302 (2020).
5. P. Delva, J. Lodewyck, S. Bilicki et al. (Collaboration), *Phys. Rev. Lett.* **118**(22), 221102 (2017).
6. T. Takano, M. Takamoto, I. Ushijima, N. Ohmae, T. Akatsuka, A. Yamaguchi, Y. Kuroishi, H. Munekane, B. Miyahara, and H. Katori, *Nature Photon.* **10**(10), 662 (2016).
7. K. A. Valiev, *Phys.-Uspekhi* **48**, 1 (2005).
8. I. Pogorelov, T. Feldker, C. D. Marciniak, R. Kaubruegger, D. V. Vasilyev, R. van Bijnen, P. Schindler, P. Zoller, R. Blatt, and T. Monz, *PRX Quantum* **2**, 020343 (2021).

9. J. E. Gray and D. W. Allan, *28th Annual Symposium on Frequency Control 29–31 May 1974*, Atlantic City, NJ, USA, IEEE (1974).
10. T. Udem, J. Reichert, R. Holzwarth, and T. W. Hänsch, *Opt. Lett.* **24**(13), 881 (1999).
11. H. R. Telle, B. Lipphardt, and J. Stenger, *Applied Physics B: Lasers and Optics* **74**(1), 1 (2002).
12. C. Hagemann, C. Grebing, T. Kessler, S. Falke, N. Lemke, C. Lisdat, H. Schnatz, F. Riehle, and U. Sterr, *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement* **62**(6), 1556 (2013).
13. D. Sukachev, A. Sokolov, K. Chebakov, A. Akimov, N. Kolachevsky, and V. Sorokin, *JETP Lett.* **92**, 703 (2010).
14. A. Golovizin, E. Fedorova, D. Tregubov, D. Sukachev, K. Khabarova, V. Sorokin, and N. Kolachevsky, *Nat. Commun.* **10**(1), 1 (2019).
15. I. Zalivako, I. Semerikov, A. Borisenko, V. Smirnov, P. Vishnyakov, M. Aksenov, P. Sidorov, N. Kolachevsky, and K. Khabarova, *Journal of Russian Laser Research* **40**(4), 375 (2019).
16. G. A. Vishnyakova, D. S. Kryuchkov, N. O. Zhadnov, K. S. Kudeyarov, K. Yu. Khabarova, and N. N. Kolachevsky, *AIP Conf. Proc.* **2241**, 5 (2020).
17. K. S. Kudeyarov, G. A. Vishnyakova, K. Y. Khabarova, and N. N. Kolachevsky, *Laser Phys.* **28**(10), 1 (2018).
18. K. S. Kudeyarov, D. S. Kryuchkov, G. A. Vishnyakova, N. O. Zhadnov, K. Yu. Khabarova, and N. N. Kolachevsky, *Quantum Electron.* **50**(3), 267 (2020).
19. L. A. Akopyan, I. V. Zalivako, K. E. Lakhmanskiy, K. Yu. Khabarova, and N. N. Kolachevsky, *JETP Lett.* **112**(9), 585 (2020).
20. A. H. Myerson, D. J. Szwer, S. C. Webster, D. T. C. Allcock, M. J. Curtis, G. Imreh, J. A. Sherman, D. N. Stacey, A. M. Steane, and D. M. Lucas, *Phys. Rev. Lett.* **100**(20), 10 (2008).
21. N. Akerman, N. Navon, S. Kotler, Y. Glickman, and R. Ozeri, *New J. Phys.* **17**, 113060 (2015).
22. G. D. Cole, W. Zhang, M. J. Martin, J. Ye, and M. Aspelmeyer, *Nature Photon.* **7**(8), 644 (2013).
23. A. Golovizin, V. Bushmakina, S. Fedorov, E. Fedorova, D. Tregubov, D. Sukachev, K. Khabarova, V. Sorokin, and N. Kolachevsky, *Journal of Russian Laser Research* **40**(6), 540 (2019).
24. I. V. Zalivako, I. A. Semerikov, A. S. Borisenko, M. D. Aksenov, P. A. Vishnyakov, P. L. Sidorov, N. V. Semenin, A. A. Golovizin, K. Yu. Khabarova, and N. N. Kolachevsky, *Quantum Electronics* **50**(9), 850 (2020).
25. T. Legero, T. Kessler, and U. Sterr, *J. Opt. Soc. Am. B* **27**(5), 914 (2010).
26. K. Y. Khabarova, K. S. Kudeyarov, G. A. Vishnyakova, and N. N. Kolachevsky, *Quantum Electron.* **47**(9), 794 (2017).
27. M. Abdel-Hafiz, P. Ablewski, A. Al-Masoudi et al. (Collaboration), arXiv:1906.11495 (2019).
28. D. W. Allan, *Proc. IEEE* **54**(2), 221 (1966).
29. F. Riehle, *Frequency Standards. Basics and Applications*, Wiley, Weinheim (2004); Fizmatlit, Moscow (2009).

Особенности возбуждения квантовых систем малоцикловыми аттосекундными световыми импульсами – интерференция площадей огибающей и электрической площади импульса

Р. М. Архипов^{+*1)}, М. В. Архипов⁺¹⁾, И. Бабушкин^{× 1)}, А. В. Пахомов⁺¹⁾, Н. Н. Розанов^{*1)}

⁺ Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 С.-Петербург, Россия

^{*} Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, 194021 С.-Петербург, Россия

[×] University of Hannover and Cluster of Excellence PhoenixD (Photonics, Optics, and Engineering – Innovation Across Disciplines), 30167 Hannover, Germany

Поступила в редакцию 7 августа 2021 г.

После переработки 11 августа 2021 г.

Принята к публикации 11 августа 2021 г.

В заметке рассматриваются различия в возбуждении дискретных уровней квантовой системы при переходе от возбуждающих многоцикловых импульсов к коротким полупериодным. Показано, как при уменьшении числа циклов колебаний поля в импульсе система переходит из режима периодического воздействия к режиму воздействия в виде единственного кратковременного “толчка”. В обоих случаях воздействие зависит от площади импульса, которая, однако, для субциклового импульса равна интегралу по времени от напряженности поля, а для импульса, содержащего несколько циклов, интегралу от огибающей импульса. Обсуждается интерференция площадей огибающей и электрической площади импульсов и ее возможное проявление в экспериментах по возбуждению атомных систем.

DOI: 10.31857/S123456782117002X

Введение. В настоящее время экспериментально получены электромагнитные импульсы аттосекундной длительности [1]. Подобные импульсы активно применяются для изучения динамики волновых пакетов электронов в различных средах, поскольку периоды осцилляций таких пакетов в атомных системах лежат в аттосекундном диапазоне [2, 3].

Получаемые на практике аттосекундные импульсы содержат несколько осцилляций поля. При сокращении числа осцилляций поля и переходе к предельно коротким световым импульсам с длительностью менее периода поля возникают униполярные полупериодные импульсы. Они содержат полуволну поля большой амплитуды [4–8]. Для униполярных импульсов важной характеристикой является электрическая площадь, определяемая в каждой точке пространства как

$$S_E = \int_{t=-\infty}^{+\infty} E(t)dt, \quad (1)$$

где E – напряженность электрического поля и t – время [9, 10].

Наличие мощного униполярного фронта открывает возможности в использовании таких импульсов для эффективного управления динамикой волновых пакетов в веществе и ускорения зарядов [7, 11–18].

Получение униполярных полупериодных импульсов является трудной экспериментальной задачей. Обычно получают квазиуниполярные полуволновые импульсы. Они содержат мощную полуволну поля одной полярности и длинный задний фронт противоположной полярности [4–7]. Как было показано в [13], действие таких импульсов часто похоже на действие чисто униполярных импульсов.

Как показывают результаты теоретических и экспериментальных исследований, характер взаимодействия униполярных и квазиуниполярных импульсов с квантовыми системами существенно отличается от ситуации, когда система взаимодействует с длинными многоцикловыми импульсами [4, 7, 11–18]. Это требует расширения сложившихся представлений о взаимодействии предельно коротких импульсов с микрообъектами. В частности, это относится к стандартной теории фотоионизации Келдыша, в которой переход от сильного поля к слабому определяется значением параметра Келдыша [19].

Действительно, теоретические исследования показывают, что электрическая площадь, а не энер-

¹⁾e-mail: arkhipovrostislav@gmail.com; m.arkhipov@spbu.ru;
babushkin@iqo.uni-hannover.de; antpakhom@gmail.com;
nnrosanov@mail.ru

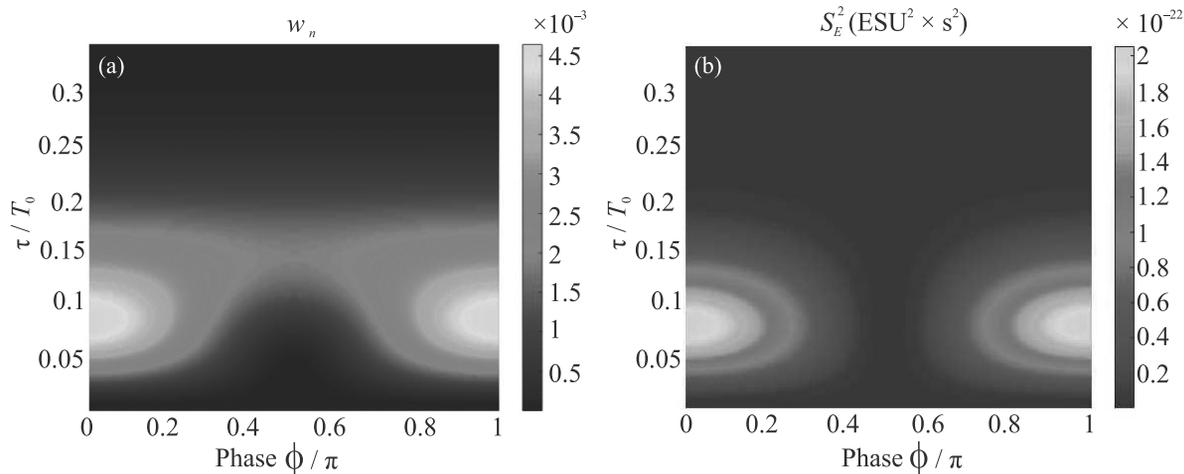


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Зависимость населенности возбужденного состояния $w_n(\tau, \phi)$ от фазы импульса ϕ и его длительности τ . (б) – Зависимость квадрата электрической площади импульса S_E^2 от фазы импульса ϕ и его длительности τ

гия импульса определяет воздействие субцикловых квазиуниполярных импульсов на квантовые системы [7, 11–18]. Поэтому для характеристики степени их воздействия на квантовые системы можно вводить новые физические величины. В частности, недавно было предложено ввести такую величину, как “атомная мера электрической площади”, которая используется для оценки эффективности действия униполярных и квазиуниполярных импульсов на квантовые системы [20].

В данной работе на основе приближенного решения уравнения Шредингера в приближении слабого поля анализируется вопрос о возбуждении связанных состояний атомных систем в переходном режиме от предельно коротких к длинным импульсам. Рассматривается, какие параметры импульсов возбуждения являются определяющими при возбуждении связанных состояний, а какие несущественны при таком переходе. Показана возможность интерференционного взаимодействия электрической площади и площади огибающей.

Основные формулы. Пусть система возбуждается импульсом с огибающей, которая имеет гауссову форму:

$$E_e(t) = E_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}} \cos(\Omega t + \phi). \quad (2)$$

Здесь Ω – несущая частота импульса, ϕ – фаза (*carrier envelope phase*, CEP). Электрическая площадь такого импульса $S_E = E_0 \tau \sqrt{\pi} \exp(-\Omega^2 \tau^2 / 4) \cos \phi$.

Пусть система до воздействия импульса находилась в основном состоянии. В первом порядке теории возмущений можно получить следующее выра-

жение для населенности n -го возбужденного состояния квантовой системы w_n в дискретном спектре после воздействия импульса [14]:

$$w_n = 0.5\pi \frac{d_{1n}^2}{\hbar^2} E_0^2 \tau^2 \exp\left[-\frac{(\omega_{1n}^2 + \Omega^2)\tau^2}{2}\right] \times [\cosh(\omega_{1n}\Omega\tau^2) + \cos 2\phi]. \quad (3)$$

Здесь d_{1n} – дипольный момент перехода.

Рассмотрим предельные случаи предельно коротких и длинных импульсов.

Случай 1. Предельно короткий импульс, $\Omega\tau \ll 1$. Предположим, что частота импульса превосходит собственные частоты переходов квантовой системы, $\Omega \gg \omega_{1n}$. Тогда в первом приближении в показателе первой экспоненты в (3) пренебрежем слагаемым ω_{1n}^2 . При $\Omega\tau \ll 1$ и $\omega_{1n}\tau \ll 1$ гиперболический косинус в скобках выражения (3) будет порядка 1. Выражение (3) упрощается и принимает вид:

$$w_n = 0.5\pi \frac{d_{1n}^2}{\hbar^2} E_0^2 \tau^2 \exp\left[-\frac{\Omega^2 \tau^2}{2}\right] [1 + \cos 2\phi] = \frac{d_{1n}^2}{\hbar^2} \pi E_0^2 \tau^2 \exp\left[-\frac{\Omega^2 \tau^2}{2}\right] (\cos \phi)^2 = \frac{d_{1n}^2}{\hbar^2} S_E^2. \quad (4)$$

Видно, что в случае воздействия субциклового импульса его воздействие определяется именно электрической площадью импульса. Аналогичный результат получен ранее в приближении внезапных возмущений, если пренебречь собственным гамильтонианом системы во время действия импульса [11, 12, 20].

Таким образом, в случае предельно коротких импульсов их воздействие определяется электрической площадью импульса.

Рассмотрим численный пример. Возьмем следующие параметры среды: частота перехода: $\omega_{12} = 2.35 \cdot 10^{15}$ рад/с ($\lambda_{12} = 800$ нм), $d_{12} = 5$ Д. Данные значения типичны для атомов щелочных металлов.

Параметры импульса возбуждения: частота $\Omega = 3\omega_{12}$, амплитуда $E_0 = 2 \cdot 10^7$ В/см. Зависимость $w_n(\tau, \phi)$, построенная по общей формуле (2), приведена на рис. 1а. Рисунок 1б иллюстрирует зависимость квадрата электрической площади импульса от τ и ϕ .

Действительно, при малых длительностях импульса, $\Omega\tau \ll 1$, согласно (4), населенности определяются электрической площадью. Рассмотрим область, где длительность импульса мала.

В узком участке коротких длительностей импульса $0.05T_0 < \tau < 0.15T_0$, где T_0 – период резонансного перехода, наблюдается сильная зависимость от фазы импульса. Электрическая площадь имеет максимумы при $\phi = 0, \pi$. В этих областях изменение населенности w_n достигает наибольшего значения. А при $\phi = \pi/2$ w_n остается близким к нулю, так как площадь импульса близка к нулю. При дальнейшем росте длительности импульса населенность стремится к нулю, несмотря на увеличение энергии импульса.

Случай 2. Длинный импульс, $\Omega\tau \gg 1$. В этом случае в скобках (3) при большом значении аргумента косинус гиперболический $\cosh(\omega_{1n}\Omega\tau^2) \gg 1$. Это позволяет пренебречь слагаемым $\cos 2\phi$ по сравнению с $\cosh(\omega_{1n}\Omega\tau^2)$. Тогда (3) упрощается и принимает вид:

$$w_n = 0.5 \frac{d_{1n}^2}{\hbar^2} \pi E_0^2 \tau^2 \times \exp \left[-\frac{(\omega_{1n}^2 + \Omega^2)\tau^2}{2} \right] \cosh(\omega_{1n}\Omega\tau^2) = 0.5\Theta^2 \exp \left[-\frac{(\omega_{1n}^2 + \Omega^2)\tau^2}{2} \right] \cosh(\omega_{1n}\Omega\tau^2). \quad (5)$$

Здесь величина $\Theta \equiv \frac{d_{1n}}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(t) dt = \frac{d_{1n}}{\hbar} E_0 \tau \sqrt{\pi}$ – площадь огибающей импульса, которая впервые была введена для длинных многоцикловых лазерных импульсов в теории эффекта самоиндуцированной прозрачности МакКолом и Ханом [21]. Таким образом, в случае длинных многоцикловых импульсов населенность возбужденных состояний пропорциональна площади огибающей импульса. Это хорошо известный результат.

Рассмотрим теперь зависимость эффективности возбуждения от частоты импульса Ω . Рисунок 2 иллюстрирует зависимость $w_n(\Omega, \tau)$.

Для многоцикловых импульсов виден очевидный максимум возбуждения, когда частота импульса совпадает с частотой резонансного перехода. Населенность увеличивается с ростом длительности импульса.

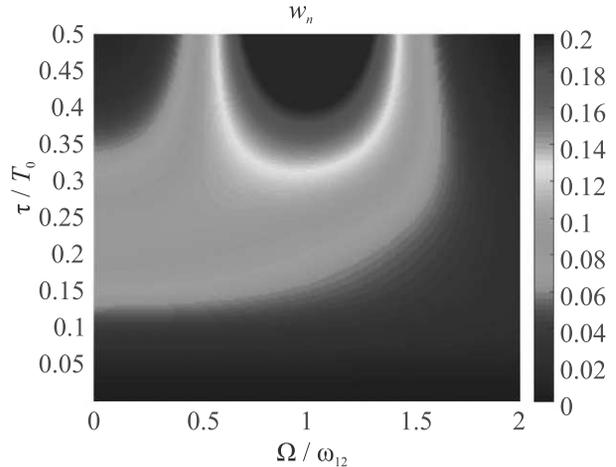


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость населенности возбужденного состояния w_n от частоты импульса Ω и его длительности τ . Частота указана в единицах частоты перехода ω_{12} , а длительность импульса в единицах периода резонансного перехода T_0 . Амплитуда поля $E_0 = 3 \cdot 10^7$ В/см. Остальные параметры такие же, как на рис. 1

С другой стороны, по мере уменьшения длительности, наиболее эффективное возбуждение достигается при $\Omega \rightarrow 0$. Таким образом, униполярный полуволновый импульс, содержащий постоянную составляющую поля на нулевой частоте, способен оказывать эффективное нерезонансное воздействие на атомные системы.

3. Промежуточный случай, $\Omega\tau \sim 1$. Предположим также, что $\Omega \gg \omega_{1n}$. В этом случае оба слагаемых в скобках (3), $\cosh(\omega_{1n}\Omega\tau^2)$ и $\cos 2\phi$, сравнимы друг с другом. Нетрудно видеть, что в этом случае выражение (3) можно записать в виде

$$w_n = \frac{1}{2} \Theta^2 \exp \left[-\frac{\Omega^2 \tau^2}{2} \right] \cosh(\omega_{1n}\Omega\tau^2) + \frac{1}{2} \frac{d_{1n}^2}{\hbar^2} S_E^2 - \frac{1}{2} \Theta^2 \exp \left[-\frac{\Omega^2 \tau^2}{2} \right]. \quad (6)$$

В данном промежуточном случае важна как площадь огибающей Θ , так и электрическая площадь S_E .

Выражение (6) получено для импульса в форме (2). С увеличением длительности импульса 2 слагаемое с S_E стремится к нулю. И начинает доминировать воздействие за счет площади огибающей.

Рассмотрим иную ситуацию, когда импульс состоит из нескольких циклов колебаний и имеет исчезающее значение электрической площади S_E . Такой импульс можно представить в виде одиночного короткого, накладывающегося на многоцикловый гладкий импульс с плавной огибающей. Выражение для такого импульса может иметь следующий вид:

$$E(t) = E_{01}e^{-\frac{(t-\Delta t)^2}{\tau_1^2}} + E_{02}e^{-\frac{t^2}{\tau_2^2}} \sin \Omega t. \quad (7)$$

Напомним, что в случае короткого импульса населенность уровня периодически зависит от фазы импульса ϕ . Аналогичный эффект следует ожидать и в случае возбуждения импульса видом (7) при изменении задержки Δt . Физически это значит, что воздействие униполярного импульса, которое описывается членом, пропорциональным его электрической площади, может быть как усилено, так и скомпенсировано многоцикловой составляющей поля. Таким образом, имеет место своеобразная “интерференция” между площадью огибающей импульса и электрической площадью.

В рамках используемой нами теории возмущений этот эффект можно объяснить следующим образом. Мы имеем дело с линейной суперпозицией двух импульсов. Каждое воздействие можно рассматривать отдельно, а затем их просуммировать. Суммирование будет происходить с учетом фаз состояний волновых функций.

Пример численного расчета, показывающий такую интерференцию, дан на рис. 3.

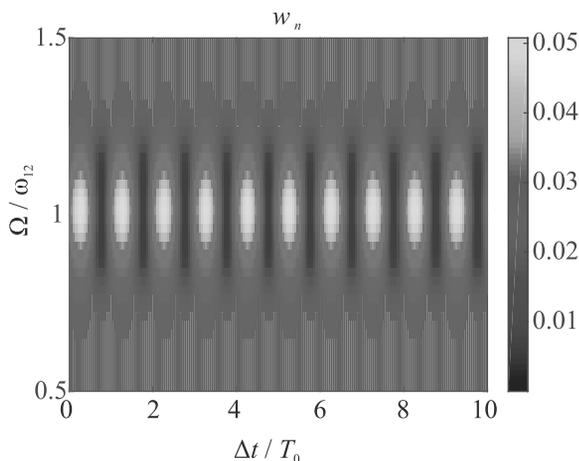


Рис. 3. (Цветной онлайн) Расчет изменения населенности под действием импульса с формой, определяемой (7), при изменении параметра Δt и несущей частоты импульса относительно частоты перехода. Параметры: $E_{01} = 10^7$ В/см, $\tau_1 = T_0/4$, $E_{02} = E_{01}/6$, $\tau_2 = 2T_0$

При данных параметрах имеет место гармоническая модуляция заселения уровня в зависимости от сдвига мощного всплеска поля относительно многоциклового импульса. В рамках используемого приближения оказывается, что даже если короткий импульс находится за пределами многоцикловой пьедестала, такая интерференция остается эффективной. Физический механизм “интерференции”, обуславливающий исчезновение возбуждения, связан с тем, что один импульс возбуждает, а второй девозбуждает, снимает возбуждение в среде, поскольку в данном примере их воздействие на систему одинаково, но зависит от момента действия. Подобный механизм обеспечивал селективность возбуждения при воздействии пары униполярных импульсов на переходы в квантовой системе [13].

В работе [4] квазиуниполярные импульсы были получены экспериментально при когерентном сложении многочастотного излучения. Результаты этой работы подтверждают эффективность квазиуниполярных импульсов в возбуждении атомных систем по сравнению с многоцикловыми импульсами. Однако, электрическая площадь импульса в таком случае равна нулю, что отличает наш пример с электрической площадью, не равной нулю, от ситуации, которая реализуется в экспериментах, так как пока не удастся получить аттосекундные униполярные импульсы с большой электрической площадью.

Пример на рис. 4 показывает, что произойдет, если к выражению для импульса (6) добавит слагаемое $-1/8E_{01}e^{-\frac{t^2}{\tau_2^2}}$. Это слагаемое компенсирует положительный всплеск поля и сделает излучение с ненулевой электрической площадью (рис. 4а) биполярным с нулевой электрической площадью (рис. 4б). Сравнение воздействия на населенности униполярного импульса с нулевой электрической площадью при изменении задержки Δt в случае точного резонанса $\Omega = \omega_{12}$ показывает совпадение результатов их действия.

Пример показывает следующие правила. В импульсе с нулевой электрической площадью всплеск поля можно рассматривать как отдельный униполярный импульс. Если положение всплеска может меняться относительно малоамплитудной многоцикловой части импульса, то, казалось бы, незначительные изменения положения могут приводить к значительным изменениям воздействия излучения на резонансные и квазирезонансные переходы в средах. Это происходит за счет “интерференции” электрической площади и площади огибающей импульса.

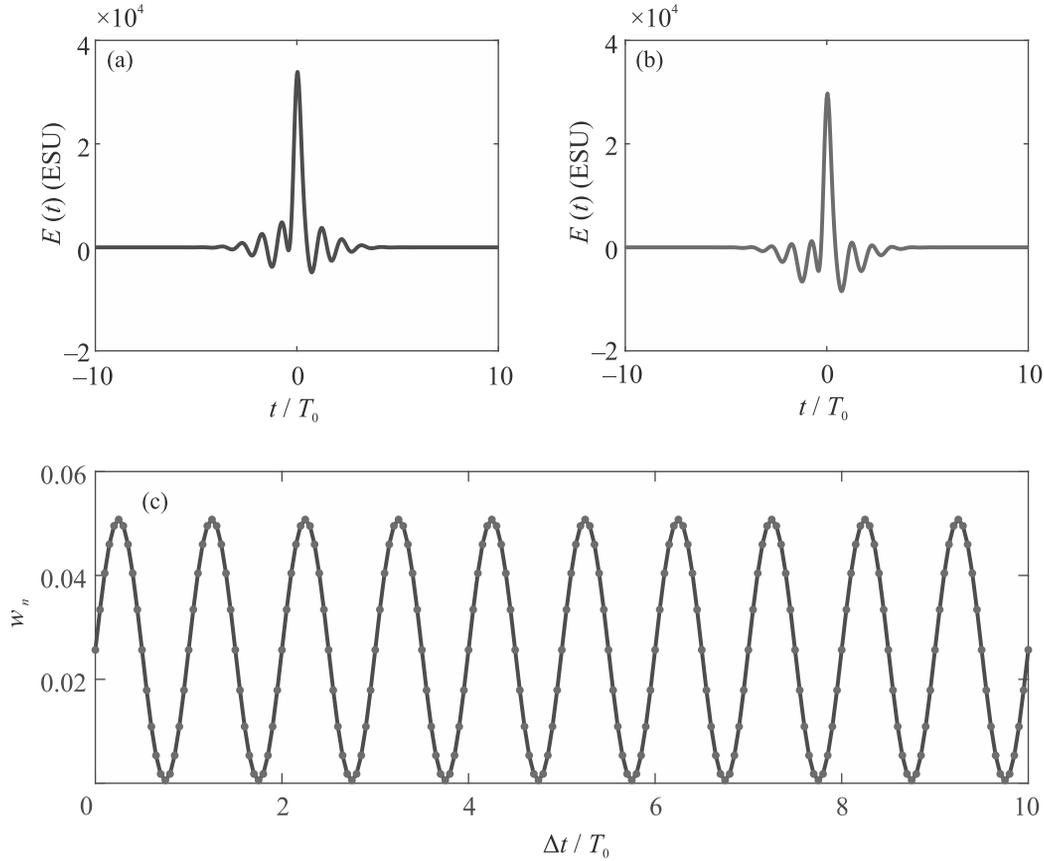


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Импульс с ненулевой электрической площадью; (б) – импульс с нулевой электрической площадью; (с) – результаты воздействия излучения импульсов с ненулевой (синяя линия) и нулевой электрической площадью (красные точки) в зависимости от задержки Δt в случае точного резонанса $\Omega = \omega_{12}$

Возникновение указанного эффекта “интерференции” возможно в экспериментах, подобных проведенным в упомянутой работе [4]. Получающиеся короткие однополярные всплески поля расположены на подставке, содержащей квазигармонические осцилляции. Если между подставкой и всплеском будут возникать неконтролируемые задержки, то возбуждение переходов, частоты которых близки с частотами осцилляций подставки, будет зависеть от задержки и может пропасть, а возбуждение нерезонансных переходов останется.

Заключение. Таким образом, при нерезонансном возбуждении системы полупериодными импульсами их воздействие определяется электрической площадью импульса и сильно зависит от СЕР. А в случае гладких импульсов, содержащих несколько циклов колебаний, возбуждение системы не зависит от СЕР и определяется площадью огибающей импульса.

В промежуточной ситуации воздействие определяют как электрическая площадь, так и площадь огибающей.

Если возникают ситуации, когда в многоцикловом квазирезонансном излучении присутствуют короткие интенсивные всплески, то возбуждение описывается выражением, пропорциональным сумме квадратов электрической площади этих всплесков и квадрата площади огибающей. При этом положение всплеска поля в гладком импульсе может как усиливать, так и ослаблять воздействие на изменение населенности состояний квантовой системы. Возникает своеобразная интерференция между воздействием площадей огибающей и электрической площади импульса.

Последнее обстоятельство может влиять на интерпретацию экспериментов по воздействию многоциклового излучения, содержащего интенсивные короткие всплески, и приводить к плохой воспроизводимости их результатов, если положение всплеска меняется относительно многоциклового части импульса.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 21-72-10028.

1. F. Krausz and M. Ivanov, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 163 (2009).
2. F. Calegari, G. Sansone, S. Stagira, C. Vozzi, and M. Nisoli, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **49**, 062001 (2016).
3. J. Biegert, F. Calegari, N. Dudovich, F. Quéré, and M. Vrakking, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **54**, 070201 (2021).
4. M. T. Hassan, T. T. Luu, A. Moulet, O. Raskazovskaya, P. Zhokhov, M. Garg, N. Karpowicz, A. M. Zheltikov, V. Pervak, F. Krausz, and E. Goulielmakis, *Nature* **530**, 66 (2016).
5. H.-C. Wu and J. Meyer-ter-Vehn, *Nature Photon.* **6**, 304 (2012).
6. J. Xu, B. Shen, X. Zhang, Y. Shi, L. Ji, L. Zhang, T. Xu, W. Wang, X. Zhao, and Z. Xu, *Sci. Rep.* **8**, 2669 (2018).
7. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, Н. Н. Розанов, *Квантовая электроника* **50**, 801 (2020) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, and N. N. Rosanov, *Quantum Electron.* **50**, 801 (2020)].
8. С. В. Сазонов, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 160 (2021).
9. Н. Н. Розанов, *Оптика и спектроскопия* **107**, 761 (2009) [N. N. Rosanov, *Optics and Spectroscopy* **107**, 721 (2009)].
10. Н. Н. Розанов, Р. М. Архипов, М. В. Архипов, *УФН* **188**, 1347 (2018) [N. N. Rosanov, R. M. Arkhipov, and M. V. Arkhipov, *Phys.-Uspekhi* **61**, 1227 (2018)].
11. Н. Н. Розанов, *Оптика и спектроскопия* **124**, 75 (2018) [N. N. Rosanov, *Optics and Spectroscopy* **124**, 72 (2018)].
12. R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, I. Babushkin, A. Demircan, U. Morgner, and N. N. Rosanov, *Opt. Lett.* **44**, 1202 (2019).
13. R. Arkhipov, A. Pakhomov, M. Arkhipov, A. Demircan, U. Morgner, and N. Rosanov, *Opt. Express* **28**, 17020 (2020).
14. R. Arkhipov, A. Pakhomov, M. Arkhipov, I. Babushkin, A. Demircan, U. Morgner, and N. Rosanov, *Sci. Rep.* **11**, 1961 (2021).
15. Р. М. Архипов, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 636 (2021) [R. M. Arkhipov, *JETP Lett.* **113**, 611 (2021)].
16. Н. Н. Розанов, Н. В. Высотина, *ЖЭТФ* **157**, 63 (2020) [N. N. Rosanov and N. V. Vysotina, *JETP* **130**, 52 (2020)].
17. I. A. Aleksandrov, D. A. Tumakov, A. Kudlis, V. M. Shabaev, and N. N. Rosanov, *Phys. Rev. A* **102**, 0231020 (2020).
18. Н. Н. Розанов, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 157 (2021) [N. N. Rosanov, *JETP Lett.* **113**, 145 (2021)].
19. А. М. Желтиков, *УФН* **187**, 1169 (2017) [A. M. Zheltikov, *Phys.-Uspekhi* **60**, 1087 (2017)].
20. Р. М. Архипов, М. В. Архипов, А. В. Пахомов, Н. Н. Розанов, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 156 (2021) [R. M. Arkhipov, M. V. Arkhipov, A. V. Pakhomov, and N. N. Rosanov, *JETP Lett.* **114**, 1 (2021)].
21. S. L. McCall and E. L. Hahn, *Phys. Rev.* **183**(2), 457 (1969).

Прецизионное измерение оптических характеристик приповерхностного слоя твердых тел

Л. А. Федюхин⁺¹⁾, А. В. Горчаков*, Н. Г. Коробейщиков*, И. В. Николаев*

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

*Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 9 августа 2021 г.

После переработки 11 августа 2021 г.

Принята к публикации 11 августа 2021 г.

Предложен метод измерения и алгоритм расчета показателя преломления оптических материалов, основанный на модели трехслойной структуры. Проведена экспериментальная апробация метода с использованием оптических мер. Численно показана единственность восстановления показателей преломления подложки, приповерхностного слоя, а также толщины слоя по измерению коэффициента отражения зондирующего излучения в области угла Брюстера и угла нормального падения. Впервые измерены показатель преломления приповерхностного слоя с абсолютной погрешностью измерения $\pm 10^{-4}$ и толщина приповерхностного слоя с доверительной погрешностью ± 1 нм.

DOI: 10.31857/S1234567821170031

Введение. Существующие методы измерения показателей преломления оптических материалов весьма разнообразны [1–7]. В большинстве своем основаны на измерении характеристик падающего, отраженного и/или преломленного зондирующего излучения при вариации угла падения на границу раздела двух сред. В качестве наблюдаемых параметров в традиционной схеме выбирают углы падения/преломления и интенсивности излучения [1, 4]. В эллипсометрии такими наблюдаемыми параметрами выступают эллипсометрические углы [2, 5]. Наиболее точным признан интерференционный метод измерения [6], заключающийся в вычислении показателя преломления из условий интерференции для интерферометра Фабри–Перо с исследуемой мерой и без нее. Абсолютная погрешность измерения показателя преломления в этом методе достигает значений $1.0 \cdot 10^{-7}$ [6].

Прецизионные измерения показателей преломления оптических материалов являются важным элементом технологии проектирования оптических приборов высокого разрешения, большой числовой апертуры, с минимальными сферическими и хроматическими aberrациями [7]. Знание дисперсии показателя преломления (уравнение Селлмейера) нелинейных кристаллов имеет важное значение для проектирования частотно-конверсионных устройств. Для этих применений показатель преломления кристалла должен быть известен с точностью 0.0001 [8]. Высо-

кая требовательность к точности показателя преломления подложки важна при расчете элементов интегральной оптики [9–12].

Недостатком существующих методов измерения показателей преломления является неявное предположение о том, что граница раздела контактирующих сред является “идеальной”, в том смысле, что оптические свойства приповерхностной области идентичны оптическим характеристикам в толще образца. В действительности на границе раздела сред обязательно присутствует переходной слой, являющийся результатом технологической обработки поверхности или химических загрязнений. Более того, сама граница является источником неоднородности оптических свойств. Очевидно, что при прецизионных измерениях абсолютных величин показателя преломления оптических материалов необходимо учитывать наличие переходного слоя. Теоретическая модель, учитывающая влияние приповерхностной области на характеристики отраженной/преломленной волн, хорошо известна [2, 5, 13, 14]. Трудность заключается в том, что материальные параметры приповерхностного слоя (толщина и показатель преломления), необходимые при расчете по этой модели (рис. 1), неизвестны. Предложенная в данной работе методика позволяет устранить этот пробел и определить значения показателя преломления и толщину приповерхностного слоя.

Метод измерения. Алгоритм расчета. Известно [15], что для линейно-поляризованной плоской монохроматической электромагнитной волны (p -

¹⁾e-mail: leogal2007@mail.ru

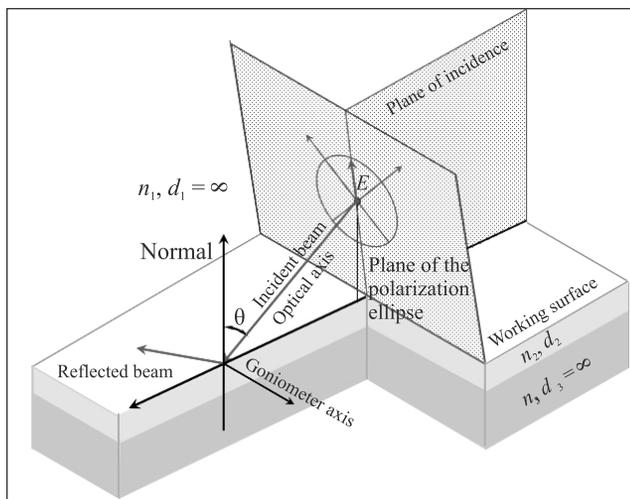


Рис. 1. (Цветной онлайн) Геометрия трехслойной модели. Юстировка образца на рабочем столе гониометра

волны), падающей на “идеальную” границу раздела двух сред с показателями преломления n_1 и n_3 , коэффициент отражения p -волны (R) обращается в нуль при угле Брюстера θ_{br} :

$$\theta_{br} = \arctg \frac{n_3}{n_1}.$$

Для описания структур с несовершенными границами раздела устоявшейся моделью является так называемая трехслойная модель [14] (рис. 1). Предлагаемый нами метод экспериментального определения показателей преломления подложки n_3 , слоя n_2 и толщины слоя d_2 основан на замечательном свойстве R для трехслойной модели [16]. А именно: при угле падения

$$\theta_p = \arctg \frac{n_2}{n_1} \quad (1)$$

R не зависит от толщины слоя и определяется исключительно показателями преломления контактирующих сред:

$$R_p = \left| \frac{n_3^2 - \sqrt{n_3^2 n_2^2 + n_3^2 n_1^2 - n_1^2 n_2^2}}{n_3^2 + \sqrt{n_3^2 n_2^2 + n_3^2 n_1^2 - n_1^2 n_2^2}} \right|^2. \quad (2)$$

Это справедливо для структур в области прозрачности, когда поглощением зондирующего излучения можно пренебречь. Ограничение является существенным, особенно для прецизионных методик измерения показателя преломления. В данной работе авторы остаются в рамках этого ограничения. Отметим, что формула (2) получена в приближении плоских волн. Численный расчет, учитывающий влияния расходимости зондирующего излучения с гауссовым

распределением интенсивности по пучку, показывает, что нарушение (2) при углах расходимости менее 0.6 мрад не превышает $1 \cdot 10^{-6}$ град для угла θ_p , и $6 \cdot 10^{-8}$ для R_p , что ниже погрешности измерений этих величин.

Прямое использование формулы (1) для расчета показателя преломления слоя затруднительно, поскольку угол θ_p , в отличие от угла Брюстера θ_{br} , не является углом экстремума углового распределения R , что не позволяет провести его идентификацию в эксперименте. В то же время свойство (2) открывает возможность определить, при известном показателе преломления слоя и его толщину, но и показатель преломления подложки. Процедура состоит в следующем:

1. Измеряем R в диапазоне углов падения, предположительно содержащих углы θ_p и θ_{br} в правой и левой относительно нормали ветвях. Для большинства материалов этот диапазон находится в области минимума R ($\theta = \theta_{min}$) и не превышает 5° . Минимумы хорошо локализованы по углу, поэтому измерение в правой и левой ветвях позволяет повысить точность определения нормали и определить абсолютные значения угла падения зондирующего излучения. Типичное экспериментальное угловое распределение R для одного из образцов приведено на рис. 2 и помечено маркерами синего цвета.

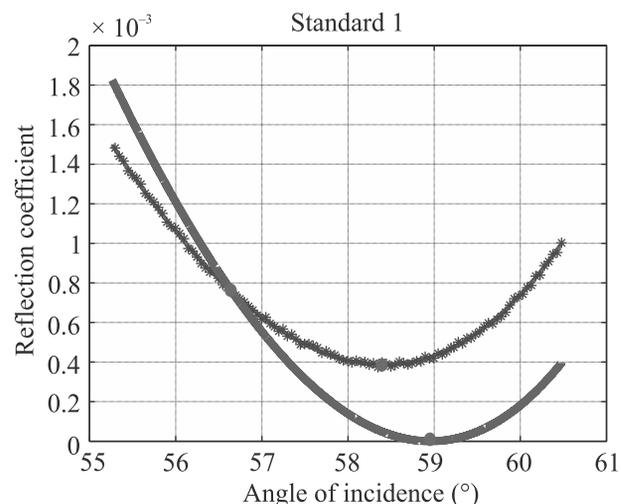


Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость R от угла падения для меры #1. Синими маркерами помечены данные эксперимента. Красным помечен тренд экспериментальной зависимости. Зеленым – расчетная зависимость в модели “идеальной” границы раздела сред. Красным помечены особые точки с координатами $[\theta_p, R_p]$ – пересечение, $[\theta_{min}^{exp}, R_{min}^{exp}]$ – экспериментальное и $[\theta_{min}^{th}, R_{min}^{th}]$ – расчетное, в модели “идеальной” границы раздела сред, положение минимум R

2. Задаем начальное значение показателя преломления подложки – n_{30} , в качестве которого разумно выбрать значение тангенса одного из углов измеряемого диапазона либо значение, близкое к известному, как в данном случае, показателю преломления меры.

3. Рассчитываем угол θ_p и значение R_p по пересечению тренда экспериментальной и теоретической зависимостей R в выбранном диапазоне углов. Теоретическую зависимость рассчитываем по классическим формулам Френеля при отражении p -волны от границы, разделяющей среды с показателями преломления n_1 и n_{30} .

4. Рассчитываем тренды экспериментальных зависимостей R вблизи нормали ($\theta = 0$) и вблизи минимума ($\theta = \theta_{\min}^{\text{exp}}$). Хорошую аппроксимацию тренда по экспериментальным значениям у нормали дает квадратичное приближение (коэффициент аппроксимации – более 0.99). Для тренда у минимума R – четвертой степени (коэффициент аппроксимации – более 0.99).

5. Строим целевые функции диапазонов – суммы квадратов отклонений расчетных R_{\min}^{th} , $R_{\text{nor}}^{\text{th}}$ и экспериментальных R_{\min}^{exp} , $R_{\text{nor}}^{\text{exp}}$ значений по диапазону углов падения вблизи минимума коэффициента отражения:

$$G_{\min}(n_3, d_2) = \sum_{i=1}^n [R_{\min}^{\text{th}}(\theta_{\text{exp}}^i) - R_{\min}^{\text{exp}}(\theta_{\text{exp}}^i)]^2$$

и вблизи нормали:

$$G_{\text{nor}}(n_3, d_2) = \sum_{j=1}^n [R_{\text{nor}}^{\text{th}}(\theta_{\text{exp}}^j) - R_{\text{nor}}^{\text{exp}}(\theta_{\text{exp}}^j)]^2.$$

6. Целевая функция минимизации – произведение целевых функций диапазонов:

$$F(n_3, d_2) = G_{\min}(n_3, d_2) \times G_{\text{nor}}(n_3, d_2). \quad (3)$$

Достаточно сложный вид целевой функции вызван необходимостью устранить неоднозначность, обусловленную периодической зависимостью R от толщины слоя. Поскольку период осцилляций зависит от угла падения, то пересечение целевых функций диапазона выделяет лишь совпадающие значения d_2 . Отметим, что соотношение (2) сокращает размерность фазового пространства минимизации $F(n_3, d_2)$ до двух параметров: d_2 – толщины слоя и n_3 – показателя преломления подложки. Это обстоятельство существенно сокращает время минимизации и анализ поведения целевой функции.

7. Рассчитываем параметры структуры, активируя процесс минимизации целевой функции $F(n_3, d_2)$.

Приоритетным вопросом при выборе целевой функции является вопрос единственности получаемых значений параметров минимизации. Ответ на него дает численный эксперимент по расчету функции $F(n_3, d_2)$ в сравнительно широком диапазоне параметров n_3, d_2 . В качестве “экспериментальных” данных выступили значения R для трехслойной структуры с параметрами: $n_1 = 1, n_2 = 1.4852, n_3 = 1.67177, d_2 = 12.2$ нм. Диапазон “наблюдаемых” углов падения вблизи нормали – $\{\theta_{\text{exp}}^j\} = \{-30.0^\circ \div 30.0^\circ\}$, и вблизи минимума – $\{\theta_{\text{exp}}^i\} = \{57^\circ \div 60^\circ\}$. Результаты представлены на рис. 3а для “эксперимента” при отсутствии шумовой добавки. Отчетливо прослеживается пересечение целевых функций диапазонов – рис. 3б. Влияние различных амплитуд случайных шумовых добавок по углу – $\Delta\theta$ и R – ΔR представлены на рис. 4.

Нетрудно видеть, что минимизация целевой функции уверенно выходит на вводные параметры “эксперимента” как при отсутствии, так и наличии шумовых добавок. Кроме того, глубокий минимум целевой функции (рис. 3а), значение которого ограничивает лишь точность расчета, свидетельствует о единственности получаемых минимизацией значений.

Проведенный численный эксперимент показывает: измерение R при углах падения вблизи нормали и вблизи минимума являются достаточным условием, чтобы минимизация целевой функции (3) при условии (2) единственным образом определила материальные параметры трехслойной структуры – показатель преломления подложки n_3 , показатель преломления слоя n_2 и его толщину d_2 . Подчеркнем, что в предложенном методе отсутствует раздел, связанный с измерением геометрических параметров образца. Это существенно облегчает технологию изготовления рабочих структур и, в конечном счете, повышает точность измерений.

Параметры стэнда. Измерения. Апробация метода проведена на типовом для такого рода измерений оптическом стэнде [1]. Отметим важные методические обстоятельства, которые были выполнены при проведении измерений, а также приведем параметры стэнда:

- Держатель образца установлен на прецизионном гониометре, который обеспечивал угловое разрешение $\sim 3 \cdot 10^{-5}$ рад.

- В качестве источника излучения использован лазер Coherent DPSS-532 с длиной волны $\lambda = 532$ нм. Измерения распределения интенсивности излучения по пучку показали, что апертура зондирующего излучения на рабочей поверхности образца

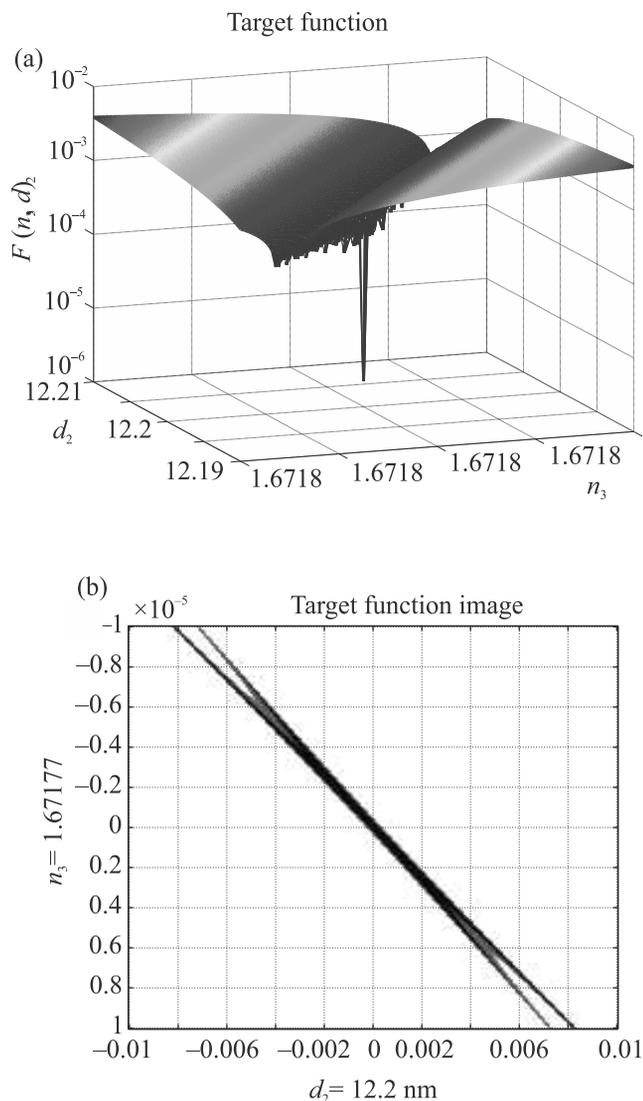


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Минимизация целевой функции $F(n_3, d_2)$, определяющей в минимуме $n_2 = 1.4852$, $n_3 = 1.67177$, $d_2 = 12.2$ нм; (б) – пересечение целевых функций диапазонов

по уровню $1/e$ составляет ~ 2 мм. Расходимость пучка ~ 0.6 мрад. Относительное стандартное отклонение интенсивности излучения от среднего по времени значения составило не более $\sim 0.5\%$.

- Измеренное значение эллиптичности излучения после пропускания через призму Глана составило $\sim 6 \cdot 10^{-6}$.

- Совмещение плоскости падения с направлением поляризации падающего излучения осуществляли вращением призмы Глана, устанавливая минимум отраженного сигнала при падении под углом, близком к углу полной поляризации к рабочей поверхности образца.

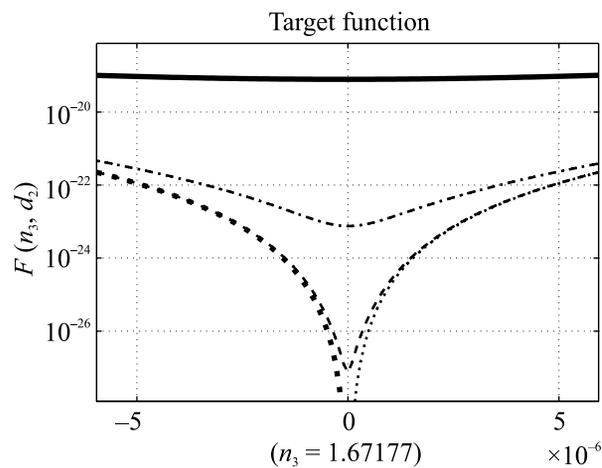


Рис. 4. Минимизация целевой функции при наличии случайных шумовых добавок с амплитудами $[\Delta\theta^\circ, \Delta R]$. Точки – $[0, 0]$, штрих – $[10^{-4}, 10^{-8}]$, штрих-пунктир – $[10^{-3}, 10^{-7}]$, сплошная – $[10^{-2}, 10^{-6}]$

- Интенсивности падающего и отраженного луча от рабочей поверхности образца измеряли одновременно двумя фотоприемниками. Относительное стандартное отклонение отношения этих сигналов от среднего по времени составило не более $\sim 0.01\%$.

- Динамический диапазон измерения коэффициента отражения при тестировании стенда составил ~ 80 dB.

- Температуру помещения с измерительным стендом измеряли датчиком, расположенном вблизи образца. Вариация температуры за время проведения эксперимента не превышала одного градуса и составляла $\sim 20^\circ\text{C}$.

Измерения проведены на серии из трех образцов эталонного набора мер показателей преломления (ОНМПП 3). Поверхность мер обработана с допусками, принятыми для эталонов [4]. Показатели преломления мер – $n_{\text{мер}}$ приведены в табл. 1 и соответствуют результатам Акта последней поверки, проведенной методом сравнения с эталоном. Абсолютная погрешность $\pm 2 \cdot 10^{-5}$ при доверительной вероятности $P = 0.99$ для длины волны падающего излучения 589.3 нм.

Результаты экспериментов приведены в табл. 1. Указанные значения показателей преломления мер скорректированы с учетом дисперсии к длине волны используемого в эксперименте излучателя – 532 нм. В верхней части табл. 1 указаны значения показателей преломления мер (строка 1), угол Брюстера и R при нормальном падении, рассчитанные в модели “идеальной” границы раздела сред (строки 2–3). В средней части табл. 1 приведены экспериментальные

значения угла и R в минимуме углового распределения (строки 4–5). В строке 6 приведены экспериментальные значения R при нормальном угле падения. В нижней части таблицы (строки 7–12) приведены значения материальных параметров структуры (строки 7–9), полученные в результате минимизации целевой функции по измеренным значениям R . В строках 10–12 приведены значения угла и R в минимуме и при нормальном угле падения, рассчитанные в рамках трехслойной модели.

Анализ данных табл. 1 показывает:

1. Измеренное значение показателя преломления подложки n_3 коррелирует со значениями показателей мер $n_{\text{мер}}$ и находится в пределах ошибок эксперимента и расчетов.

2. Для всех трех мер угловое положение минимума коэффициента отражения $\theta_{\text{br}}^{\text{ith}}$, рассчитанное в модели “идеальной” границы раздела сред, не совпадает с экспериментально измеренным значением $\theta_{\text{min}}^{\text{exp}}$ и, напротив, близко к его значению, рассчитанному для трехслойной модели $\theta_{\text{min}}^{\text{th}}$.

3. Значение R в минимуме $R_{\text{min}}^{\text{exp}}$ близко к значениям, рассчитанным для трехслойной модели $R_{\text{min}}^{\text{th}}$ и весьма велико для такого уровня обработки образцов при расчете в модели с “идеальной” границей раздела сред.

4. Значение R в нормали $R_{\text{nor}}^{\text{ith}}$, рассчитанное в модели с “идеальной” границей раздела сред, далеко от его экспериментального значения $R_{\text{nor}}^{\text{exp}}$, и близко к значению, рассчитанному в рамках трехслойной модели $R_{\text{nor}}^{\text{th}}$.

5. На поверхности всех трех мер экспериментально установлено наличие приповерхностного слоя, толщиной в несколько десятков нанометров с показателем преломления существенно ниже показателя преломления в толще образца.

Для меры 3 на рис. 5 приведены угловые зависимости R , рассчитанные по значениям, полученным в результате минимизации целевой функции в области минимума коэффициента отражения (а) и вблизи нормали (б).

Проведенные измерения экспериментально подтверждают предпочтительное использование трехслойной модели, по сравнению с моделью “идеальной” границы раздела сред, для корректного описания явления отражения и ее применения для расчета оптических характеристик твердых тел, включая характеристики приповерхностного слоя. Результаты измерений позволяют утверждать, что на финише качественной обработки оптического материала, на его поверхности сформирован тонкий слой в несколько десятков нанометров с показателем пре-

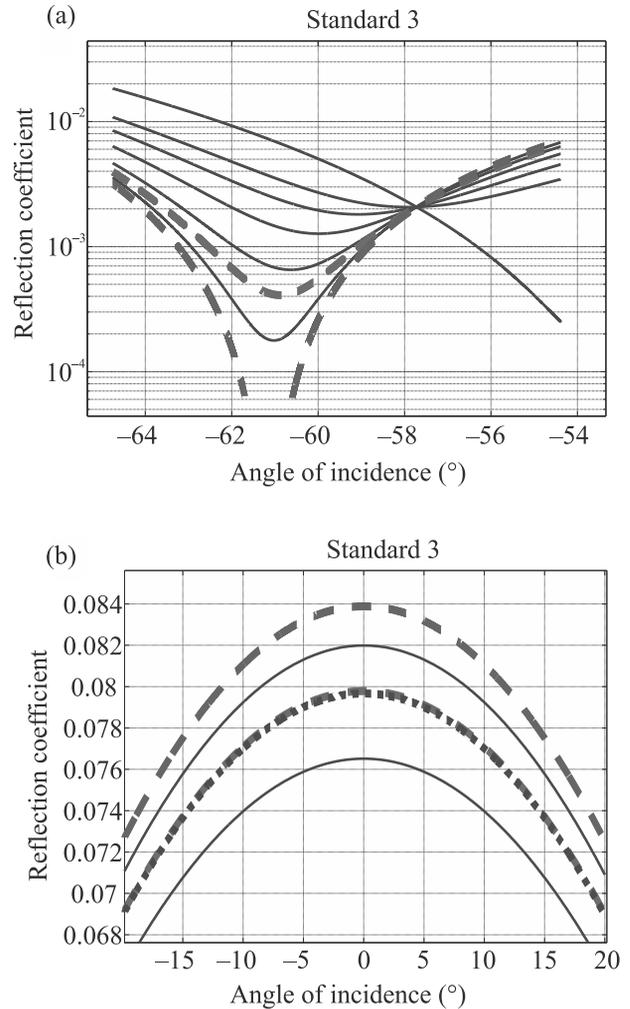


Рис. 5 (Цветной онлайн) Угловые зависимости R в области минимума (а) и вблизи нормали (б). Красным пунктиром помечены тренды экспериментальных зависимостей. Сплошными синими – расчетные зависимости для нескольких значений толщины слоя d_2 нм. Для (а) снизу вверх – 10; 20; 30; 40 50; 90. Для (б) сверху вниз – 10; 15; 20. Зеленым пунктиром отмечены расчетные зависимости в модели “идеальной” границы раздела сред для меры # 3

ломления существенно ниже объемного показателя преломления.

Заключение. Предложен метод измерения оптических параметров твердых тел, основанный на модели трехслойной структуры. Метод является дополнительным к существующим методам измерения оптических параметров материалов. Преимуществом метода является возможность определения показателя преломления и толщины приповерхностного слоя. Экспериментально показано предпочтительное использование трехслойной модели, по сравнению с мо-

Таблица 1. Оптические параметры исследуемых образцов

#	Параметр	Мера 1	Мера 2	Мера 3
Модель “идеальной” границы раздела сред				
1	n_{mer}	1.66139 ± 0.00002	1.67926 ± 0.00002	1.81544 ± 0.00002
2	$\theta_{\text{br}}^{\text{ith}} (^\circ)$	58.9560 ± 0.0003	59.2262 ± 0.0002	61.1527 ± 0.0001
3	$R_{\text{nor}}^{\text{ith}}, \cdot 10^{-2}$	6.1759 ± 0.0003	6.4275 ± 0.0002	8.3887 ± 0.0001
Эксперимент				
4	$\theta_{\text{min}}^{\text{exp}} (^\circ)$	58.394 ± 0.001	59.150 ± 0.001	60.870 ± 0.001
5	$R_{\text{nor}}^{\text{exp}}, \cdot 10^{-2}$	5.09 ± 0.01	6.21 ± 0.01	7.98 ± 0.01
6	$R_{\text{min}}^{\text{exp}}, \cdot 10^{-4}$	4 ± 1	2 ± 1	4 ± 1
Трехслойная модель				
7	n_3	1.6614 ± 0.0001	1.6796 ± 0.0001	1.8155 ± 0.0001
8	n_2	1.5217 ± 0.0001	1.5338 ± 0.0001	1.5847 ± 0.0001
9	d_2 (нм)	28 ± 1	12 ± 1	15 ± 1
10	$\theta_{\text{min}}^{\text{th}} (^\circ)$	58.32 ± 0.05	59.11 ± 0.02	60.86 ± 0.04
11	$R_{\text{nor}}^{\text{th}}, \cdot 10^{-2}$	5.39 ± 0.06	6.27 ± 0.03	7.97 ± 0.06
12	$R_{\text{min}}^{\text{th}}, \cdot 10^{-4}$	3.8 ± 0.2	0.9 ± 0.2	3.8 ± 0.5

делью “идеальной” границы раздела сред, для корректного описания явления отражения света и ее применения для расчета оптических характеристик твердых тел, включая характеристики приповерхностного слоя. Предложен алгоритм расчета материальных параметров трехслойной структуры. Численно показана устойчивость алгоритма к шумовым составляющим по углу падения и коэффициенту отражения.

Авторы считают перспективным применение данного метода в метрологии, в том числе в области создания эталона показателя преломления. Сравнительная простота измерительной схемы может служить основой для разработки рефрактометров нового типа, в основе которых заложена значительно более корректная модель описания отражения света от границы раздела оптических материалов. Поскольку для измерений необходима лишь одна хорошо обработанная поверхность, отпадает ряд технологически сложно выполнимых требований к экспериментальному образцу: определенные и для ряда методов весьма большие линейные размеры, определенные углы между гранями, высокая однородность материала. Последнее обстоятельство особенно трудно выполнимо в большинстве методов измерения показателей преломления. К преимуществам следует отнести возможность измерения показателей преломления в неограниченном диапазоне значений. Метод хорошо поддается автоматизации, что важно при серийном контроле.

Знание параметров приповерхностного слоя, безусловно, важно при конструировании оптических приборов высокого разрешения, устройств нелиней-

ной и интегральной оптики. Метод может быть полезен для диагностики свойств поверхности оптических материалов на стадии финишной обработки.

Отметим, что угол падения, при котором интенсивность отраженного излучения не зависит от линейных размеров исследуемой структуры – θ_p , является важным материальным параметром. Измерение характеристик зондирующего излучения при этом угле падения позволяет скорректировать, в частности, температурные зависимости электрофизических параметров материала, отделив влияние, связанное с тепловым расширением.

Авторы благодарны начальнику отдела физико-химических измерений ФБУ НЦСМ Грачеву А.В. за предоставление образцового набора мер показателей преломления.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Новосибирской области, грант # 20-42-540004 (проведение измерений) и Российского научного фонда, грант # 21-19-00046 (подготовка образцов).

1. С. П. Зинченко, А. П. Ковтун, Г. Н. Толмачев, Журнал технической физики **79**, 128 (2009).
2. В. К. Громов, *Введение в эллипсометрию*, Издательство Ленинградского университета, Л. (1986).
3. S. Emanuelli and A. Arie, Appl. Opt. **42**, 6661 (2003).
4. *ГОСТ 28869-90 Межгосударственный стандарт*, ИПК Издательство стандартов, М. (2005).
5. С. Н. Свиташева, *Метод эллипсометрии для исследования наноразмерных пленок диэлектриков, полупроводников и металлов*, Издательство СО РАН, Новосибирск (2019).

6. Н. А. Николаев, А. С. Найденов, Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики **4**, 258 (2004).
7. D. B. Leviton and B. J. Frey, Proc. SPIE **6273**, 62732K (2006).
8. A. Bruner, D. Eger, M. B. Oron, P. Blau, M. Katz, and S. Ruschin, Opt. Lett. **28**, 194 (2003).
9. К. А. Кос, Optics and Spectroscopy **127**, 1117 (2019).
10. B. J. H. Stadler and J. P. Lorenzo, MRS Online Proceedings Library **422**, 357 (1996).
11. El-Sayed El-Zaiat, Opt. Rev. **21**, 54 (2014).
12. S. V. Mutilin and T. Khasanov, Optics and Spectroscopy **105**, 461 (2008).
13. М. М. Горшков, Эллипсометрия, Советское радио, М. (1974).
14. L. A. Fedyukhin and A. V. Gorchakov, JETP **131**, 689 (2020).
15. Д. В. Сивухин, *Общий курс физики. Оптика*, Наука, М. (1980), с. 409.
16. L. A. Fedyukhin, A. V. Gorchakov, and E. A. Kolosovsky, Optics and Spectroscopy **128**, 257 (2020).

Новые аспекты увеличения емкости графена путем внедрения дефектов в водных электролитах и ионных жидкостях

В. А. Кисленко^{+*1)}, С. В. Павлов^{+*}, М. В. Федоров⁺, С. А. Кисленко^{*1)}

⁺Центр по научным и инженерным вычислительным технологиям для задач с большими массивами данных, Сколковский институт науки и технологий, 121205 Москва, Россия

^{*}Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

Поступила в редакцию 1 июля 2021 г.

После переработки 24 июля 2021 г.

Принята к публикации 25 июля 2021 г.

В рамках теории функционала электронной плотности было исследовано влияние дефектов в графене на интегральную емкость двойного слоя в водных электролитах и ионной жидкости. Обнаружено, что в водных электролитах внутренние дефекты, такие как моно- и двойные вакансии, более эффективны с точки зрения увеличения емкости двойного слоя, чем используемые на практике внешние дефекты, такие как азотная примесь и кислородные функциональные группы. Показано, что при использовании в суперконденсаторах ионных жидкостей с большим электрохимическим окном стабильности стратегия увеличения емкости за счет создания дефектов графеновой поверхности неэффективна.

DOI: 10.31857/S1234567821170043

I. Введение. Двухслойные электрохимические конденсаторы (ДЭК) или суперконденсаторы являются устройствами для хранения энергии и обладают рядом преимуществ, таких как высокая мощность, отсутствие эффекта памяти и большое количество циклов зарядки-разрядки [1]. Однако относительно низкая по сравнению с батареями плотность энергии – существенный недостаток, который ограничивает их использование. Поскольку плотность запасенной энергии зависит от удельной емкости электрода и рабочего напряжения, то существуют две основные стратегии по преодолению данного недостатка: 1) разработка новых электродных материалов, демонстрирующих высокую удельную емкость и 2) применение новых электролитов с более широким окном электрохимической стабильности.

Значительное количество работ в данной области посвящено первому подходу и связано с поиском рационального дизайна электрода с улучшенными свойствами. В данном аспекте примечательны работы группы Гоготси, в которых было показано аномальное увеличение емкости двойного слоя при приближении размера пор углеродного электрода к размеру ионов [2, 3]. Однако попытки использовать высокопористые углеродные электроды с тонкими стенками, состоящими из одного или нескольких слоев графена, приводили к достаточно низким значени-

ям емкости ~ 5 мкФ/см² [4, 5], что в несколько раз меньше, чем емкость на поверхности стеклоуглерода или металла. В работах [4, 6] утверждается, что данный эффект имеет квантовую природу и ассоциирован с низкой плотностью состояний в графене. Жанг и соавторы показали, что модификация электронных свойств графена путем допирования атомами азота увеличивает квантовую емкость (C_Q) и объясняет улучшенные характеристики ДЭК, основанных на N-допированных углеродных электродах [3]. Это привело к многочисленным экспериментальным исследованиям и расчетам методом DFT (*Density Functional Theory*) квантовой емкости химически модифицированных графенов. Подавляющее большинство исследований сосредоточено на допировании углерода атомами N/S/B/P [7–10], а также на внедрении нескольких примесных атомов одновременно [10–12]. В некоторых статьях описан метод управления электронными свойствами графена с помощью ковалентной или нековалентной химической функционализации [13]. Однако, как было показано ранее, увеличение плотности состояний в графене также возможно путем внедрения внутренних дефектов, таких как вакансии, дефект Стоуна–Уэльса или нанотверстие в двухслойном графене [14–17]. Их влияние на квантовую емкость графена подробно не исследовалось [18, 19]. В этой статье мы рассматриваем набор внутренних дефектов, включая моновакансию (MV), несколько типов двойных вакансий (DV)

¹⁾e-mail: vitaliy.kislenko@skoltech.ru; kislenko@ihed.ras.ru

и дефект Стоуна–Уэльса (SW), в сравнении с атомами азота и кислородсодержащими функциональными группами. Более того, в нашем исследовании мы фокусируемся не только на квантовой емкости, но и на полной емкости интерфейса, которая зависит от соотношения квантовой емкости и емкости двойного слоя (C_{DL}) [14, 20, 21].

Вторым вариантом увеличения количества запасенной энергии является увеличение напряжения ячейки, которое ограничивается электрохимическим окном стабильности (ЭОС). Широко используемые водные электролиты (например, растворы серной кислоты и гидроксида калия) обычно демонстрируют электрохимическое окно около 1.0–1.3 В, в то время как ионные жидкости (ИЖ) обычно демонстрируют окна потенциалов от 3.5 до 4.0 В [22]. Использование ионных жидкостей обеспечивает увеличение плотности энергии суперконденсаторов [23]. Связь между емкостью двойного слоя и его структурой в ИЖ была подробно изучена [24–26]. Существенное влияние квантовой емкости графена на общую емкость интерфейса графен/ИЖ было также показано ранее [27–30]. Однако, насколько нам известно, влияние дефектов на емкость границы раздела графен/ионная жидкость еще должным образом не изучено. Таким образом, в данной работе мы рассчитываем полную интегральную емкость C_{Σ}^{int} как для водных электролитов, так и для ИЖ и демонстрируем влияние ширины электрохимического окна стабильности на C_{Σ}^{int} .

II. Детали моделирования. Первопринципные расчеты были проведены с использованием DFT и программного пакета Quantum Espresso [31, 32]. Для описания электрон-ионного взаимодействия был использован метод проектно-присоединенных волн (PAW) [33]. Для расчета обменно-корреляционной энергии использовался метод обобщенного градиента (GGA) с переработанной версией обменно-корреляционного функционала Пердюю–Берка–Эрнзерхофа (PBEsol) [34]. Сетка размером $9 \times 9 \times 1$ и $31 \times 31 \times 1$ к-точек в зоне Бриллюэна, сгенерированная методом Монхорста–Пака, использовалась во время оптимизации геометрии и расчета плотности электронных состояний (ПЭС) соответственно. Энергии обрезания кинетической энергии волновой функции и электронной плотности были 40 и 350 Ry соответственно. Критерий сходимости энергии был равен 10^{-5} Ry/ячейку. Для моделирования графена использовалась суперячейка размером 10×10 с областью вакуума протяженностью 15 Å. Это дает эффективную концентрацию дефектов $1.9 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$ для всех исследуемых систем.

Суммарная дифференциальная емкость (C_{Σ}) интерфейса графен/электролит может быть разделена на две части: квантовую емкость C_Q , которая зависит от электронных свойств графена, и емкость двойного слоя C_{DL} , которая зависит от структуры двойного слоя [21]:

$$\frac{1}{C_{\Sigma}} = \frac{1}{C_Q} + \frac{1}{C_{DL}}. \quad (1)$$

Согласно данной модели, мы можем разделить суммарное падение напряжения на интерфейсе V_{Σ} на два слагаемых: падение напряжения на двойном слое V_{DL} и локальное падение напряжения на графене V_Q – тогда $V_{\Sigma} = V_Q + V_{DL}$.

Локальное падение напряжения V_Q отражает сдвиг уровня Ферми в графене относительно его зонной структуры $-|e|V_Q$ и ассоциировано с зарядом на графене согласно выражению [19, 21]:

$$\sigma = \frac{|e|}{A} \int \text{DOS}(E) (f(E) - f(E + |e|V_Q)) dE, \quad (2)$$

где $\text{DOS}(E)$ – плотность электронных состояний, $f(E)$ – распределение Ферми–Дирака, e – элементарный заряд, A – площадь поверхности графена. Квантовая дифференциальная емкость:

$$C_Q = \frac{d\sigma}{dV_Q}. \quad (3)$$

Дифференциальная емкость двойного слоя определяется аналогично:

$$C_{DL} = \frac{d\sigma}{dV_{DL}}. \quad (4)$$

В общем случае, C_{DL} зависит от потенциала графена. Однако, в данной работе для простоты была использована модель идеального конденсатора. Для водных растворов $C_{DL} = 24 \text{ мкФ/см}^2$, что является средним значением дифференциальной емкости в 1М водных растворах калия на поверхности электрода из стеклоглерода [35, 36]. Для ионных жидкостей $C_{DL} = 14 \text{ мкФ/см}^2$, что является средним значением дифференциальной емкости в имидазольных ИЖ на стеклоглеродном электроде [37–39].

Интегральная емкость интерфейса является более важной величиной для практического использования, так как она пропорциональна плотности энергии ДЭК. Мы рассчитывали ее как интеграл суммарной дифференциальной емкости C_{Σ} на интервале потенциалов, соответствующих электрохимическому окну стабильности электролита:

$$C_{\Sigma}^{\text{int}} = \frac{1}{V_{\text{EPW}}} \int_{-V_{\text{EPW}/2}}^{V_{\text{EPW}/2}} C_{\Sigma}(V_{\Sigma}) dV_{\Sigma}. \quad (5)$$

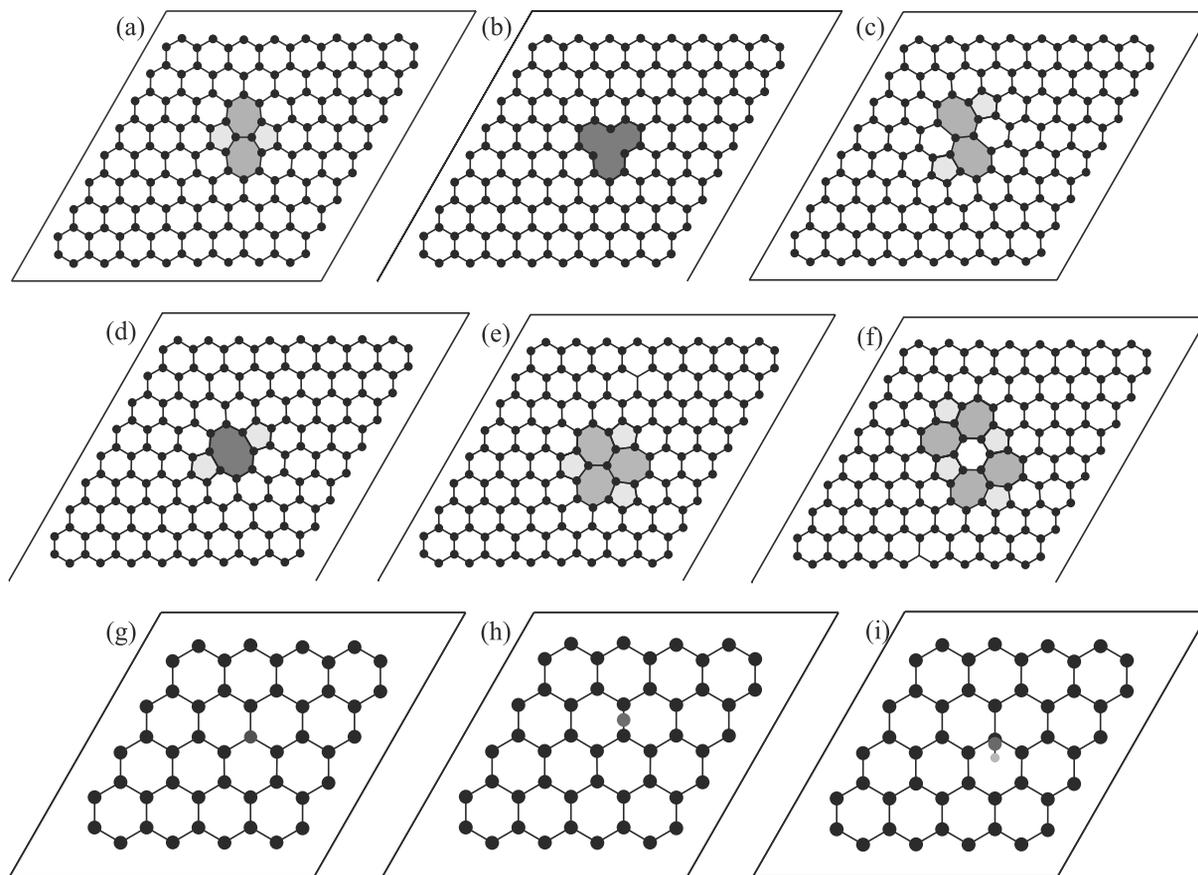


Рис. 1. (Цветной онлайн) Оптимизированная структура дефектов в графене: (a) – дефект Стоуна–Уэльса; (b) – моновакансия; (c) – DV 55-77; (d) – DV 585; (e) – DV 555-777; (f) – DV 5555-6-7777; (g) – замещение атома C на N; (h) – эпоксидная (–O–) группа; (i) – гидроксильная (OH–) группа

Важно отметить, что мы пренебрегаем возможным взаимным влиянием между двумя емкостями, и объединяем их вместе, используя модель последовательно соединенных конденсаторов с учетом схемы уравнивания зарядов.

III. Результаты и обсуждение. Мы рассмотрели как внутренние дефекты (моновакансию, несколько типов двойных вакансий (585, 55-77, 555-777, 5555-6-7777), дефект Стоуна–Уэльса), так и дефекты, образованные примесными атомами (дефект замещения атома углерода атомом азота, эпокси- и гидроксильная функциональная группы), оптимизированные структуры которых изображены на рис. 1. Каждая из рассмотренных структурных модификаций графена влияет на его электронную структуру [14] и, следовательно, на квантовую емкость.

На рисунке 2а и б изображен график C_Q дефектов, имеющих наиболее выраженные особенности. Например, бездефектный графен демонстрирует практически симметричную V-форму зависимости C_Q , которая имеет локальный минимум, равный

1.47 мкФ/см^2 в окрестности нулевого потенциала. Экспериментальные измерения демонстрируют значение C_Q , приблизительно равное 2.5 мкФ/см^2 , однако это происходит из-за того, что в экспериментальных образцах графена присутствуют нарушения идеальной атомной структуры [4]. Квантовая емкость при наличии моновакансии демонстрирует другую зависимость. Она имеет пик, равный 63 мкФ/см^2 вблизи 0 В, причиной которого является высокий и узкий пик плотности электронных состояний вблизи энергии Ферми [14]. Дефект Стоуна–Уэльса демонстрирует зависимость C_Q , похожую на V-форму, но с пиком при -0.7 В . Внедрение атома азота, являющегося электрон-донорной примесью, сдвигает зависимость C_Q на 0.5 В в область более высоких V_Σ . Это показывает, что N-допированный графен может быть подходящим для асимметричных ДЭК, поскольку он демонстрирует лучшие характеристики в качестве отрицательного электрода, чем в качестве положительного.

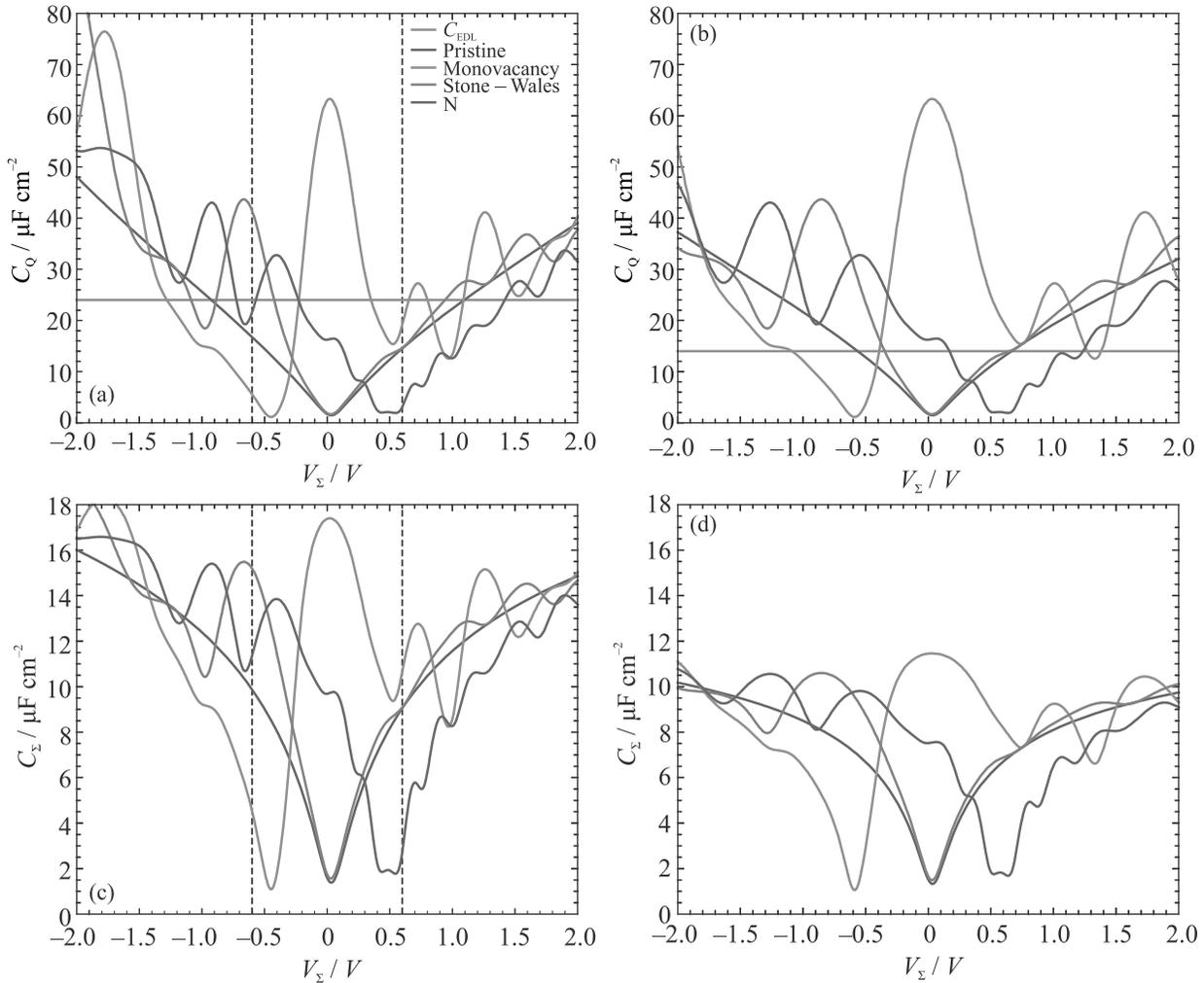


Рис. 2. (Цветной онлайн) Квантовая (a), (b) и суммарная (c), (d) дифференциальная емкость в водных электролитах (a), (c) и ИЖ (b), (d). Черной прерывистой вертикальной линией показано ЭОС воды (a), (c)

Согласно модели, используемой в данной работе, суммарное падение напряжения V_Σ является суммой квантового и классического вкладов и суммарная емкость может быть рассчитана как емкость последовательно соединенных конденсаторов с емкостями C_{DL} и C_Q . Следовательно, чем больше емкость двойного слоя, тем больший вклад имеет C_Q . Это приводит к перераспределению вкладов V_{DL} и V_Q в сторону увеличения значимости V_Q . Данный эффект отражается в варьировании ширины пиков и может быть проиллюстрирован попарным сравнением графиков на рис. 2a–d. Также важно заметить, что в случае ИЖ разница между значениями C_Q (рис. 2b) и C_Σ (рис. 2d) для различных дефектов на границе ЭОС (± 2.0 В) гораздо менее выражена, так как существенное относительное изменение плотности электронных состояний может быть обеспечено только при относительно низких значениях потенциала.

Для того, чтобы более явно проиллюстрировать влияние дефектов на характеристики ДЭК, мы рассчитали зависимость суммарной интегральной емкости от ширины ЭОС V_{EPW} путем интегрирования C_Σ в области потенциалов от $-V_{EPW}/2$ до $V_{EPW}/2$. На рисунке 3a и b изображена зависимость C_Σ^{int} от различных значений ЭОС в случае водных растворов и ИЖ соответственно. Черной прерывистой вертикальной линией на рис. 3a изображено ЭОС воды. Соответственно, зависимость C_Σ^{int} , лежащая правее 1.2 В, изображена для иллюстрации и теоретического исследования. Из графика видно, что наиболее существенные различия в кривых наблюдаются для V_{EPW} , значение которых меньше ~ 2 В. Это происходит из-за того, что рассматриваемые точечные дефекты способны относительно сильно модифицировать ПЭС только вблизи энергии Ферми.

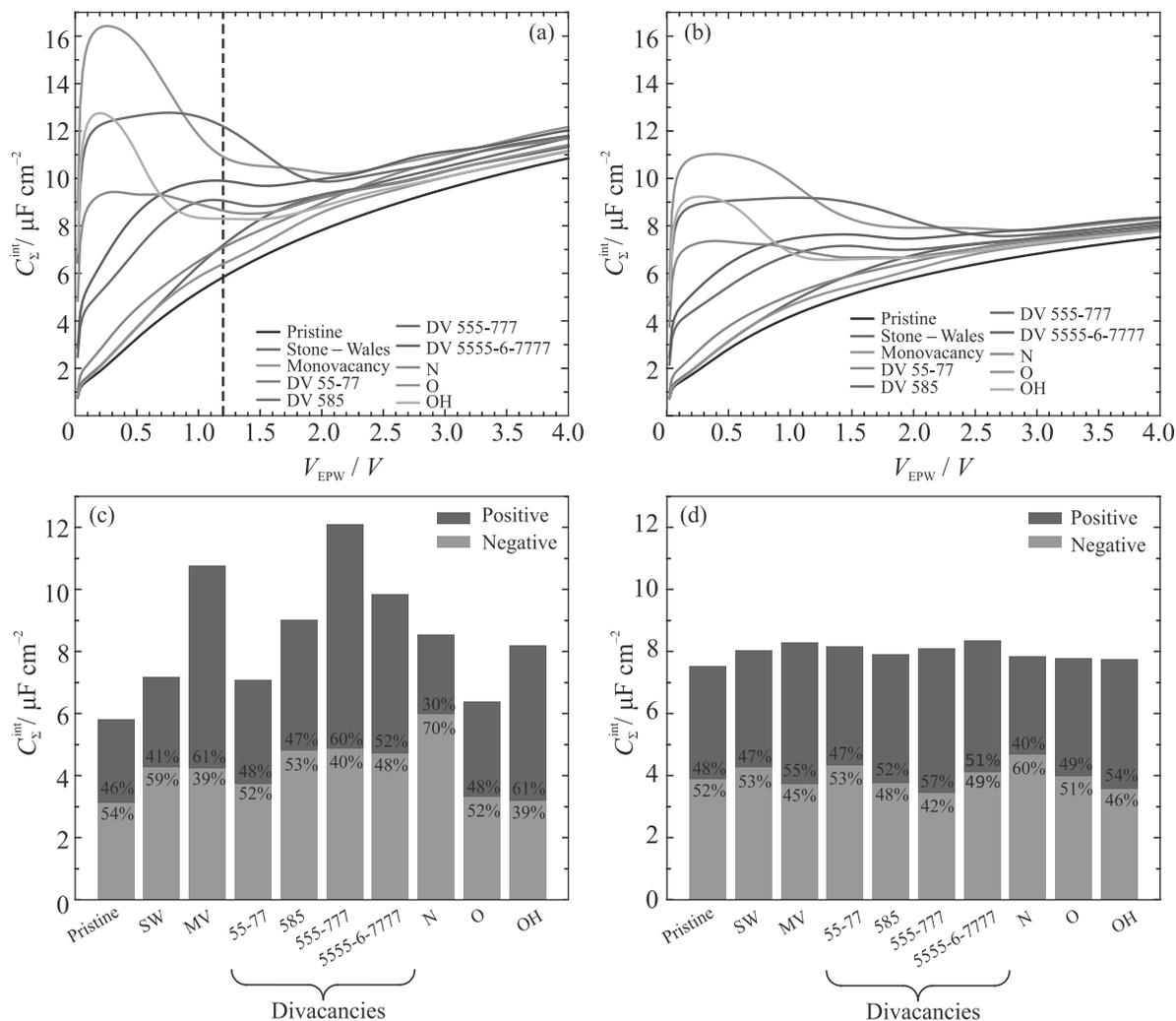


Рис. 3. (Цветной онлайн) (a), (b) – Зависимость суммарной интегральной емкости от ширины ЭОС. (c), (d) – Высота столбцов равна суммарной интегральной емкости при диапазоне приложенного потенциала от -0.6 до 0.6 В (c) и от -2.0 до 2.0 В (d) соответственно. Относительный вклад в суммарную интегральную емкость от интегрирования по положительному и отрицательному участкам потенциала показан цветом столбцов и процентами

Используя такой же подход, мы можем ранжировать графеновые дефекты относительно суммарной емкости для выбранного ЭОС. На рисунке 3c и d продемонстрирована суммарная интегральная емкость рассматриваемых систем и относительный вклад в C_{Σ}^{int} от интегрирования по отрицательным и положительным отрезкам приложенного потенциала.

В водных растворах все рассмотренные дефекты приводят к увеличению интегральной емкости (рис. 3c). Наиболее эффективными являются моновакансия и двойная вакансия 555-777, которые демонстрируют суммарную емкость, равную ~ 11 и ~ 12 мкФ/см², что практически в два раза выше емкости бездефектного графена. Важно отметить, что азотные примеси и кислородсодержащие функциональные группы, применяемые на практике, пока-

зывают заметно более низкие значения. Таким образом, наши результаты свидетельствуют о наличии преимуществ у внутренних дефектов при использовании в суперконденсаторах. В ИЖ мы наблюдаем значения C_{Σ}^{int} (рис. 3d), которые практически не зависят от типа рассматриваемого дефекта, что объясняется интегрированием по гораздо более широкому диапазону ЭОС.

Также наши расчеты показывают, что для некоторых дефектов существуют более подходящие диапазоны ЭОС в водных растворах. Например, относительный вклад интегрирования по положительному отрезку приложенного потенциала составляет 61% в случае MV, в то время как азотная примесь демонстрирует противоположное поведение с относительным вкладом интегрирования по отрицательно-

му диапазону потенциалов в 70%. Следовательно, мы можем изменять C_{Σ}^{int} путем внедрения разных дефектов в катод и анод для того, чтобы достичь оптимальных значений суммарной емкости.

Важно отметить, что мы исследовали только системы с фиксированной концентрацией дефектов и сравнивали различные дефекты друг с другом. Однако варьирование концентрации дефектов способно достаточно сильно влиять на характеристики ДЭК. Например, увеличение концентрации моновакансий от 0.8 до 5.9 ат. % приводит к увеличению квантовой емкости в пять раз [19]. Эксперименты с однослойным графеном в условиях контролируемого изменения концентрации топологических дефектов демонстрируют увеличение суммарной емкости интерфейса при увеличении концентрации дефектов в диапазоне от $0.1 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ до $3.0 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ [40]. Однако структурные модификации могут служить центрами рассеяния носителей заряда, что приводит к снижению проводимости графена [41, 42]. Эксперименты по гетерогенному переносу электрона в похожей системе показывают существенное уменьшение проводимости графена при концентрациях дефектов более $\sim 8 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$ [43]. Теоретические расчеты предсказывают немонотонную зависимость сопротивления однослойного графена при варьировании концентрации дефектов [44]. В результате, наряду с увеличением C_Q , высокая дефектная концентрация может приводить к ухудшениям характеристик устройств, основанных на графене, из-за увеличения сопротивления. Таким образом, вопрос достижения баланса между увеличением емкости и снижением проводимости требует дальнейшего исследования.

IV. Выводы. Используя расчеты в рамках DFT, было исследовано влияние внутренних и внешних дефектов на емкость межфазной границы графен/электролит. Было показано, что различные модификации атомной структуры графена приводят к различным изменениям суммарной емкости интерфейса. Наиболее эффективными в водных растворах являются моновакансия и двойная вакансия 555-777, которые демонстрируют практически двукратное увеличение суммарной емкости по сравнению с бездефектным графеном. В то же время, было показано, что характеристики электрода зависят от ширины электрохимического окна стабильности. Это приводит к отсутствию зависимости значений C_{Σ}^{int} от типа дефекта в случае использования ИЖ для всего набора исследованных дефектов. Также было продемонстрировано, что некоторые дефекты, например, моновакансии больше подходят для внедрения в положительный электрод, в то время как

N-допированный графен демонстрирует большую производительность в отрицательном электроде.

Данная работа была поддержана государственным заданием ОИВТ РАН (# АААА-А19-119022190058-2).

Для получения результатов, представленных в данной статье, были использованы вычислительные мощности Жореса, суперкомпьютера Центра Сколтеха по научным и инженерным вычислительным технологиям для задач с большими массивами данных [45], и Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МСЦ РАН).

1. J. R. Miller and P. Simon, *Electrochem. Soc. Interface* **17**, 31 (2008).
2. P. Simon and Y. Gogotsi, *Philos. Trans. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.* **368**, 3457 (2010).
3. C. Largeot, C. Portet, J. Chmiola, P.-L. Taberna, Y. Gogotsi, and P. Simon, *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 2730 (2008).
4. L. L. Zhang, X. Zhao, and H. Ji, *Energy Environ. Sci.* **5**, 9618 (2012).
5. T. M. Arruda, M. Heon, V. Presser, P. C. Hillesheim, S. Dai, Y. Gogotsi, S. V. Kalinin, and N. Balke, *Energy Environ. Sci.* **6**, 225 (2013).
6. J. Xia, F. Chen, J. Li, and N. Tao, *Nature Nanotech.* **4**, 505 (2009).
7. E. Paek, A. J. Pak, K. E. Kweon, and G. S. Hwang, *J. Phys. Chem. C* **117**, 5610 (2013).
8. C. Zhan, Y. Zhang, P. T. Cummings, and D. Jiang, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 4668 (2016).
9. K. Gopalsamy, J. Balamurugan, T. D. Thanh, N. H. Kim, and J. H. Lee, *Chem. Eng. J.* **312**, 180 (2017).
10. Q. Xu, G. Yang, X. Fan, and W. Zheng, *ACS Omega* **4**, 13209 (2019).
11. Z. Song, H. Duan, L. Li, D. Zhu, T. Cao, Y. Lv, W. Xiong, Z. Wang, M. Liu, and L. Gan, *Chem. Eng. J.* **372**, 1216 (2019).
12. R. Liu, Y. Wang, and X. Wu, *Microporous Mesoporous Mater.* **295**, 109954 (2020).
13. V. Y. Aristov, A. N. Chaika, O. V. Molodtsova, I. M. Aristova, and D. V. Potorochin, *JETP Lett.* **113**, 176 (2021).
14. V. A. Kislenco, S. V. Pavlov, and S. A. Kislenco, *Electrochim. Acta* **341**, 136011 (2020).
15. S. V. Pavlov, V. A. Kislenco, and S. A. Kislenco, *J. Phys. Chem. C* **124**, 18147 (2020).
16. M. M. Ugeda, I. Brihuega, F. Guinea, and J. M. Gómez-Rodríguez, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 96804 (2010).
17. V. A. Demin, D. G. Kvashnin, P. Vancsó, G. I. Márk, and L. A. Chernozatonskii, *JETP Lett.* **112**, 305 (2020).

18. D. A. C. da Silva, A. J. P. Neto, A. M. Pascon, E. E. Fileti, L. R. C. Fonseca, and H. G. Zanin, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 3906 (2020).
19. Q. Zhou, W. Ju, Y. Liu, J. Li, and Q. Zhang, *Appl. Surf. Sci.* **510**, 145448 (2020).
20. I. Heller, J. Kong, K. A. Williams, C. Dekker, and S. G. Lemay, *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 7353 (2006).
21. C. Zhan, J. Neal, J. Wu, and D. Jiang, *J. Phys. Chem. C* **119**, 22297 (2015).
22. C. Zhong, Y. Deng, W. Hu, J. Qiao, L. Zhang, and J. Zhang, *Chem. Soc. Rev.* **44**, 7484 (2015).
23. A. Lewandowski, A. Olejniczak, M. Galinski, and I. Stepniak, *J. Power Sources* **195**, 5814 (2010).
24. M. V. Fedorov and A. A. Kornyshev, *Chem. Rev.* **114**, 2978 (2014).
25. N. Georgi, A. A. Kornyshev, and M. V. Fedorov, *J. Electroanal. Chem.* **649**, 261 (2010).
26. V. Ivaništšev, K. Kirchner, T. Kirchner, and M. V. Fedorov, *J. Phys. Condens. Matter* **27**, 102101 (2015).
27. A. J. Pak, E. Paek, and G. S. Hwang, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 19741 (2013).
28. E. Paek, A. J. Pak, and G. S. Hwang, *J. Electrochem. Soc.* **160**, A1 (2012).
29. E. Uesugi, H. Goto, R. Eguchi, A. Fujiwara, and Y. Kubozono, *Sci. Rep.* **3**, 1 (2013).
30. H. Ers, M. Lembinen, M. Misin, A. P. Seitsonen, M. V. Fedorov, and V. B. Ivaništšev, *J. Phys. Chem. C* **124**, 19548 (2020).
31. K. F. Garrity, J. W. Bennett, K. M. Rabe, and D. Vanderbilt, *Comput. Mater. Sci.* **81**, 446 (2014).
32. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini et al. (Collaboration), *J. Phys. Condens. Matter.* **21**, 395502 (2009).
33. G. Kresse and D. Joubert, *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).
34. J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka, O. A. Vydrov, G. E. Scuseria, L. A. Constantin, X. Zhou, and K. Burke, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 136406 (2008).
35. H. Maeda, M. Itami, Y. Yamauchi, and H. Ohmori, *Chem. Pharm. Bull.* **44**, 2294 (1996).
36. M. S. Islam, S. Lamperski, M. M. Islam, D. Henderson, and L. B. Bhuiyan, *J. Chem. Phys.* **152**, 204702 (2020).
37. V. Lockett, R. Sedev, S. Harmer, J. Ralston, M. Horne, and T. Rodopoulos, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12**, 13816 (2010).
38. F. Silva, C. Gomes, M. Figueiredo, R. Costa, A. Martins, and C. M. Pereira, *J. Electroanal. Chem.* **622**, 153 (2008).
39. M. T. Alam, M. M. Islam, T. Okajima, and T. Ohsaka, *J. Phys. Chem. C* **112**, 16600 (2008).
40. J. Chen, Y. Han, X. Kong, X. Deng, H. J. Park, Y. Guo, S. Jin, Z. Qi, Z. Lee, Z. Qiao, R. S. Ruoff, and H. Ji, *Angew. Chemie Int.* **55**, 13822 (2016).
41. J.-Y. Hwang, C.-C. Kuo, L.-C. Chen, and K.-H. Chen, *Nanotechnology* **21**, 465705 (2010).
42. A. Lherbier, S. M.-M. Dubois, X. Declerck, S. Roche, Y.-M. Niquet, and J.-C. Charlier, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 46803 (2011).
43. J.-H. Zhong, J. Zhang, X. Jin, J.-Y. Liu, Q. Li, M.-H. Li, W. Cai, D.-Y. Wu, D. Zhan, and B. Ren, *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 16609 (2014).
44. S. H. M. Jafri, K. Carva, E. Widenkvist, T. Blom, B. Sanyal, J. Fransson, O. Eriksson, U. Jansson, H. Grennberg, O. Karis, R. A. Quinlan, B. C. Holloway, and K. Leifer, *J. Phys. D. Appl. Phys.* **43**, 45404 (2010).
45. I. Zacharov, R. Arslanov, M. Gunin, D. Stefonishin, A. Bykov, S. Pavlov, O. Panarin, A. Maliutin, S. Rykovanov, and M. Fedorov, *Open Eng.* **9**, 512 (2019).

Спиновые флуктуации и отрицательная теплоемкость (Миниобзор)

С. М. Стишов¹⁾, А. Е. Петрова

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

Поступила в редакцию 2 июля 2021 г.

После переработки 27 июля 2021 г.

Принята к публикации 27 июля 2021 г.

Рассматривается проблема отрицательной теплоемкости, обсуждаемая в ряде теоретических и экспериментальных работ, посвященных исследованию слабых зонных магнетиков. Детальный анализ теплоемкости геликоидального зонного магнетика MnSi , по-видимому, демонстрирует, что в данном случае отрицательная теплоемкость представляет собой псевдоэффект. Последнее обусловлено игнорированием взаимодействия спиновой подсистемы с другими степенями свободы системы при анализе парциальных вкладов в теплоемкость системы. Отрицательная теплоемкость, полученная путем вычитания электронной и фононной составляющих из общей теплоемкости системы, очевидно, представляет собой эффективный магнитный вклад, включающий эффекты спин-фононного взаимодействия.

DOI: 10.31857/S1234567821170055

В 1972 г. Мурата и Дониак [1] в рамках классического подхода с использованием гамильтониана типа Гинзбурга–Ландау построили теорию, описывающую термодинамические свойства и фазовый переход в слабых ферромагнетиках. Согласно [1] фазовый переход в этих системах определяется ангармоническим членом в гамильтониане, обуславливающим взаимодействие мод возбуждения (*mode-mode coupling*). Именно с этим обстоятельством связано возникновение мощных флуктуаций магнитного момента.

Авторы [1] заключили, что главное физическое следствие теории флуктуирующих мод в применении к спиновой подсистеме состоит в отрицательном вкладе в теплоемкость при температурах выше температуры фазового перехода. Последнее возникает в результате увеличения жесткости (*stiffening*) флуктуирующих мод при возрастании среднеквадратичной флуктуации параметра порядка (магнитного момента) с температурой. Этот эффект также предсказан в работе [2] на основе расчетов в рамках высокотемпературного вириального разложения. Отождествляя константы гамильтониана с параметрами взаимодействующего электронного газа, авторы смогли рассчитать кривую теплоемкости в области магнитного фазового перехода для своей модели и сопоставить ее с экспериментальными данными для соединения Sc_3In при использовании всего лишь одного подгоночного параметра (рис. 1).

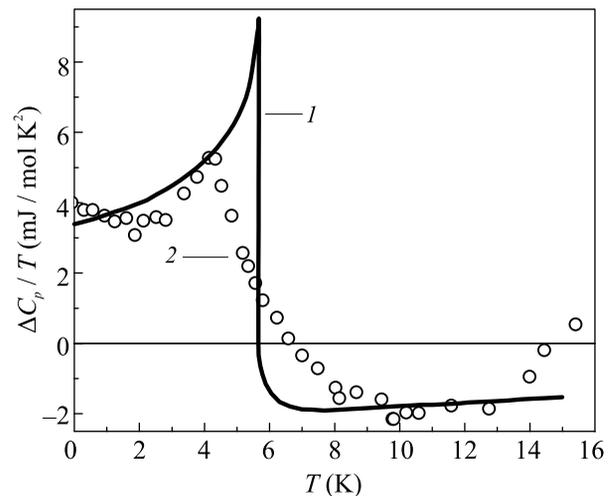


Рис. 1. Магнитная аномалия теплоемкости, предсказанная теорией Мураты и Дониака (1), для случая слабого зонного ферромагнетика в сравнении с экспериментальными данными для Sc_3In за вычетом немагнитного вклада (2). Построено по данным [1]

В последующей работе Мурата [3] обосновал справедливость модели Мураты и Дониака [1]. Макоши и Мория [4] (см. также [5]) исследовали влияние спиновых флуктуаций на теплоемкость слабых зонных ферромагнетиков, используя теорию Мории и Кавабаты [6], учитывающую самосогласованным образом взаимодействие флуктуирующих спиновых мод. В этой работе подтверждено существование

¹⁾e-mail: stishovsm@lebedev.ru

отрицательного вклада в теплоемкость, вызванного спиновыми флуктуациями (рис. 2).

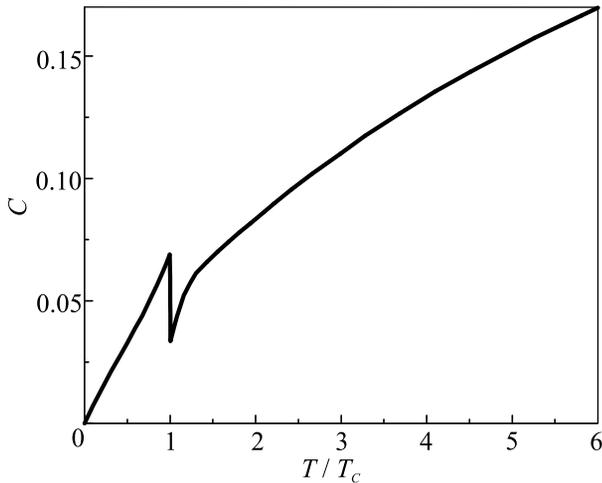


Рис. 2. Теплоемкость слабо ферромагнитных металлов согласно Макоши и Мории. Рисунок построен по данным [4]

Мон и Хильшер [7] (см. также [8]), используя модифицированное разложение Ландау [9], снова пришли к заключению об отрицательном вкладе в теплоемкость и энтропию в спиновой системе, обусловленного спиновыми флуктуациями при температурах, превышающих температуру фазового перехода. Наконец, Такахашаи и Накано [10] (см. также Такахашаи [11]) заключили, что отрицательный вклад в теплоемкость и энтропию, найденный в ряде работ во флуктуирующих спиновых системах, является результатом многочисленных упрощений.

Следует, однако, заметить, что отрицательный вклад в теплоемкость и энтропию, найденный для части некоторой системы, необязательно означает общую неустойчивость системы и вполне может наблюдаться.

В этой связи представляют интерес результаты расчетов классическим методом Монте Карло системы взаимодействующих спинов, которые прекрасно воспроизводят специфику фазового перехода в MnSi. На рисунке 3 иллюстрируется пример соответствующих расчетов, включающих моделирование продольных спиновых флуктуаций [12]. Из рисунка 3 следует, что отрицательная теплоемкость не наблюдается при моделировании чисто спиновых систем, не содержащих иных степеней свободы, всегда имеющих место в реальных системах.

Обратимся далее к экспериментальным данным. На рисунке 1 демонстрируется поведение магнитной составляющей теплоемкости Sc₃In в области маг-

нитного фазового перехода. Отрицательные значения теплоемкости при температурах выше T_c вполне очевидны, что, казалось бы, подтверждает теоретические выводы работы [1]. Однако главный вопрос здесь заключается в адекватности процедуры вычитания немагнитного вклада. Очевидно, что некорректная идентификация и характеристика соответствующих немагнитных членов может привести к ошибочным заключениям.

Другой интересный пример связан с исследованиями теплоемкости геликоидального зонного магнетика MnSi [13]. На рисунке 4 приведены экспериментальные зависимости теплоемкости MnSi от температуры в нулевом магнитном поле и в поле 4 Тл. Наряду с этим приведены расчетные данные, включающие сумму фононной теплоемкости решетки и электронного линейного члена вида γT . Фононная теплоемкость MnSi была вычислена с помощью процедуры, включающей расчеты полной энергии в рамках спин-поляризованной версии функционала плотности, дисперсионных кривых с использованием кода Quantum Espresso и плотности фононных состояний в квазигармоническом приближении (детали см. в [13]²⁾). Учитывая высокую температуру Дебая для MnSi (~ 660 К) [13], следует полагать, что последнее приближение является вполне адекватным при температурах, рассматриваемых в статье.

Как видно из рис. 4, магнитное поле 4 Тл уничтожает магнитный фазовый переход и сопутствующие спин-флуктуационные явления, в том числе побочный максимум на экспериментальной кривой теплоемкости. Кривая зависимости $C_p(T)$ в поле 4 Тл смыкается с экспериментальной кривой в низкотемпературном и высокотемпературном пределах, в то же время пересекая последнюю в области высокотемпературного склона флуктуационного максимума. Расчетная кривая $C_p(T)$, смыкаясь с обоими экспериментальными данными в низкотемпературном пределе, пересекает экспериментальную зависимость $C_p(T)$ при $H = 0$ в основании флуктуационного максимума и прогрессивно отклоняется от экспериментальных кривых при повышении температуры в сторону больших значений теплоемкости. Обратим внимание, что подавление геликоидальных спиновых флуктуаций магнитным полем приводит к возрастанию теплоемкости при $T > T_c$, как это следует из рис. 4. Эта ситуация означает, что существует меха-

²⁾Следует заметить, что характеристики фононного спектра MnSi, полученные в [13] прекрасно согласуются с экспериментальными результатами работы [15].

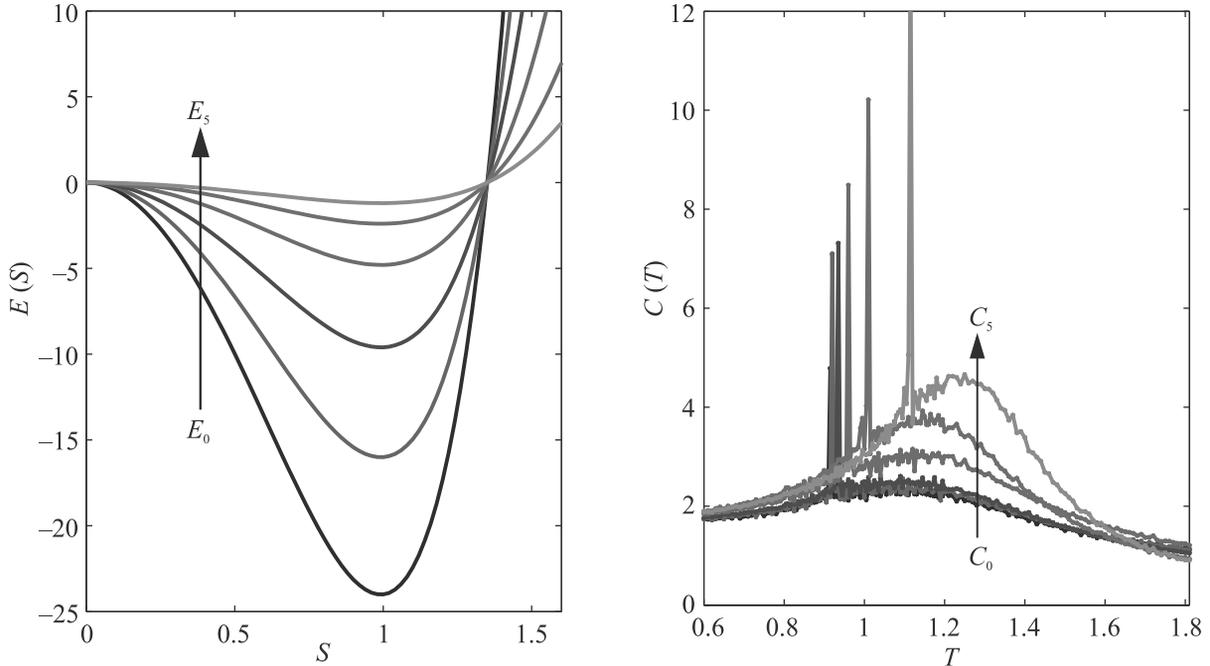


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимости энергии продольных спиновых флуктуаций от величины спина (левая панель) и соответствующие температурные зависимости теплоемкости (правая панель), функциональные зависимости $E(S)$ вводятся эмпирическим путем, при этом спин рассматривается как независимая флуктуирующая переменная. Построено по данным [12]

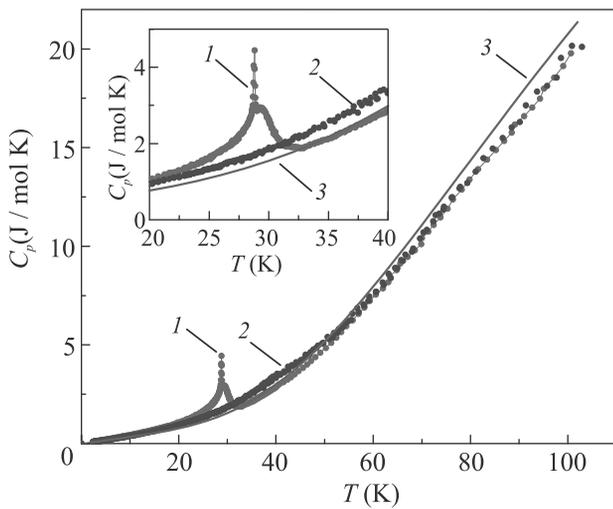


Рис. 4. (Цветной онлайн) Теплоемкость MnSi, измеренная в нулевом магнитном поле (1) и в поле 4 Тл (2). Сплошная линия представляет собой немагнитный вклад (3), рассчитанный как сумма фононного вклада и линейного электронного члена [13]. На вставке изображена область фазового перехода в увеличенном масштабе

низм, позволяющий специфическим спиновым флуктуациям влиять на теплоемкость системы.

Как видно из рис. 5, кривая 2, характеризующая поведение теплоемкости электронной и магнитной

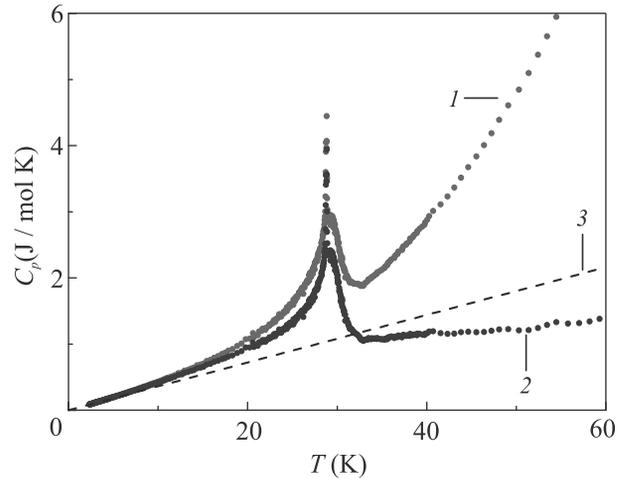


Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость теплоемкости C_p (1) и бесфононной теплоемкости (2) MnSi от температуры, (3) – теплоемкость электронного газа – γT , $\gamma = 0.036$ Дж/моль K^2 [14]

подсистем MnSi в поле $H = 0$ при $T > T_c$ демонстрирует весьма слабую температурную зависимость, в то время как прямая 3, отображающая теп-

лоемкость электронной подсистемы, как вырожденного электронного газа, проходит выше кривой 2. Последнее говорит о том, что теплоемкость MnSi при $T > T_c$ должна включать член, компенсирующий линейный рост теплоемкости электронного газа. Последнее, по-видимому, возникает в результате спин-флуктуационных явлений. В то же время линейное приближение для теплоемкости электронов, по крайней мере, работает при $T < T_c$, как можно судить по поведению бесфононной теплоемкости MnSi в сильном магнитном поле (рис. 6).

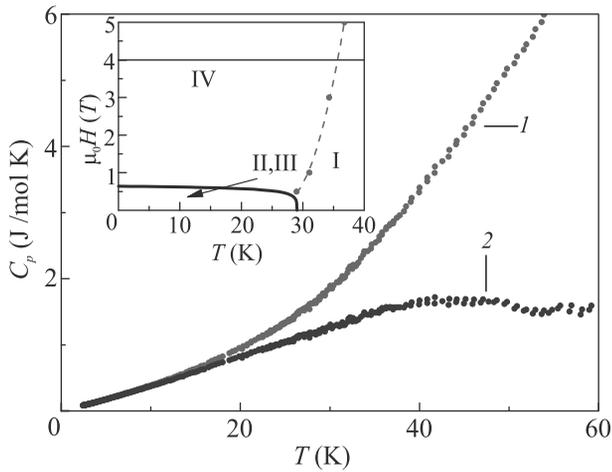


Рис. 6. (Цветной онлайн) Зависимость теплоемкости C_p (1) и бесфононной теплоемкости $C_p - C_{ph}$ (2) в магнитном поле 4 Тл для MnSi. На вставке показана магнитная фазовая диаграмма MnSi, I – парамагнитная область, II, III – геликоидальные фазы, IV – спин поляризованный ферромагнетик. Квазилинейный характер кривой (2) с определенностью при $T < \sim 40$ К указывает на доминирующую роль электронного вклада в бесфононную теплоемкость в поле 4 Тл в этой области температур

Следует ли думать, что взаимодействие развитых спиновых флуктуаций с электронной подсистемой при $T > T_c$ подавляет электронную теплоемкость? В этой связи показателен рис. 7, где отчетливо видно, что экстраполяция высокотемпературной ветви отношения $\Delta C_p/T$ к нулю дает значение 0.036 Дж/моль K^2 , что полностью согласуется со значением γ -коэффициента электронной теплоемкости, полученной в [14]. Отсюда следует, что зависимость электронной теплоемкости от температуры при $T > T_c$ вряд ли подвергается серьезным изменениям (энергия Ферми в MnSi составляет величину порядка 10^5 К). По-видимому, природу поведения величины $C_p - C_{ph}$ при $T > T_c$ нужно искать в специфике взаимодействия спиновых флуктуаций и фо-

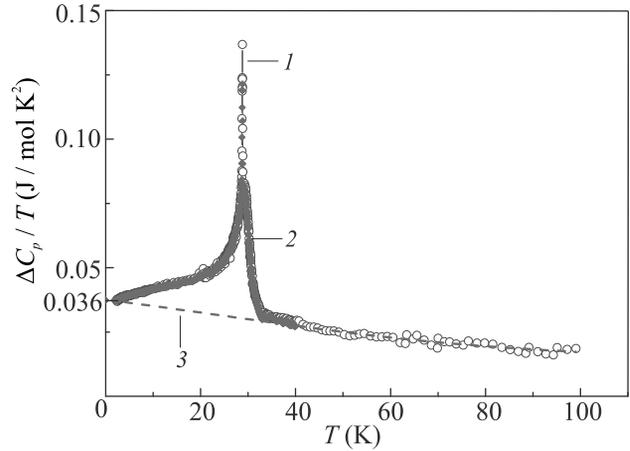


Рис. 7. (Цветной онлайн) Зависимость отношения $\Delta C_p/T$, где $\Delta C_p = C_p - C_{ph}$ – бесфононная теплоемкость, от температуры для MnSi; 1 – [15], 2 – [13], 3 – экстраполяция высокотемпературной ветви $\Delta C_p/T$ к $T = 0$

нонной подсистемы. Последнее означает, что теоретический фононный спектр не вполне отражает реальную ситуацию. К сожалению, экспериментальные исследования фононов в MnSi пока не дают отчетливых указаний по этому поводу [15, 16]. Далее, вычитая теплоемкость электронного газа (3) из бесфононной теплоемкости (2) на рис. 5, получим вклад в теплоемкость системы, фактически обусловленный взаимодействием спиновой и фононной подсистем (см. рис. 8).

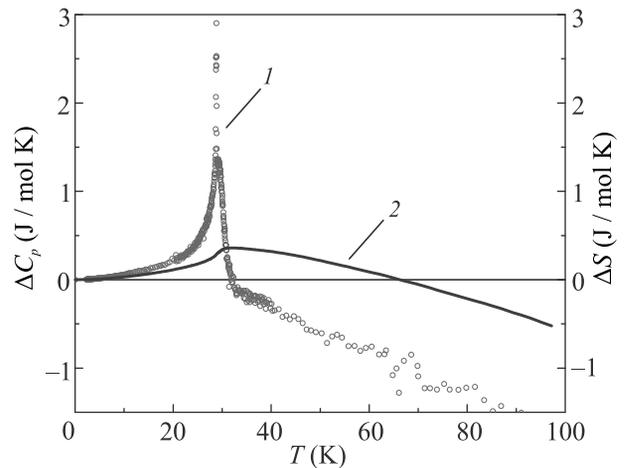


Рис. 8. (Цветной онлайн) Зависимость магнитных составляющих теплоемкости (1) и энтропии (2) MnSi от температуры, вычисленные как разница между экспериментальными значениями соответствующих величин и рассчитанными фононным и электронным вкладами [13]

На рисунке 8 демонстрируются вклады в теплоемкость и энтропию MnSi, обусловленные взаимодействием спиновой и фононной подсистем, полученные в результате вычитания немагнитных вкладов из экспериментальных данных в нулевом магнитном поле (см. текст). Отрицательные значения парциальных теплоемкости и энтропии при температурах выше T_c , очевидно, не должны удивлять, поскольку они возникают в результате игнорирования вклада спин-фононного взаимодействия в немагнитную составляющую теплоемкости. Следует заключить, что отрицательные теплоемкость и энтропия представляет собой мнимый эффект в сильно флуктуирующих спиновых системах. Можно думать, что развитые спиновые флуктуации при $T > T_c$, как это имеет место в MnSi, подавляют теплоемкость системы в целом, по-видимому, благодаря спин-фононному взаимодействию. В итоге, попытки выделить (спиновую) магнитную составляющую теплоемкости и энтропии путем вычитания фононного и электронного вкладов, не содержащих членов взаимодействия, являются неправомерными. Таким образом, эффективная магнитная теплоемкость системы, являясь отрицательной величиной, включает также и эффекты спин-фононного взаимодействия. В заключение заметим, что настоящие выводы справедливы в случае линейного или квази линейного поведения электронной теплоемкости MnSi при $T > T_c$.

Авторы благодарят А. М. Белемука и В. Ю. Ирхина за плодотворные обсуждения и замечания.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского научного фонда (грант # 17-12-01050П).

1. K. K. Murata and S. Doniach, Phys. Rev. Lett. **29**, 285 (1972).
2. J. Callaway, Phys. Rev. B **5**, 106 (1972).
3. K. K. Murata, Phys. Rev. **12**, 282 (1975).
4. K. Makoshi and T. Moriya, J. Phys. Soc. Jpn. **38**, 10 (1975).
5. T. Moriya, *Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism*, Springer, Berlin (1985).
6. T. Moriya and A. Kawabata, J. Phys. Soc. Jpn. **34**, 639 (1973).
7. P. Mohn and G. Hilscher, Phys. Rev. B **40**, 9126 (1989).
8. P. Mohn, *Magnetism in the Solid State*, Springer, Berlin (2003).
9. G. G. Lonzarich and L. Taillefer, J. Phys. C: Solid State Phys. **18**, 4339 (1985).
10. Y. Takahashi and H. Nakano, J. Phys.: Condens. Matter **16**, 4505 (2004).
11. Y. Takahashi, *Spin Fluctuation Theory of Itinerant Electron Magnetism*, Springer, Berlin (2013).
12. A. M. Belemuk and S. M. Stishov, J. Phys.: Condens. Matter **31**, 135801 (2019).
13. S. M. Stishov, A. E. Petrova, A. A. Shikov, T. A. Lograsso, E. I. Isaev, B. Johansson, and L. L. Daemen, Phys. Rev. Lett. **105**, 236403 (2010).
14. S. M. Stishov, A. E. Petrova, S. Khasanov, G. Kh. Panova, A. A. Shikov, J. C. Lashley, D. Wu, and T. A. Lograsso, J. Phys.: Condens. Matter **20**, 235222 (2008).
15. P. A. Alekseev, E. S. Clementyev, R. Heid, A. S. Ivanov, D. Lamago, J.-M. Mignot, A. E. Petrova, and S. M. Stishov, J. Phys. Conf. Ser. **273**, 012129 (2011).
16. H.-M. Eiter, P. Jaschke, R. Hackl, A. Bauer, M. Gangl, and C. Pfleiderer, Phys. Rev. B **90**, 024411 (2014).

Влияние механических напряжений на расщепление спиновых подуровней в 4H-SiC

И. Д. Бреев⁺, К. В. Лихачев^{+,*}, В. В. Яковлева⁺, И. П. Вейшторг^{+,×}, А. М. Скоморохов^{+,×}, С. С. Нагальюк⁺,
Е. Н. Мохов⁺, Г. В. Астахов^{+,°}, П. Г. Баранов⁺, А. Н. Анисимов^{+,1)}

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

^{*} Университет ИТМО, 197101 С.-Петербург, Россия

[×] Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет, 197376 С.-Петербург, Россия

[°] Институт физики ионных пучков и исследования материалов, Центр Гельмгольца Дрезден-Россендорф (HZDR),
01328 Дрезден, Германия

Поступила в редакцию 22 июля 2021 г.

После переработки 28 июля 2021 г.

Принята к публикации 29 июля 2021 г.

Продemonстрировано влияние статической механической деформации на расщепление спиновых подуровней центров окраски на основе вакансий кремния со спином $S = 3/2$ в карбиде кремния при комнатной температуре. Исследована деформированная гетерограница структуры AlN/4H-SiC. Определены значения напряжения вблизи гетероинтерфейса, при помощи конфокальной спектроскопии комбинационного рассеяния света. Применяя метод оптически детектируемого магнитного резонанса (ОДМР) впервые экспериментально получена величина спин-механического взаимодействия для центра V2 в 4H-SiC. Такой подход позволил определить величину констант спин-деформационного взаимодействия для центра V2 в 4H-SiC: $\Xi = -0.1 \pm 0.25$ ГГц/деформация, $\Xi' = -0.8 \pm 0.1$ ГГц/деформация. Результаты работы могут быть применены для контроля спиновых состояний в SiC за счет контролируемой пьезоэлектрической деформации AlN. По результатам данной работы становится возможным оценить параметр тонкой структуры спиновых центров D , используя метод комбинационного рассеяния света. Такого рода оценка позволит прогнозировать магнитометрические параметры наносенсоров на основе нанокристаллов SiC.

DOI: 10.31857/S1234567821170067

Спиновые центры в объемном и нанокристаллическом карбиде кремния (SiC) рассматриваются как перспективная платформа для квантовых устройств. Предлагается использовать их для квантовой обработки информации [1–3], элементов нанофотоники [4] и квантовой сенсорики [5]. Центры на основе вакансий кремния (V_{Si}^-) со спином ($S = 3/2$), обозначаемые обычно по бесфононным линиям V1, V2, ... в гексагональных (4H-SiC, 6H-SiC) и ромбических (15R-SiC, 21R-SiC) политипах в SiC обладают перспективными спиновыми свойствами в основном и возбужденном состояниях [6–13]. Такие центры в SiC представляют особый интерес, поскольку их спиновое состояние может быть выстроено и считано с помощью метода оптического детектирования магнитного резонанса (ОДМР) при высоких температурах, достигающих 250 °C [14]. Используя метод ОДМР, возможно проводить высокочувствительную квантовую магнито-

метрию [11, 15, 16] и термометрию [15, 17]. Помимо этого одиночные центры V_{Si}^- [18, 19] демонстрируют высокий контраст считывания [6, 20] и высокую спектральную стабильность [21], что является основой для создания квантовых повторителей [22, 23].

Точный контроль спиновых и оптических свойств V_{Si}^- в SiC имеет решающее значение для квантовой сенсорики и квантовой передачи информации. Наиболее часто применяемый подход основан на смещении Штарка нульфононной линии и расщеплении спинового подуровня в нулевом магнитном поле [24–26]. В качестве альтернативы эффекту Штарка может быть применено резонансное воздействие при помощи акустических волн [27, 28]. В этой работе мы показываем, что механическое напряжение изменяет расщепление D между спиновыми подуровнями со спином $S = 3/2$ и $S = 1/2$ у V2 в 4H-SiC. Для этого мы исследуем гетероструктуру AlN/4H-SiC, где механическое напряжение в кристалле возникает вблизи границы раздела из-за различных параметров ре-

¹⁾e-mail: aan0100@gmail.com

шетки и параметров термического расширения AlN и 4H-SiC [29]. Используя конфокальную спектроскопию комбинационного рассеяния света (КРС) и метод ОДМР, мы одновременно определяем напряжение решетки через сдвиг фононных мод КРС 4H-SiC и расщепление спиновых подуровней. Учитывая, что AlN является пьезоэлектриком, который также используется для изготовления электроакустических преобразователей на SiC [27], наши результаты могут быть применены для локального контроля спиновых состояний в SiC за счет деформаций.

Гетероструктура AlN/4H-SiC была выращена сублимационным сэндвич-методом [30]. Подложка 4H-SiC выращивается при температуре 2200 °C в атмосфере аргона. Скорость роста кристаллов составляла около 100 мкм/ч. Концентрация фоновых примесей, полученная с помощью метода вторично-ионной масс-спектрометрии (ВИМС), составляет: N = $7.3 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$; B = $4.4 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$; Al = $4.2 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Перед началом роста AlN кристалл 4H-SiC полируют и нарезают на пластины. Кристаллы AlN выращивают при следующих параметрах: температура в камере составляет около 2000 °C, температурный градиент составляет около 5 K/мм, давление азота в камере варьируется в диапазоне 0.3–1 атм.

Для создания V_{Si} было осуществлено облучение электронами с энергией 2 МэВ с потоком 10^{18} см^{-2} . При таком облучении достигается однородное распределение V_{Si} и оптимальное соотношение сигнал/шум ОДМР [31]. После облучения кристаллы скалывались перпендикулярно поверхности роста. Поверхности сколов оптически гладкие, что позволяло проводить конфокальное оптическое сканирование без дополнительной полировки.

Для измерения спектров КРС, фотолюминесценции (ФЛ) и ОДМР мы использовали оптическую базу конфокального микроскопа (“Spectra” NT-MDT SI), оснащенного спектрометром (SOL Instruments), ПЗС матрицей (Andor) и фотодетектором (Hamamatsu C12483-250). Сбор сигнала осуществлялся с использованием объектива с NA = 0.9 и входным пинхолом 100 мкм, что обеспечивало сбор сигнала из объема менее 5 мкм³. В режиме регистрации спектров КРС и ФЛ оптическое возбуждение происходило при помощи полупроводникового лазера ($\lambda = 532 \text{ нм}$, мощностью возбуждения около 5 мВт). В режиме регистрации ОДМР возбуждение ФЛ происходило при помощи полупроводникового лазера ($\lambda = 785 \text{ нм}$, мощностью возбуждения около 100 мВт). Резонансная радиочастота передается на антенну, расположенную в непосредственной

близости от образца. Резонансная частота подается с амплитудной модуляцией. В процессе регистрации ОДМР было скомпенсировано внешнее магнитное поле вдоль оси симметрии V_{Si} (c-оси) до уровня 10 мкТл. Упрощенная схема регистрации ОДМР приведена на рис. 1.

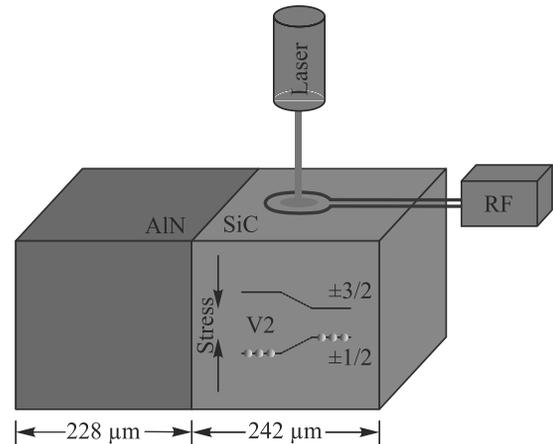


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схематическое представление гетероструктуры AlN/4H-SiC. Упрощенная схема регистрации ОДМР демонстрирует возбуждающий лазер (523 или 785 нм) (Laser) и генератор радиочастоты (RF). На зеленом фоне схематично показаны линии спиновых подуровней V_{Si} (не масштабируемое) в деформированной области SiC (справа от гетерограницы) и недеформированной области SiC (вблизи гетерограницы). Сплошные круги схематично показывают электроны, выстроенные оптически при лазерной накачке

Применяя вышеописанные методы, были получены спектры КРС и ОДМР для 4H-SiC, в зависимости от расстояния до гетерограницы. Примеры спектров КРС непосредственно на границе раздела и на расстоянии 25 мкм от нее приведены на рис. 2. На нем показаны три резонанса КРС, которые связаны с E_2 ТО, A_1 ТО и E_1 ТО фононными модами в 4H-SiC [32, 33]. Сплошной линией показана аппроксимация линий для вычисления положения КРС мод. На данных спектрах наблюдаются сдвиги положения резонансов КРС вблизи гетерограницы AlN/4H-SiC от значений в недеформированном кристалле. В частности, $\Delta\omega_{E_2} = 1.24 \text{ см}^{-1}$ для моды E_2 с частотой 775.86 см^{-1} и $\Delta\omega_{A_1} = 2.5 \text{ см}^{-1}$ для моды A_1 с частотой 781.83 см^{-1} .

Изменение положения центров резонансов КРС происходит из-за деформации кристалла (сжатие) 4H-SiC вблизи границы раздела, что схематично показано на рис. 3. Одноосная деформация характеризуется компонентами напряжений вдоль ($\sigma_{||}$) и пер-

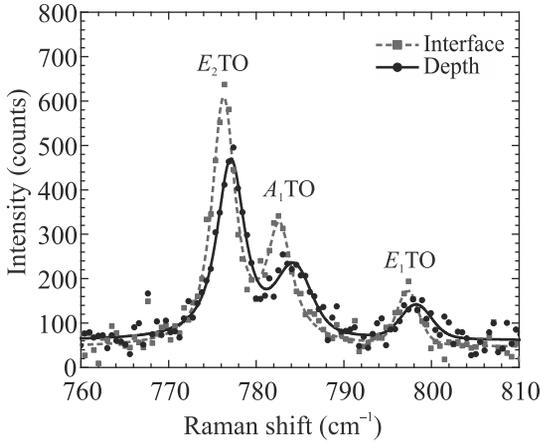


Рис. 2. (Цветной онлайн) Спектр КРС AlN/4H-SiC: красная линия – вблизи границы раздела; черная линия – на расстоянии 25 мкм от границы раздела. Пики, связанные с E₂ TO, A₁ TO и E₁ TO фоновыми модами, подписаны на рисунке

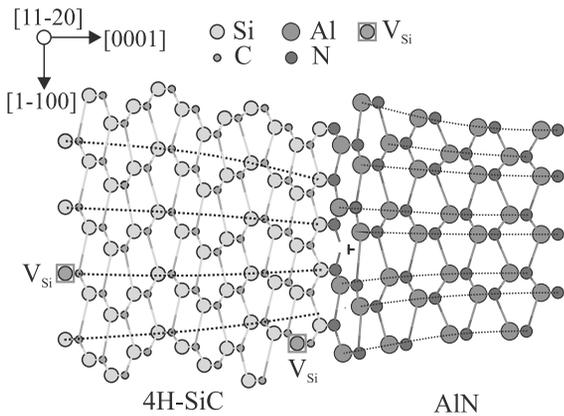


Рис. 3. (Цветной онлайн) Схематичное изображение деформации решетки в AlN и 4H-SiC из-за изменения напряжений вблизи границы раздела

пендикулярно (σ_{\perp}) оси c . Смещение положения центров резонансов КРС определяется формулой $\Delta w_i = 2a'_i \sigma_{\perp} + b'_i \sigma_{\parallel}$. Используя значения деформационных потенциалов для фоновых мод A₁ TO и E₂ TO [34] и константы эластичности [35], мы вычислили профиль распределения напряжений и деформаций от 0 до 32 мкм от гетерограницы. Максимальные значения компонент тензора напряжений наблюдаются на гетерогранице и составляют $\sigma_{\perp} = -0.19$ ГПа и $\sigma_{\parallel} = -0.87$ ГПа. Компоненты тензора деформаций в этой точке равны, соответственно, $u_{\perp} = -0.18 \times 10^{-3}$ и $u_{\parallel} = -1.54 \times 10^{-3}$. Используемая методика расчетов зависимости деформаций от расстояния до границы была ранее подробно описана в [29].

Рассчитанные по данной методике деформации позволяют проанализировать их влияние на вакансионные центры. Эффективный спиновый Гамильтониан с учетом деформаций при отсутствии внешнего магнитного поля можно представить в виде [36, 37]:

$$H = \left(S_z^2 - \frac{3}{4} \right) \times \left[\Xi \left(u_{zz} - \frac{u_{xx} + u_{yy}}{2} \right) + \Xi' \left(u_{zz} + \frac{u_{xx} + u_{yy}}{2} \right) + D_0 \right], \quad (1)$$

где D_0 – параметр тонкой структуры без учета механических напряжений, Ξ и Ξ' – компоненты тензора спин-деформационного взаимодействия, $u_{\alpha\beta}$ – компоненты тензора деформаций. Гамильтониан (1) записывается с учетом механических деформаций в одноосном приближении для симметрии $C_{\infty v}$, когда их влияние на вакансионные центры описывается тензором спин-деформационного взаимодействия $\Xi_{\alpha\beta}$ со значимыми компонентами Ξ и Ξ' . В случае одноосной деформации по оси z ($u_{zz} = u_{\parallel}$, $u_{xx} = u_{yy} = u_{\perp}$) расщепление спиновых подуровней V_{Si} в нулевом магнитном поле Δ будет зависеть от компонент тензора напряжений как:

$$\Delta = 2 \left[\Xi(u_{\parallel} - u_{\perp}) + \Xi'(u_{\parallel} + u_{\perp}) + D_0 \right]. \quad (2)$$

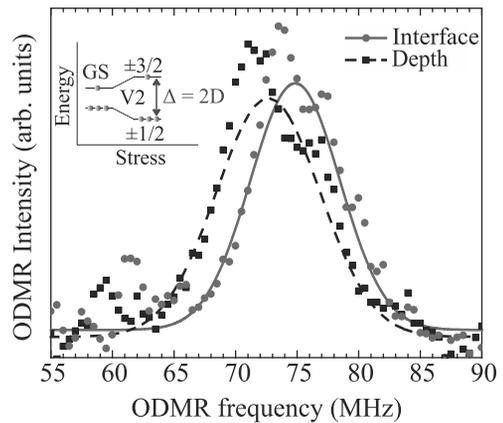


Рис. 4. (Цветной онлайн) Спектр ОДМР центра V2 в 4H-SiC вблизи гетерограницы. Красная линия – спектр, полученный на гетерогранице AlN/SiC; черная линия – спектр, полученный на расстоянии 25 мкм от гетерограницы AlN/SiC. Слева на вставке показано расщепление основного состояния спиновых подуровней V_{Si} в нулевом магнитном поле Δ . Регистрация спектров происходит при комнатной температуре

На рисунке 4 изображены ОДМР-спектры, зарегистрированные при комнатной температуре на гетерогранице AlN/4H-SiC (Interface) и на расстоянии

25 мкм от нее (Depth). Положение резонанса, относящегося к вакансионным центрам V2 [38], определяется расщеплением спиновых подуровней в нулевом магнитном поле $\nu = |\Delta|/h$. Для определения положения центра ОДМР резонанса была проведена аппроксимация функцией Гаусса.

Вблизи гетерограницы ОДМР резонанс центра V2 сдвигается в область более высоких частот по сравнению с ОДМР резонансом на свободной поверхности 4H-SiC. Используя уравнение (2), положение линии ОДМР и значений компонент тензора деформаций, были рассчитаны компоненты тензора спин-деформационного взаимодействия $\Xi = -0.1 \pm 0.25$ ГГц/деформация, $\Xi' = -0.8 \pm 0.15$ ГГц/деформация и $D_0 = 36 \pm 0.15$ МГц. Используя полученные значения Ξ и Ξ' , рассчитаны зависимости положения центра резонанса ОДМР (синяя линия на рис. 5). Данная зависимость хорошо

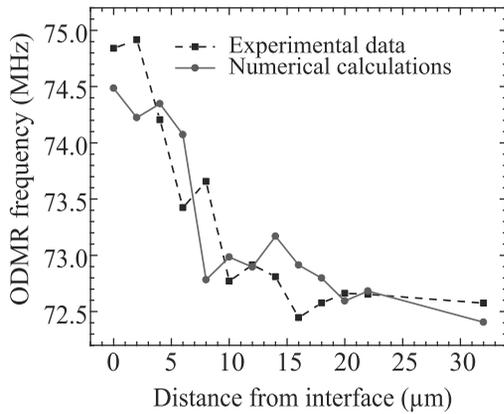


Рис. 5. (Цветной онлайн) Положение центра резонансной линии ОДМР в зависимости от расстояния до границы раздела; синей линией обозначен результат расчета с использованием деформаций

согласуется с экспериментально полученным значением резонанса ОДМР (черная пунктирная линия на рис. 5). Расчет положения ОДМР резонанса вычислено с использованием фоновых сдвигов измеренных по спектрам КРС.

Заключение. В работе оценено влияние механической деформации на спиновые свойства вакансионного центра V2 в 4H-SiC. Рассчитаны компоненты тензора спин-деформационного взаимодействия. Наблюдаемый сдвиг в ОДМР спектре вызван механическим напряжением, что показывает возможность механического контроля расщепления D между спиновыми уровнями со спином $\pm 1/2$ и $\pm 3/2$ для V2 центров в SiC. Нам удалось разработать метод оценки тонкой структуры D по спектрам КРС, что перспективно для расчета спиновых свойств в наноча-

стицах SiC. В свою очередь, такого рода оценка позволит прогнозировать магнитометрические параметры наносенсоров на основе нанокристаллов SiC [15]. В дополнении можно добавить, что используя пьезоэлектрические свойства AlN на основе гетероструктур AlN/SiC становится возможным создать пьезонастраиваемые спиновые структуры, перспективные в области квантовой коммуникации, как элементы нанопотоники.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке фонда Российского фонда фундаментальных исследований # 20-52-76010. А. Н. Анисимов благодарит Совет по грантам Президента Российской Федерации за финансовую поддержку данной работы, Стипендия # СП-2179.2021.5.

Авторы выражают благодарность А. В. Пошахиному за обсуждение результатов работ.

1. G. V. Astakhov and V. Dyakonov, *Defects in Advanced Electronic Materials and Novel Low Dimensional Structures. Defects for Quantum Information Processing in SiC*, Woodhead Publishing (2018), p. 211.
2. S. Castelletto and A. Boretti, *J. Phys.* **2**, 022001 (2020).
3. N. T. Son, C. P. Anderson, A. Bourassa, K. C. Miao, C. Babin, M. Widmann, M. Niethammer, J. Ul Hassan, N. Morioka, I. G. Ivanov, F. Kaiser, J. Wrachtrup, and D. D. Awschalom, *Appl. Phys. Lett.* **116**, 190501 (2020).
4. D. M. Lukin, M. A. Guidry, and J. Vučković, *PRX Quantum* **1**, 020102 (2020).
5. S. A. Tarasenko, A. V. Poshakinskiy, D. Simin, V. A. Soltamov, E. N. Mokhov, P. G. Baranov, V. Dyakonov, and G. V. Astakhov, *Phys. Status Solidi B* **255**, 1700258 (2018).
6. P. G. Baranov, A. P. Bundakova, A. A. Soltamova, S. B. Orlinskii, I. V. Borovykh, R. Zondervan, R. Verberk, and J. Schmidt, *Phys. Rev. B* **83**, 125203 (2011).
7. P. G. Baranov, H. J. von Bardeleben, F. Jelezko, and J. Wrachtrup, *Magnetic Resonance of Semiconductors and their Nanostructures*, Springer Vienna, Vienna (2017).
8. V. A. Soltamov, A. A. Soltamova, P. G. Baranov, and I. I. Proskuryakov, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 226402 (2012).
9. D. Riedel, F. Fuchs, H. Kraus, S. Văth, A. Sperlich, V. Dyakonov, A. Soltamova, P. Baranov, V. Ilyin, and G. V. Astakhov, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 226402 (2012).
10. A. L. Falk, B. B. Buckley, G. Calusine, W. F. Koehl, V. V. Dobrovitski, A. Politi, C. A. Zorman, P. X. L. Feng, and D. D. Awschalom, *Nat. Commun.* **4**, 1819 (2013).

11. D. Simin, V.A. Soltamov, A.V. Poshakinskiy, A.N. Anisimov, R.A. Babunts, D.O. Tolmachev, E.N. Mokhov, M. Trupke, S.A. Tarasenko, A. Sperlich, P.G. Baranov, V. Dyakonov, and G.V. Astakhov, *Phys. Rev. X* **6**, 031014 (2016).
12. А. Н. Анисимов, Р. А. Бабунц, И. Д. Бреев, В. А. Солтамов, Е. Н. Мохов, П. Г. Баранов, *Письма в ЖЭТФ* **112**(12), 813 (2020).
13. H. Kraus, V.A. Soltamov, D. Riedel, S. Văth, F. Fuchs, A. Sperlich, P.G. Baranov, V. Dyakonov, and G.V. Astakhov, *Nat. Phys.* **10**, 157 (2014).
14. H. Kraus, V.A. Soltamov, F. Fuchs, D. Simin, A. Sperlich, P.G. Baranov, G.V. Astakhov, and V. Dyakonov, *Sci. Rep.* **4**, 5303 (2015).
15. A.N. Anisimov, V.A. Soltamov, I.D. Breev, M.M. Khalisov, R.A. Babunts, A.V. Ankudinov, and P.G. Baranov, *JETP Lett.* **108**, 610 (2018).
16. V.A. Soltamov, C. Kasper, A.V. Poshakinskiy, A.N. Anisimov, E.N. Mokhov, A. Sperlich, S.A. Tarasenko, P.G. Baranov, G.V. Astakhov, and V. Dyakonov, *Nat. Commun.* **10**, 1678 (2019).
17. A.N. Anisimov, D. Simin, V.A. Soltamov, S.P. Lebedev, P.G. Baranov, G.V. Astakhov, and V. Dyakonov, *Sci. Rep.* **6**, 33301 (2016).
18. M. Widmann, S.-Y. Lee, T. Rendler et al. (Collaboration), *Nat. Mater.* **14**, 164 (2015).
19. F. Fuchs, B. Stender, M. Trupke, D. Simin, J. Pflaum, V. Dyakonov, and G.V. Astakhov, *Nat. Commun.* **6**, 7578 (2015).
20. R. Nagy, M. Widmann, M. Niethammer, D.B.R. Dasari, I. Gerhardt, Ö.O. Soykal, M. Radulaski, T. Ohshima, J. Vučković, N.T. Son, I.G. Ivanov, S.E. Economou, C. Bonato, S.-Y. Lee, and J. Wrachtrup, *Phys. Rev. Appl.* **9**, 034022 (2018).
21. R. Nagy, M. Niethammer, M. Widmann, Y.-C. Chen et al. (Collaboration), *Nat. Commun.* **10**, 1954 (2019).
22. N. Morioka, C. Babin, R. Nagy et al. (Collaboration), *Nat. Commun.* **11**, 2516 (2020).
23. D.M. Lukin, C. Dory, M.A. Guidry, K.Y. Yang, S.D. Mishra, R. Trivedi, M. Radulaski, S. Sun, D. Vercrucy, G.H. Ahn, and J. Vučković, *Nature Photon.* **14**, 330 (2020).
24. A.L. Falk, P.V. Klimov, B.B. Buckley, V. Ivády, I. A. Abrikosov, G. Calusine, W.F. Koehl, A. Gali, and D.D. Awschalom, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 187601 (2014).
25. M. Rühl, L. Bergmann, M. Krieger, and H.B. Weber, *Nano Lett.* **20**, 658 (2020).
26. D.M. Lukin, A.D. White, R. Trivedi et al. (Collaboration), *npj Quantum Inf.* **6**, 80 (2020).
27. S.J. Whiteley, G. Wolfowicz, C.P. Anderson, A. Bourassa, H. Ma, M. Ye, G. Koolstra, K.J. Satzinger, M.V. Holt, F.J. Heremans, A.N. Cleland, D.I. Schuster, G. Galli, and D.D. Awschalom, *Nature Phys.* **15**, 490 (2019).
28. A. Hernández-Mínguez, A.V. Poshakinskiy, M. Hollenbach, P.V. Santos, and G.V. Astakhov, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 107702 (2020).
29. I.D. Breev, K.V. Likhachev, V.V. Yakovleva, R. Hübner, G.V. Astakhov, P.G. Baranov, E.N. Mokhov, and A.N. Anisimov, *J. Appl. Phys.* **129**, 055304 (2021).
30. E.N. Mokhov and A.A. Wolfson, *Growth of AlN and GaN crystals by sublimation*, in *Single Crystals of Electronic Materials: Growth and Properties*, ed. by R. Fornary, Woodhead Publishing, Elsevier, Amsterdam (2018).
31. C. Kasper, D. Klenkert, Z. Shang, D. Simin, A. Gottscholl, A. Sperlich, H. Kraus, C. Schneider, S. Zhou, M. Trupke, W. Kada, T. Ohshima, V. Dyakonov, and G.V. Astakhov, *Phys. Rev. Appl.* **13**, 044054 (2020).
32. N. Sugiyama, M. Yamada, Y. Urakami, M. Kobayashi, T. Masuda, K. Nishikawa, F. Hirose, and S. Onda, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **1693**, 107 (2014).
33. D.W. Feldman, J.H. Parker, J.W.J. Choyke, and L. Patrick, *Phys. Rev.* **170**, 698 (1968).
34. R. Sugie and T. Uchida, *J. Appl. Phys.* **122**, 195703 (2017).
35. K. Kamitani, M. Grimsditch, J.C. Nipko, C.-K. Loong, M. Okada, and I. Kimura, *J. Appl. Phys.* **82**, 3152 (1997).
36. A.V. Poshakinskiy and G.V. Astakhov, *Phys. Rev. B* **100**, 094104 (2019).
37. P. Udvarhelyi and A. Gali, *Phys. Rev. Appl.* **10**, 054010 (2018).
38. S.B. Orlinski, J. Schmidt, E.N. Mokhov, and P.G. Baranov, *Phys. Rev. B* **67**, 125207 (2003).

Наблюдение индуцированных микроволновым излучением осцилляций магнетосопротивления в $\text{ZnO}/\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ гетеропереходе бесконтактной методикой

А. Р. Хисамеева¹⁾, А. В. Щепетильников⁺, Ю. А. Нефедов⁺, И. В. Кукушкин⁺

⁺ Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черногловка, Россия

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

Поступила в редакцию 17 июля 2021 г.

После переработки 6 августа 2021 г.

Принята к публикации 6 августа 2021 г.

В высококачественных гетеропереходах $\text{ZnO}/\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ были исследованы индуцированные микроволновым излучением осцилляции магнетосопротивления посредством бесконтактной методики. Основной принцип детектирования заключался в измерении сигнала пропускания в радиочастотном диапазоне ($f \sim 50$ МГц) между двумя Т-образными антеннами, емкостно связанными с двумерной электронной системой. При воздействии на образец возбуждающим микроволновым излучением $F = 60 - 140$ ГГц в малых магнитных полях в высокочастотной проводимости хорошо разрешались не менее 3-х осцилляций. Амплитуда первой осцилляции была сопоставима по амплитуде с осцилляциями Шубникова–де Гааза в больших магнитных полях. Существенным преимуществом данного метода является отсутствие Омических контактов или нанесенной металлизации на поверхность образца, что дает дополнительную информацию для понимания природы происхождения данного явления.

DOI: 10.31857/S1234567821170079

В двумерных электронных системах с достаточно высокой подвижностью под воздействием микроволнового излучения в слабых магнитных полях было открыто явление гигантских осцилляций продольного магнетосопротивления (*Microwave-induced resistance oscillations* – MIRO) [1–3]. Несмотря на то, что данное явление неравновесного переноса активно исследуется более двадцати лет [4], физическая интерпретация его происхождения все еще является предметом широкой дискуссии. В литературе описываются два механизма возникновения осцилляций магнетосопротивления, которые связаны с объемной природой явления. Первый подход связывает данные осцилляции с непрямыми переходами между уровнями Ландау, сопровождающиеся рассеянием на примеси [5–7]. Второй метод описания основывается на использовании неравновесной функции распределения для двумерных электронов, возникающей под действием микроволнового излучения [8–10]. Однако данные подходы не позволяют объяснить ряд экспериментальных результатов, таких как невосприимчивость амплитуды осцилляций к круговой поляризации микроволнового излучения [11], поведение осцилляций в наклонном поле [12–14], пе-

ренормировку задающей период осцилляций эффективной массы вследствие электрон-электронного взаимодействия [15, 16], а также наблюдаемые температурные [17] и концентрационные [18] зависимости. Эти противоречия привели к возникновению альтернативных теорий, которые связывают причины возникновения MIRO с влиянием краевых и приконтактных областей [19, 20]. Вследствие этого, экспериментальное исследование вклада данных областей или его отсутствия на индуцированные микроволновым излучением осцилляции магнетосопротивления представляет огромный интерес.

Долгое время осцилляции магнетосопротивления, обусловленные воздействием микроволнового излучения, наблюдались исключительно в гетероструктурах GaAs/AlGaAs n -типа, однако позднее, универсальность явления была подтверждена экспериментами в дырочных системах на основе напряженных квантовых ям Ge/SiGe [21], гетеропереходах ZnO/MgZnO [22, 23] и в невырожденной двумерной электронной системе, сформированной на поверхности жидкого гелия [24]. К числу основных подходов по исследованию индуцированных СВЧ-излучением осцилляций магнетосопротивления можно отнести измерение магнетотранспорта при постоянном токе. Как правило, такой подход предусматривает нали-

¹⁾e-mail: akhismeeva@issp.ac.ru

чие Омических контактов к двумерной электронной системе, при этом контактная геометрия может быть различной: холловский мостик [2], диск Корбино [25] или геометрия ван-дер-Пау [26]. Позднее была продемонстрирована возможность наблюдения осцилляций бесконтактными методиками [27, 28]. Данные эксперименты убедительно показали несущественность Омических контактов, однако, при этом на образцах всегда была нанесена металлизация, которая также могла приводить к появлению MIRO.

Настоящая работа посвящена исследованию индуцированных микроволновым излучением осцилляций высокочастотной проводимости в гетеропереходе ZnO/MgZnO. Данная двумерная система существенно отличается от стандартных гетероструктур GaAs/AlGaAs и представляет большой интерес вследствие большой величины эффективной массы двумерных электронов ($m = 0.33m_0$) [22, 29]. Такая величина эффективной массы приводит к доминированию кулоновской энергии по отношению к фермиевской и позволяет исследовать новые явления, обусловленные сильным электрон-электронным взаимодействием [30, 31]. В частности, это может оказывать влияние на период осцилляций магнетосопротивления [16, 32, 33]. В качестве измерительного метода использовалась бесконтактная методика, которая основывалась на анализе сигнала пропускания между двумя Т-образными антеннами, емкостно связанными с двумерной электронной системой [34, 35]. Данный подход позволяет исключить влияние приконтактных областей на MIRO, и уже был успешно апробирован на стандартных гетероструктурах GaAs/AlGaAs [36]. Принципиальной важностью исследований, представленных в настоящей работе, является проверка универсальности обнаруженных ранее свойств MIRO на совершенно другой материальной системе, сильно отличающейся по ключевым свойствам. К примеру, амплитуда MIRO в ДЭС на поверхности жидкого гелия оказывается чувствительна к знаку циркулярной поляризации микроволнового излучения [37], что противоположно результатам, полученным в ДЭС на полупроводниковых гетероструктурах [11].

Исследования проводились на высококачественных гетеропереходах ZnO/MgZnO, выращенных посредством молекулярно-лучевой эпитаксии. Низкотемпературная плотность двумерных электронов и подвижность составляли $n = 9.6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и $\mu = 3 \times 10^4 \text{ см}^2/\text{Вс}$ при $T = 1.5 \text{ К}$. Два различных источника микроволнового излучения использовались в данной экспериментальной методике. Возбуждающее излучение доставлялось от генератора микро-

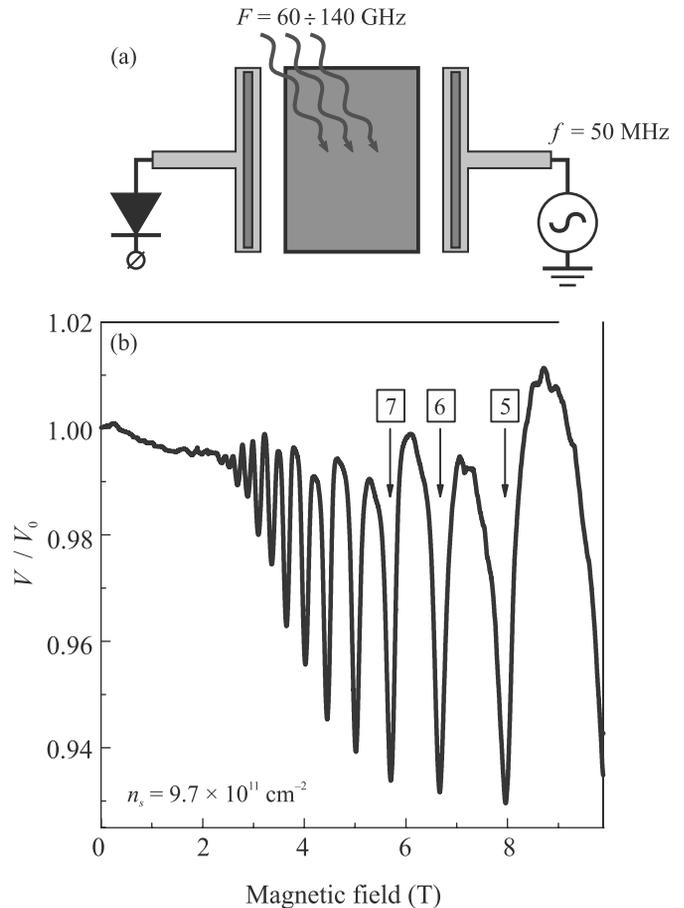


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Схематическое изображение экспериментальной установки. (б) – Зависимость величины постоянного напряжения V на выходе детектора от магнитного поля B , нормированная на значение в нулевом магнитном поле V_0 . Частота зондирующего излучения составляла $f = 50 \text{ МГц}$. Концентрация двумерных электронов соответствовала $n = 9.6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ($T = 1.5 \text{ К}$). На рисунке отмечено положение нескольких минимумов осцилляций Шубникова–де Гааза для факторов заполнения $\nu = 5, 6, 7$

волнового излучения с сопряженными блоками умножения частоты ($F = 60 - 140 \text{ ГГц}$) к образцу посредством сверхразмерного волновода. Также в измерениях использовался генератор на базе лавинно-пролетного диода (ЛПД) с фиксированной частотой 140 ГГц и выходной мощностью не более 40 мВт . Зондирующее излучение от второго генератора ($f \sim 50 \text{ МГц}$) передавалось по коаксиальным линиям к образцу. Сам образец имел прямоугольную форму $3.5 \times 5 \text{ мм}$ и крепился на специальном держателе на расстоянии 0.5 мм от жестко зафиксированных планарных Т-образных антенн, которые соединялись с коаксиальными линиями посредством сформирован-

ных на поверхности держателя копланарных волноводов (см. рис. 1а). Одна из антенн через коаксиальную линию подводилась к генератору зондирующего излучения и использовалась как излучатель в радиочастотном диапазоне. Вторая Т-образная антенна была соединена с детектором, представляющим собой диод Шоттки, для измерения сигнала пропускания. В соответствии с оптимальной чувствительностью детектора в данном частотном диапазоне была выбрана частота зондирующего излучения $f = 50$ МГц. Образец погружался в полтораградусную камеру криостата, откачка паров ^4He позволяла достигать температуры $T = 1.5$ К. Магнитное поле было направлено перпендикулярно поверхности образца, измерения проводились в диапазоне до 10 Т.

На рисунке 1b продемонстрирована зависимость величины постоянного напряжения V на выходе детектора от магнитного при частоте зондирующего излучения $f = 50$ МГц. Выходное напряжение нормировалось на значение в нулевом магнитном поле V_0 . Видно, что осцилляции Шубникова–де Гааза хорошо разрешаются в области сильных магнитных полей, а положения минимумов соответствуют электронной концентрации двумерных электронов, полученной из независимых транспортных измерений. Это указывает на то, что зондирующее излучение частично поглощается двумерным каналом, а величина этого поглощения связана с проводимостью структуры. Полученный результат наглядно демонстрирует возможность экспериментального исследования проводимости двумерного канала [34, 35], без необходимости формирования Омического контакта к нему. Измерения проводились методикой двойного синхронного детектирования для улучшения соотношения сигнал/шум. И возбуждающее, и зондирующее излучения модулировались по амплитуде на частотах 30 Гц и 1.5 кГц соответственно. Первый синхронный детектор был настроен на частоту модуляции зондирующего излучения и считывал значение выходного напряжения V . Второй детектор, синхронизированный с частотой модуляции возбуждающего излучения, получал сигнал с выхода первого, и тем самым измерял изменение напряжения δV , обусловленное воздействием микроволнового излучения.

Типичные магнитополевые зависимости изменения выходного напряжения δV , нормированные на величину в нулевом магнитном поле V_0 , показаны на рис. 2 для серии возбуждающих частот микроволнового излучения от $F = 64, 74$ и 84 ГГц. На графике видны хорошо разрешенные осцилляции δV , индуцированные микроволновым излучением, ампли-

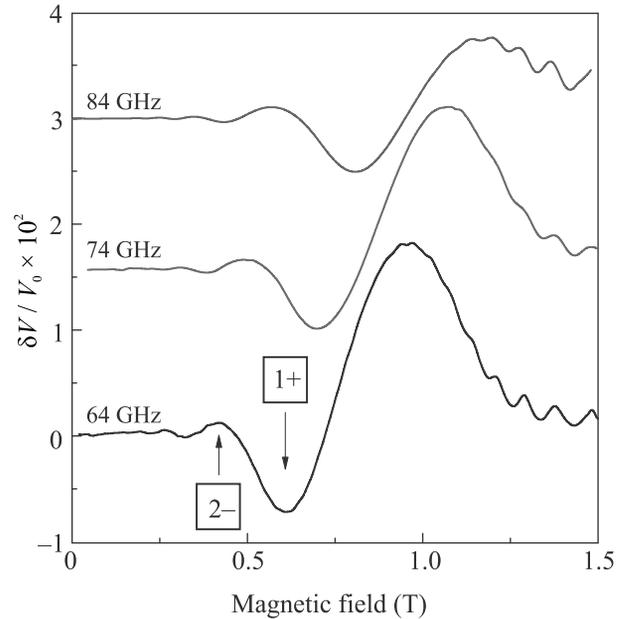


Рис. 2. (Цветной онлайн) Типичные кривые зависимости изменения выходного напряжения δV , вызванное возбуждающим микроволновым излучением с $F = 64, 74$ и 84 ГГц, от магнитного поля B . Изменение напряжения δV нормировано на величину напряжения в нулевом магнитном поле V_0 . Обозначены положения первых экстремумов осцилляций. Температура образца составляла $T = 1.5$ К

туда которых сравнима по величине с осцилляциями Шубникова–де Гааза в выходном напряжении V . Данные осцилляции наблюдались во всем диапазоне частот возбуждающего микроволнового излучения.

Была построена зависимость положения экстремумов по магнитному полю от частоты возбуждающего излучения F (рис. 3). Максимум первой осцилляции (1–) не включался в анализ вследствие того, что из-за наложения на осцилляции Шубникова–де Гааза сильно искажается его положение и форма. На рисунке отмечены: синими квадратами – положение первого минимума (1+), кружками и треугольниками – экстремумы второй и третьей осцилляции, соответственно. Из-за снижения выходной мощности генератора с сопряженным блоком умножения для частот выше 100 ГГц, количество хорошо разрешенных осцилляций уменьшалось в данном диапазоне. Однако использование генератора ЛПД позволило получить данные для трех экстремумов на частоте 140 ГГц. Покажем, что наблюдаемые осцилляции δV напрямую связаны с осцилляциями магнетосопротивления, индуцированные микроволновым излучением. Полученные ранее результаты исследова-

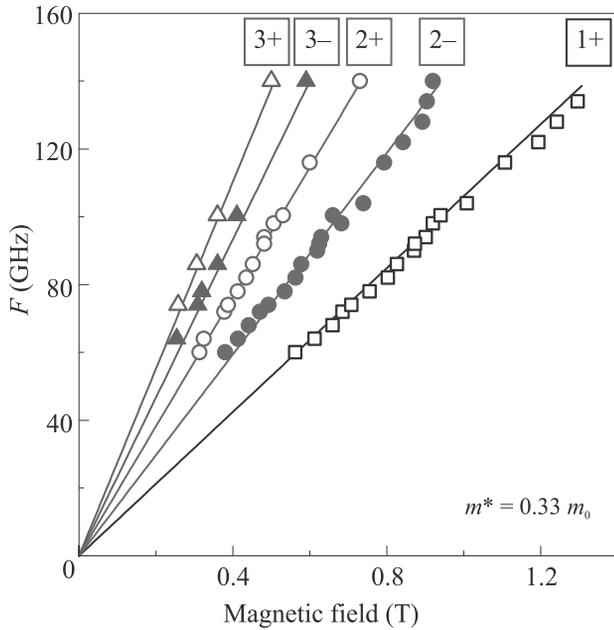


Рис. 3. (Цветной онлайн) Магнитодисперсия положений минимумов и максимумов осцилляций индуцированных микроволновым излучением от частоты возбуждающего излучения F . Номер соответствующей осцилляции указан рядом с соответствующим набором данных. Линии представляют теоретические подгонки: $F = (n - 1/4)eB/2\pi m^*$ – для положения n -го максимума; и $F = (n + 1/4)eB/2\pi m^*$ – для n -го минимума. Подгонка проводилась с одним свободным параметром – значением эффективной массой электрона $m^* = 0.33m_0$

ний MIRO на постоянном токе продемонстрировали, что [4]:

$$\rho_{xx} \sim \sin(2\pi\epsilon), \tag{1}$$

где ρ_{xx} – индуцированный высокочастотным полем вклад в сопротивление образца, ϵ определяется через отношение возбуждающей частоты к циклотронной $\epsilon \equiv \omega/\omega_c$, а положения максимумов и минимумов сопротивления соответствуют $\epsilon^- = n - \phi$ и $\epsilon^+ = n + \phi$ (где n – положительное целое число). Величина сдвига ϕ может зависеть от номера осцилляции, но для гармоник MIRO с номерами $\epsilon \geq 2$ в эксперименте обычно наблюдается $\phi = 1/4$ [38–40]. Тогда положения n -го максимума и минимума можно выразить как:

$$F = (n \mp 1/4)eB/2\pi m^*, \tag{2}$$

где знак минус соответствует максимумам $\epsilon^- = n - 1/4$, а знак плюс – минимумам $\epsilon^+ = n + 1/4$, m^* – эффективная масса электрона, e – заряд электрона, B – величина магнитного поля. На рисунке 3 прямыми линиями показана подгонка экспериментальных данных согласно формуле (2). Стоит отметить хоро-

шую согласованность результатов с учетом использования только одного подгоночного параметра – величины эффективной массы $m^* = 0.33m_0$, которая совпадала со значением, полученным независимо из транспортных измерений [16]. Данный факт указывает на то, что наблюдаемые осцилляции в сигнале пропускания между двумя Т-образными антеннами напрямую связаны с индуцированными микроволновым излучением осцилляциями магнетосопротивления.

В заключение, в рамках данной работы были исследованы индуцированные микроволновым излучением осцилляции магнетосопротивления в высококачественных гетеропереходах $ZnO/Mg_xZn_{1-x}O$ посредством бесконтактной методики. В эксперименте исследовался сигнал пропускания между двумя Т-образными антеннами, емкостно связанными с двумерной электронной системой. При частоте зондирующего излучения 50 МГц и падающем возбуждающем излучении $F = 60 - 140$ ГГц в изменении выходного сигнала δV хорошо разрешались не менее 3-х осцилляций. Было продемонстрировано, что наблюдаемые осцилляции в сигнале пропускания напрямую связаны с MIRO. Важным результатом стала проверка применимости экспериментального метода к другим полупроводниковым структурам, отличным от гетероструктур GaAs/AlGaAs. Отсутствие Омических контактов или нанесенной металлизации на поверхность образца является существенным преимуществом данного подхода и позволяет исключить влияние приконтактных областей, что дает дополнительную информацию для понимания природы происхождения MIRO.

Работа была выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант # 19-72-30003).

Авторы благодарны Дж. Фалсон (J. Falson) за предоставленные для исследования гетероструктуры.

1. M. A. Zudov, R. R. Du, J. A. Simmons, and J. L. Reno, arXiv:cond-mat/9711149v1 (1997).
2. M. A. Zudov, R. R. Du, J. A. Simmons, and J. L. Reno, Phys. Rev. B **64**, 201311(R) (2001).
3. P. D. Ye, L. W. Engel, D. C. Tsui, J. A. Simmons, J. R. Wendt, G. A. Vawter, and J. L. Reno, Appl. Phys. Lett. **79**, 2193 (2001).
4. I. A. Dmitriev, A. D. Mirlin, D. G. Polyakov, and M. A. Zudov, Rev. Mod. Phys. **84**, 709 (2012).
5. V. Ryzhii, Phys. Rev. B **68**, 193402 (2003).
6. A. C. Durst, S. Sachdev, N. Read, and S. M. Girvin, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures **20**, 117 (2003).

7. M. G. Vavilov and I. L. Aleiner, *Phys. Rev. B* **69**, 035303 (2004).
8. I. A. Dmitriev, M. G. Vavilov, I. L. Aleiner, A. D. Mirlin, and D. G. Polyakov, *Phys. Rev. B* **71**, 115316 (2005).
9. S. I. Dorozhkin, *Письма в ЖЭТФ* **77**, 681 (2003).
10. I. A. Dmitriev, S. I. Dorozhkin, and A. D. Mirlin, *Phys. Rev. B* **80**, 125418 (2009).
11. J. H. Smet, B. Gorshunov, C. Jiang, L. Pfeiffer, K. West, V. Umansky, M. Dressel, R. Meisels, F. Kuchar, and K. von Klitzing, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 116804 (2005).
12. R. G. Mani, *Phys. Rev. B* **72**, 075327 (2005).
13. C. L. Yang, R. R. Du, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. B* **74**, 045315 (2006).
14. A. Bogan, A. T. Hatke, S. A. Studenikin, A. Sachrajda, M. A. Zudov, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. B* **86**, 235305 (2012).
15. A. T. Hatke, M. A. Zudov, J. D. Watson, M. J. Manfra, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. B* **87**, 161307(R) (2013).
16. A. V. Shchepetilnikov, Yu. A. Nefyodov, A. A. Dremin, and I. V. Kukushkin, *JETP Lett.* **107**, 770 (2018).
17. Q. Shi, S. A. Studenikin, M. A. Zudov, K. W. Baldwin, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. B* **93**, 121305(R) (2016).
18. X. Fu, M. D. Borisov, M. A. Zudov, Q. Qian, J. D. Watson, and M. J. Manfra, *Phys. Rev. B* **98**, 121303(R) (2018).
19. S. A. Mikhailov, *Phys. Rev. B* **70**, 165311 (2004).
20. A. D. Chepelianskii and D. L. Shepelyansky, *Phys. Rev. B* **80**, 241308(R) (2009).
21. M. A. Zudov, O. A. Mironov, Q. A. Ebner, P. D. Martin, Q. Shi, and D. R. Leadley, *Phys. Rev. B* **89**, 125401 (2014).
22. A. V. Shchepetilnikov, Yu. A. Nefyodov, and I. V. Kukushkin, *JETP Lett.* **102**, 811 (2015).
23. D. F. Karcher, A. V. Shchepetilnikov, Yu. A. Nefyodov, J. Falson, I. A. Dmitriev, Y. Kozuka, D. Maryenko, A. Tsukazaki, S. I. Dorozhkin, I. V. Kukushkin, M. Kawasaki, and J. H. Smet, *Phys. Rev. B* **93**, 041410(R) (2016).
24. R. Yamashiro, L. V. Abdurakhimov, A. O. Badrutdinov, Yu. P. Monarkha, and D. Konstantinov, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 256802 (2015).
25. C. L. Yang, M. A. Zudov, T. A. Knuuttila, R. R. Du, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 096803 (2003).
26. M. A. Zudov, R. R. Du, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 046807 (2003).
27. A. A. Bykov, I. V. Marchishin, A. V. Goran, and D. V. Dmitriev, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 082107 (2010).
28. I. V. Andreev, V. M. Muravev, I. V. Kukushkin, S. Schmult, and W. Dietsche, *Phys. Rev. B* **83**, 121308(R) (2011).
29. V. E. Kozlov, A. B. Van'kov, S. I. Gubarev, I. V. Kukushkin, V. V. Solovyev, J. Falson, D. Maryenko, Y. Kozuka, A. Tsukazaki, M. Kawasaki, and J. H. Smet, *Phys. Rev. B* **91**, 085304 (2015).
30. V. V. Solovyev and I. V. Kukushkin, *Phys. Rev. B* **96**, 115131 (2017).
31. A. B. Van'kov, B. D. Kaysin, and I. V. Kukushkin, *Phys. Rev. B* **98**, 121412(R) (2018).
32. A. V. Shchepetilnikov, D. D. Frolov, Yu. A. Nefyodov, I. V. Kukushkin, and S. Schmult, *Phys. Rev. B* **95**, 161305(R) (2017).
33. X. Fu, Q. A. Ebner, Q. Shi, M. A. Zudov, Q. Qian, J. D. Watson, and M. J. Manfra, *Phys. Rev. B* **95**, 235415 (2017).
34. I. M. Grodnensky, D. Heitmann, K. von Klitzing, and A. Yu. Kamaev, *Phys. Rev. B* **44**, 1946(R) (1991).
35. A. M. C. Valkering, P. K. H. Sommerfeld, R. A. M. van de Ven, R. W. van der Heijden, F. A. P. Blom, M. J. Lea, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5398 (1998).
36. A. V. Shchepetilnikov, A. R. Khisameeva, Yu. A. Nefyodov, S. Schmult, and I. V. Kukushkin, *Phys. Rev. B* **102**, 075445 (2020).
37. A. A. Zadorozhko, Y. P. Monarkha, and D. Konstantinov, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 046802 (2018).
38. M. A. Zudov, *Phys. Rev. B* **69**, 041304(R) (2004).
39. R. G. Mani, J. H. Smet, K. von Klitzing, V. Narayanamurti, W. B. Johnson, and V. Umansky, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 146801 (2004).
40. A. T. Hatke, M. A. Zudov, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. B* **84**, 241304(R) (2011).

О причинах формирования и стабильности однокомпонентных микрокристаллов электролитического происхождения с фуллереноподобным габитусом усеченного икосаэдра

И. С. Ясников¹⁾, Н. Н. Грызунова

Тольяттинский государственный университет, 445020 Тольятти, Россия

Поступила в редакцию 29 июля 2021 г.

После переработки 7 августа 2021 г.

Принята к публикации 8 августа 2021 г.

В работе представлено обоснование наблюдаемого в экспериментах по электроосаждению меди формирования микрокристаллов с фуллереноподобным габитусом усеченного икосаэдра. Проводится анализ с точки зрения поведения полной энергии при эволюции габитуса усеченного икосаэдра в правильный, указывается на существенную роль поверхностной энергии в этой эволюции, и приводятся аргументы в пользу стабильности хоть и редкого, но все же выявленного в экспериментах фуллереноподобного габитуса однокомпонентных малых частиц и микрокристаллов.

DOI: 10.31857/S1234567821170080

Методика создания новых материалов опирается на парадигму, которая состоит в том, что свойства материала определяются в первую очередь его структурой. Изменение структуры материала наиболее ярко демонстрируется размерным эффектом при переходе от наноразмерных кластеров через малые частицы и микрокристаллы к массивным материалам [1, 2]. Многообразие габитуса малых частиц и микрокристаллов как внешнее проявление различных структурных состояний нашло свое отражение в современных исчерпывающих обзорах [3–6]. При этом частицы, имеющие декаэдрическую D_{5h} или икосаэдрическую I_h группу симметрии, занимают отдельную нишу, поскольку являются носителями множественных двойниковых границ и дефектов дисклинационного типа [7, 8], которые приводят к пентагональной симметрии на размерах частицы. Данные объекты весьма интересны научному сообществу в силу своей экзотической структуры и перспектив многочисленных практических приложений.

В настоящее время исследователи предпринимают многочисленные попытки управлять свойствами малых частиц и микрокристаллов посредством влияния на экспериментальные условия их получения. Причем чем проще и нагляднее будет это влияние, которое, заодно, должно обладать и повторяемостью, тем изящнее будет концепция и методология их получения. Малые металлические частицы, в том числе множественно сдвойникованные и содер-

жащие дефекты дисклинационного типа, можно получать различными способами, в частности, методом нуклеации из газовой фазы с использованием различных методов физического и химического осаждения паров на подложку. Далеко не последнее место в методике их получения занимает электрокристаллизация из раствора соответствующего электролита в силу достаточно простой технологии и практически неограниченными возможностями варьирования управляющих параметров. Так, например, изменение химического состава электролита в рамках сохранения вида осаждаемого металла может приводить к существенным изменениям структуры получаемых объектов [9–11].

Наличие дефектов дисклинационного типа в малых частицах и микрокристаллах в процессе их роста при получении вышеперечисленными экспериментальными методами приводит к релаксации полей упругих напряжений, связанных с этими дефектами, и порождает формоизменение их габитуса. Данные экспериментальные факты и их теоретическое обоснование подробно изложены, в частности, в работах и обзорах [12–15]. Кроме того, релаксация полей упругих напряжений при модификации поверхности малых частиц и микрокристаллов путем химического травления или отжига в газовой среде может приводить к формированию экзотических микрообъектов с перспективой практических приложений [16, 17].

Однако, существует ряд модификаций габитуса, который связан не с релаксацией полей упру-

¹⁾e-mail: yasnikov@phystech.edu

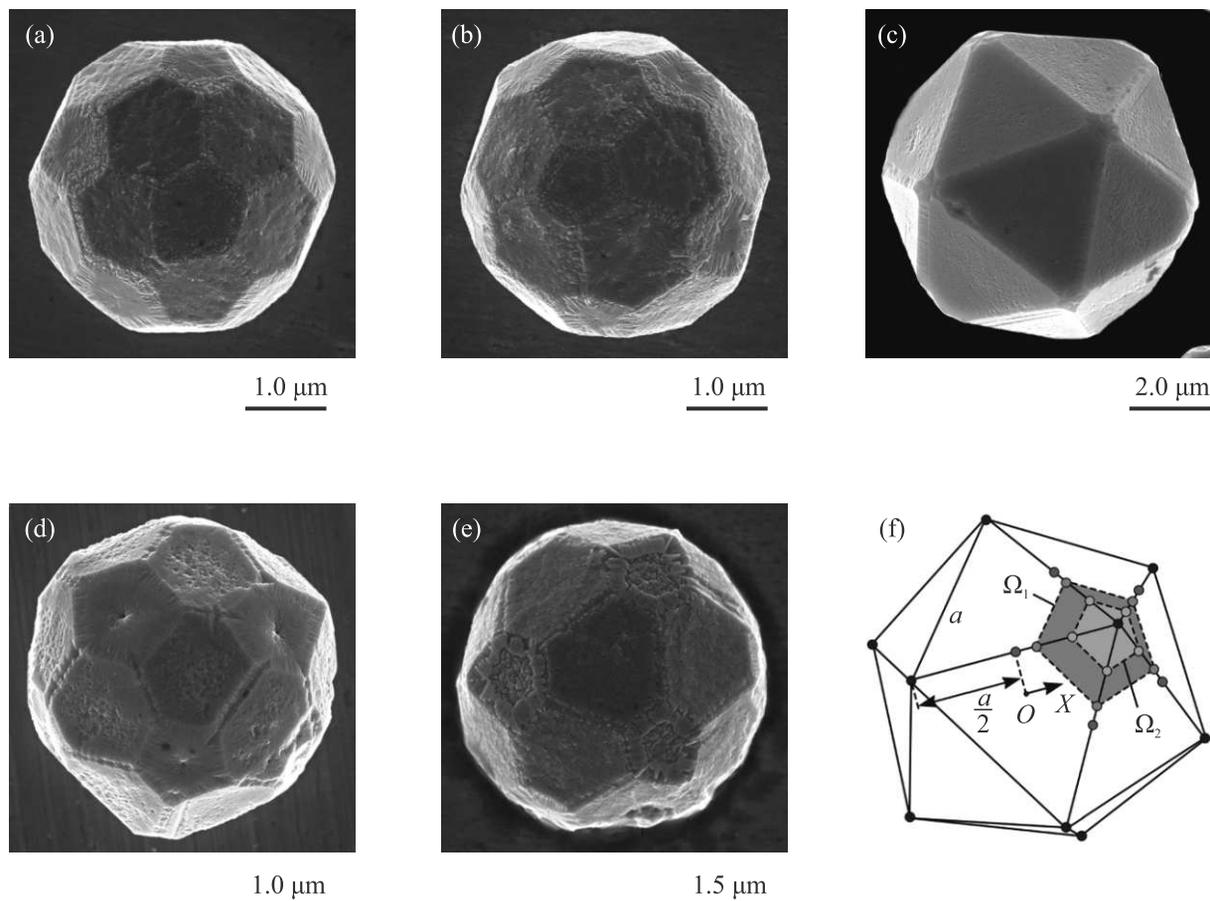


Рис. 1. (Цветной онлайн) Электронно-микроскопические изображения микрокристаллов меди в виде усеченного (a), (b), (d), (e) и правильного (c) икосаэдра, а также схема фасетирования усеченного икосаэдра (f)

гих напряжений дефекта дисклинационного типа, а с возможным уменьшением энергии малых частиц и микрокристаллов в процессе их эволюции, при котором существенную роль играет поверхностная энергия. Такие модификации происходят, как правило, на начальных этапах роста малых частиц и микрокристаллов. Так как они являются промежуточными по отношению к более устойчивым и широко распространенным видам габитуса [3–6, 18–23], то их визуализация является экспериментальной редкостью.

В частности, для исследования эволюции малых частиц и микрокристаллов меди использовали раствор, приготовленный на дистиллированной воде и содержащий 250 г/л $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ и 90 г/л H_2SO_4 . Электроосаждение меди проводилось в потенциостатическом режиме и при этом водородный показатель электролита рН составлял 1.3...1.4, температура электролита составляла 20...25 °С, перенапряжение на катоде составляло 85 ± 5 мВ, а время электроосаждения варьировалось в широком диапазоне от

нескольких секунд до 20 мин. Анод был изготовлен из электролитически чистой меди (99.99%), а в качестве катода и одновременно подложки применялась полированная нержавеющая сталь марки 12Х18Н10 или микросетка из нержавеющей стали той же марки. Подложка или микросетка предварительно обрабатывалась в изопропиловом спирте в ультразвуковой ванне, затем промывалась в дистиллированной воде и высушивалась. Исследование морфологии поверхности проводили с использованием сканирующей электронной микроскопии.

В процессе исследования с помощью сканирующего электронного микроскопа морфологии малых частиц и микрокристаллов меди на различных этапах их эволюции были получены изображения экзотических микрокристаллов с фуллереноподобным габитусом усеченного икосаэдра (рис. 1a, b). В работах [24, 25] детально обсуждалось их строение, свойства, особенности структуры, а также отмечалось, что данная экзотическая морфология является промежуточной структурой на пути эволюции малой

сферической частицы при ее огранке до состояния правильного икосаэдра (рис. 1с).

Тем не менее, варьирование технологических параметров электроосаждения никогда ранее не приводило к получению микрокристаллов с габитусом усеченного икосаэдра. Более того, такой тип габитуса для однокомпонентных (состоящих из атомов одного элемента) малых частиц и микрокристаллов не упоминается в качестве экспериментального результата в обзорах [3–6], которые наиболее полно отражают текущее состояние многообразия представленных морфологических видов.

Отмеченный габитус усеченного икосаэдра не является экспериментальным эксклюзивом для многокомпонентных малых частиц и микрокристаллов. Так, например, в работе [26] и обзоре [4] описываются структура и свойства малой частицы субоксида бора B_6O с икосаэдрической группой симметрии I_h , которая модифицировала свой габитус до состояния входящей пятиугольной грани на вершинах икосаэдра, и при этом отмечалось, что образованные при такой модификации вершины усеченного икосаэдра в точности повторяют форму фуллерена C_{60} (именно поэтому мы, проводя соответствующую аналогию, называем полученные микрокристаллы фуллереноподобными). При этом шестиугольные грани усеченного икосаэдра субоксида бора B_6O имели индексы (111) и являлись низкоэнергетичными, а пятиугольные грани имели индексы (110) и являлись более высокоэнергетичными по отношению к граням (111). Однако, в случае формирования морфологии усеченного икосаэдра для однокомпонентной малой частицы его шестиугольные грани также будут иметь индексы (111), а вот пятиугольные грани не будут индексироваться, так как с точки зрения элементарной кристаллографии они будут иметь иррациональные индексы [7]. Поэтому таким граням невозможно приписать поверхностную энергию, соответствующую определенной кристаллографической ориентации, а можно приписать некую усредненную энергию $\bar{\gamma}$, про которую только можно сказать, что эта энергия заведомо выше энергии самой низкоэнергетичной грани, т.е. $\bar{\gamma} > \gamma_{111}$. Электронно-микроскопические изображения микрокристаллов с габитусом усеченного икосаэдра также иллюстрируют различную морфологию поверхности пятиугольных и шестиугольных граней (рис. 1d, e).

В работе [27] представлено обстоятельное исследование, посвященное вопросам стабильности различного габитуса кластеров и малых частиц некоторых металлов. В частности, для кластеров меди было указано, что при размерах менее 67.6 \AA наиболее

устойчивым габитусом является икосаэдрическая конфигурация [27]. Кроме того, на основании исследований, проведенных методом молекулярной динамики с использованием потенциала сильной связи, в работах [28, 29] было установлено, что размер металлического кластера в 200–250 атомов, по всей видимости, является пределом ниже которого невозможно сохранить исходную ГЦК-структуру. При этом доказано, что для кластеров с небольшим количеством атомов наиболее устойчивой является структура икосаэдра, обладающая минимальной поверхностной энергией.

Таким образом, при эволюции от наноразмерных кластеров через малые частицы к микрокристаллам, формирование исходного икосаэдрического габитуса происходит в диапазоне размеров менее 100 нм, и последующая эволюция икосаэдрического кластера в соответствующий микрокристалл происходит путем послыного роста треугольных граней правильного икосаэдра. Однако если в процессе трансформации габитуса наноразмерного кластера возникнет усеченный икосаэдр и его трансформация в правильный икосаэдр будет энергетически невыгодна, то дальнейший послыный рост его граней приведет к формированию микрокристалла с габитусом усеченного икосаэдра, который будет отлично визуализироваться методом сканирующей электронной микроскопии в диапазоне размеров $\sim 1 \text{ мкм}$.

Почему все-таки морфология усеченного икосаэдра для однокомпонентных малых металлических частиц является в процессе электроосаждения экспериментальным эксклюзивом? На взгляд авторов настоящей работы это связано именно с узким диапазоном технологических параметров электроосаждения, которые отвечают за выполнение энергетических условий формирования и последующей стабильности усеченного икосаэдра. Рассмотрим эти условия подробнее.

Пусть из наноразмерного кластера в результате огранки образуется усеченный икосаэдр как промежуточная структура на пути дальнейшего преобразования в правильный икосаэдр. Пусть длина ребра конечного икосаэдра равна a (рис. 1f). Тогда в состоянии усеченного икосаэдра секущие плоскости Ω_1 перпендикулярные осям, проходящим через геометрический центр и вершины икосаэдра (черные точки), проходят вблизи середин ребер (красные точки). В процессе преобразования в икосаэдр эти плоскости двигаются параллельно самим себе ($\Omega_1 \rightarrow \Omega_2$) по направлению к вершинам икосаэдра (рис. 1f).

Свяжем ось OX с ребром икосаэдра, ее начало координат с серединой ребра икосаэдра (рис. 1f) и то-

гда, в процессе преобразования усеченного икосаэдра в икосаэдр, точка пересечения секущей плоскости движется вдоль оси OX на отрезке $0 < x \leq \frac{a}{2}$. Для дальнейших расчетов мы полагаем, что общая энергия малой частицы включает в себя упругую энергию, связанную с дефектом дисклинационного типа и поверхностную энергию внешних граней и двойниковых границ.

Наши дальнейшие расчеты используют формулы объема, площади поверхности и различных сечений правильных многогранников, которые в рамках данной работы не обсуждаются и легко верифицируются с помощью справочной литературы. Мы полагаем, что шестиугольная грань усеченного икосаэдра – это грань (111) с удельной поверхностной энергией γ_{111} , а пятиугольная грань, не обладая определенными кристаллографическими индексами, имеет усредненную поверхностную энергию $\bar{\gamma}$, причем $\bar{\gamma} > \gamma_{111}$. Тогда упругая энергия E_D усеченного икосаэдра, связанная с дефектом дисклинационного типа, поверхностная энергия внешних граней E_S и двойниковых границ E_T определяются соотношениями (1), (2) и (3) соответственно:

$$E_D(x) = \frac{2G\kappa^2}{9} \frac{1+\nu}{1-\nu} \times \left[\frac{5}{12}(3 + \sqrt{5})a^3 - 12 \cdot \frac{1}{24}(5 + \sqrt{5}) \left(\frac{a}{2} - x \right)^3 \right], \quad (1)$$

$$E_S(x) = 20 \cdot \gamma_{111} \left[\frac{\sqrt{3}}{4}a^2 - 3 \cdot \frac{\sqrt{3}}{4} \cdot \left(\frac{a}{2} - x \right)^2 \right] + 12 \cdot \bar{\gamma} \cdot \left[\frac{5}{4} \sqrt{1 + \frac{2}{\sqrt{5}}} \cdot \left(\frac{a}{2} - x \right)^2 \right], \quad (2)$$

$$E_T(x) = 30 \cdot \gamma_T \times \left[\frac{a^2}{8} \sqrt{6 + 2\sqrt{5}} - 2 \cdot \frac{\sqrt{5}}{5} \left(\frac{a}{2} - x \right)^2 \right], \quad (3)$$

где $\gamma_T \sim 0.02$ Дж/м² – удельная поверхностная энергия двойниковых границ [18], $G = 42.8 \cdot 10^9$ Па – модуль сдвига и $\nu = 0.38$ – коэффициент Пуассона для меди, $\kappa = 0.12$ – мощность дисклинации Маркса–Иоффе [21].

Полная энергия малой частицы определяется зависимостью:

$$E(x) = E_D(x) + E_S(x) + E_T(x), \quad (4)$$

а ее изменение $\Delta E = E(x = a/2) - E(x = 0)$ при эволюции усеченного икосаэдра в правильный с учетом соотношений (1)–(4) имеет вид:

$$\Delta E = \left(\frac{a}{2} \right)^2 \left[\frac{G\kappa^2}{9} \cdot \frac{1+\nu}{1-\nu} \cdot (5 + \sqrt{5}) \cdot \left(\frac{a}{2} \right) - \right.$$

$$\left. - 3 \cdot \left(5 \sqrt{1 + \frac{2}{\sqrt{5}}} \cdot \bar{\gamma} - 5\sqrt{3} \cdot \gamma_{111} - 4\sqrt{5} \cdot \gamma_T \right) \right]. \quad (5)$$

Исследование функции, заданной соотношением (5), показывает, что при условии:

$$\gamma_{111} < \bar{\gamma} < \sqrt{5 - 2\sqrt{5}} \left[\sqrt{3} \cdot \gamma_{111} + \frac{4}{5} \sqrt{5} \cdot \gamma_T \right] \quad (6)$$

изменение энергии ΔE при предполагаемой трансформации усеченного икосаэдра в правильный всегда имеет положительное значение. Значит, она энергетически невыгодна и образовавшийся в процессе эволюции габитуса наноразмерного кластера усеченный икосаэдр сохранит свой габитус, и дальнейший послыйный рост его граней приведет к формированию микрокристалла в форме усеченного икосаэдра, который и наблюдается в экспериментах (рис. 1а, б).

Согласно литературным данным удельная поверхностная энергия грани (111) для меди составляет $\gamma_{111} \sim 900$ мДж/м² (рис. 1 в работе [30]), а удельная поверхностная энергия двойниковых границ $\gamma_T \sim 20$ мДж/м² [18]. Тогда малая частица в форме усеченного икосаэдра будет стабильна и ее существование будет энергетически оправдано, если сформировавшаяся пятиугольная грань усеченного икосаэдра будет иметь усредненную поверхностную энергию в диапазоне $\bar{\gamma} \sim 900 \dots 1100$ мДж/м², что, в принципе, соответствует литературным данным (табл. 4 в работе [30]) по значениям энергий граней с высокими индексами Миллера, а именно, эти значения формируют усредненную поверхностную энергию. Значит, приведенные аргументы по энергетической стабильности малой частицы с габитусом усеченного икосаэдра являются обоснованными.

Графики зависимостей ΔE при различных значениях параметра $\bar{\gamma}/\gamma_{111}$ представлено на рис. 2. Условие (6) в этом случае соответствует неравенству $\bar{\gamma}/\gamma_{111} < 1.28$ (рис. 2).

Если же $\bar{\gamma} > \sqrt{5 - 2\sqrt{5}} \left[\sqrt{3} \cdot \gamma_{111} + \frac{4}{5} \sqrt{5} \cdot \gamma_T \right] \sim 1100$ мДж/м² (что соответствует неравенству $\bar{\gamma}/\gamma_{111} > 1.28$), то изменение энергии ΔE при предполагаемой трансформации усеченного икосаэдра в правильный всегда имеет отрицательное значение на отрезке:

$$0 < a < \frac{6 \cdot \left(5 \sqrt{1 + \frac{2}{\sqrt{5}}} \cdot \bar{\gamma} - 5\sqrt{3} \cdot \gamma_{111} - 4\sqrt{5} \cdot \gamma_T \right)}{\frac{G\kappa^2}{9} \cdot \frac{1+\nu}{1-\nu} \cdot (5 + \sqrt{5})}. \quad (7)$$

Значит, такая трансформация энергетически выгодна и образовавшийся в процессе эволюции габитуса наноразмерного кластера усеченный икосаэдр модифицирует свой габитус до состояния правильного

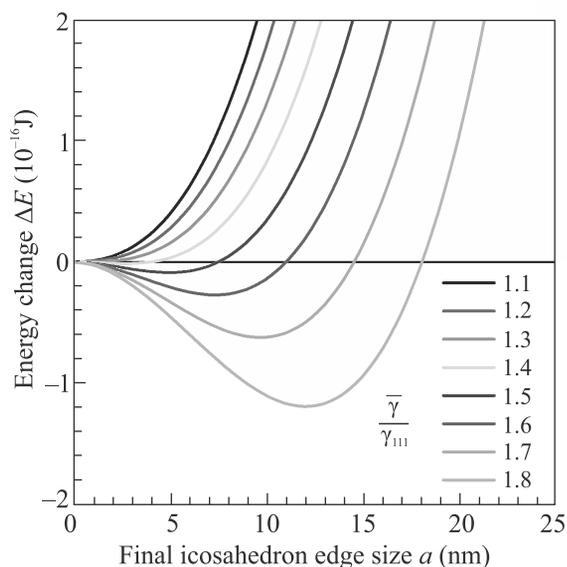


Рис. 2. (Цветной онлайн) Графики зависимостей $\Delta E(a)$ при различных значениях параметра $\bar{\gamma}/\gamma_{111}$

икосаэдра, и дальнейший послойный рост его граней приведет к формированию микрокристалла в форме правильного икосаэдра, который также наблюдается в экспериментах (рис. 1с). В частности, оценки показывают, что если сформировавшиеся пятиугольные грани усеченного икосаэдра будет иметь усредненную поверхностную энергию $\bar{\gamma} \sim 1500$ мДж/м² (что соответствует значению $\bar{\gamma}/\gamma_{111} \sim 1.7$), то соотношение (7) задает диапазон размеров кластера $R \sim 2a < 30$ нм (рис. 2), при котором энергетически выгодна трансформация усеченного икосаэдра в правильный, что согласуется с результатами работ [27–29].

Таким образом, для того, чтобы в процессе эволюции малых частиц и микрокристаллов сформировалась морфология усеченного икосаэдра, необходимо, чтобы технологические параметры электроосаждения обеспечили формирование пятиугольных граней с усредненной поверхностной энергией в диапазоне $\bar{\gamma} \sim 900 \dots 1100$ мДж/м². Поскольку верхняя граница диапазона является оценочной, то попадание технологическими параметрами электроосаждения для реализации заданного диапазона является нетривиальной задачей и является скорее экспериментальной удачей, нежели осознанным выбором. Тем не менее, экспериментальные факты и оценки, сделанные в рамках полученных результатов, демонстрируют принципиальную возможность получения однокомпонентных малых частиц и микрокристаллов с фуллереноподобным габитусом усеченного икосаэдра.

В заключении хотелось бы отметить, что несмотря на обширные знания о структуре и свойствах малых частиц и микрокристаллов, в том числе с пентагональной симметрией, вновь открывающиеся экспериментальные факты способны как корректировать, так и дополнять имеющиеся данные, которые, казалось бы, уже обладают необходимой полнотой.

1. Ю. И. Петров, *Кластеры и малые частицы*, Наука, М. (1986).
2. Э. Л. Нараев, УФН **162**(9), 49 (1992) [E. L. Nagaev, Sov. Phys.-Uspekhi **35**(9), 747 (1992)].
3. L. D. Marks, Rep. Prog. Phys. **57**(6), 603 (1994).
4. L. D. Marks and L. Peng, J. Phys. Condens. Matter **28**, 053001 (2016).
5. H. Hofmeister, Zeitschrift für Kristallographie **224**, 528 (2009).
6. Y. Xia, Y. Xiong, B. Lim, and S. E. Skrabalak, Angewandte Chemie International Edition **48**, 60 (2009).
7. V. G. Gryaznov, J. Heidenreich, A. M. Kaprelov, S. A. Nepijko, A. E. Romanov, and J. Urban, Crystal Research and Technology **34**(9), 1091 (1999).
8. A. E. Romanov and A. L. Kolesnikova, Prog. Mater. Sci. **54**(6), 740 (2009).
9. И. С. Ясников, Д. А. Денисова, Письма в ЖЭТФ **95**(5), 270 (2012) [I. S. Yasnikov and D. A. Denisova, JETP Lett. **95**(5), 246 (2012)].
10. И. С. Ясников, Д. А. Денисова, Физика твердого тела **55**(3), 585 (2013) [I. S. Yasnikov and D. A. Denisova, Phys. Solid State **55**(3), 642 (2013)].
11. I. S. Yasnikov, M. V. Dorogov, M. N. Tyurkov, A. A. Vikarchuk, and A. E. Romanov, Crystal Research and Technology **50**(4), 289 (2015).
12. V. G. Gryaznov, A. M. Kaprelov, A. E. Romanov, and I. A. Polonskii, Physica status solidi (b) **167**(2), 441 (1991).
13. И. С. Ясников, Журнал технической физики **77**(5), 133 (2007) [I. S. Yasnikov, Technical Physics **52**(5), 666 (2007)].
14. A. E. Romanov, A. L. Kolesnikova, I. S. Yasnikov, A. A. Vikarchuk, M. V. Dorogov, A. N. Priezzheva, L. M. Dorogin, and E. C. Aifantis, Reviews on Advanced Materials Science **48**(2), 170 (2017).
15. И. С. Ясников, Письма в ЖЭТФ **97**(9), 592 (2013) [I. S. Yasnikov, JETP Lett. **97**(9), 513 (2013)].
16. И. С. Ясников, А. А. Викарчук, Письма в ЖЭТФ **83**(1), 46 (2006) [I. S. Yasnikov and A. A. Vikarchuk, JETP Lett. **83**(1), 42 (2006)].
17. И. С. Ясников, А. А. Викарчук, Письма в ЖЭТФ **86**(9), 699 (2007) [I. S. Yasnikov and A. A. Vikarchuk, JETP Lett. **86**(9), 612 (2007)].
18. S. Ino, J. Phys. Soc. Jpn. **26**(6), 1559 (1969).

19. L. D. Marks, *Journal of Crystal Growth* **61**, 556 (1983).
20. L. D. Marks, *Philos. Mag. A* **49**(1), 81 (1984).
21. A. Howie and L. D. Marks, *Philos. Mag. A* **49**(1), 95 (1984).
22. S. Patala, L. D. Marks, and M. O. de la Cruz, *J. Phys. Chem. Lett.* **4**, 3089 (2013).
23. A. S. Barnard, *J. Phys. Chem. B* **110**, 24498 (2006).
24. А. А. Викарчук, Н. Н. Грызунова, Т. А. Боргардт, *Письма о материалах* **9**(1), 124 (2019).
25. А. А. Викарчук, Н. Н. Грызунова, А. Г. Денисова, М. Н. Тюрков, *Известия Российской академии наук. Сер. физическая* **84**(7), 1034 (2020) [A. A. Vikarchuk, N. N. Gryzunova, A. G. Denisova, and M. N. Tyurkov, *Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys.* **84**(7), 857 (2020)].
26. H. Hubert, B. Devouard, L. A. J. Garvie, M. O'Keeffe, P. R. Buseck, W. T. Petuskey, and P. F. McMillan, *Nature* **391**, 376 (1998).
27. S. Ogawa and S. Ino, *Journal of Crystal Growth* **13/14**, 48 (1972).
28. С. Л. Гафнер, Л. В. Редель, Ж. В. Головенько, Ю. Я. Гафнер, В. М. Самсонов, С. С. Харечкин, *Письма в ЖЭТФ* **89**(7), 425 (2009) [S. L. Gafner, L. V. Redel', Zh. V. Goloven'ko, Yu. Ya. Gafner, V. M. Samsonov, and S. S. Kharechkin, *JETP Lett.* **89**(7), 364 (2009)].
29. С. Л. Гафнер, Л. В. Редель, Ю. Я. Гафнер, *ЖЭТФ* **135**(5), 899 (2009) [S. L. Gafner, L. V. Redel', and Yu. Ya. Gafner, *JETP* **108**(5), 784 (2009)].
30. Y.-N. Wen and J.-M. Zhang, *Solid State Commun.* **144**, 163 (2007).

Реализация концепции спинового полярона в купратных сверхпроводниках на основе диаграммной техники

В. А. Мицкан, М. М. Коровушкин, Д. М. Дзедзисашвили¹⁾

Институт физики им. Л. В. Киренского, Федеральный исследовательский центр
“Красноярский научный центр Сибирского отделения РАН”, 660036 Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 4 августа 2021 г.

После переработки 9 августа 2021 г.

Принята к публикации 9 августа 2021 г.

В рамках спин-фермионной модели купратных сверхпроводников на основе метода, комбинирующего феймановскую диаграммную технику и диаграммную технику для спиновых операторов, исследованы спектральные свойства ансамбля фермиевских спин-поляронных квазичастиц. Показано, что сильная спин-зарядовая связь приводит к формированию нижней спин-поляронной зоны, отделенной значительной энергетической щелью от зоны затравочных дырок. Установлено, что спин-поляронная зона характеризуется локальным минимумом в окрестности точки $(\pi/2, \pi/2)$ зоны Бриллюэна. Определен класс диаграмм для массового оператора, имеющих принципиальное значение для описания главных особенностей спин-поляронного спектра.

DOI: 10.31857/S1234567821170092

1. Введение. Исходным положением концепции спинового полярона [1–4] является наличие сильной спин-зарядовой связи [5–9], которая реализуется в купратных сверхпроводниках благодаря сильным электронным корреляциям (СЭК) [10–13] и значительной величине гибридизации между d -состояниями ионов меди и p -состояниями ионов кислорода. В рамках отмеченной концепции спин-зарядовая связь учитывается точно, и это обстоятельство приводит к возникновению фермиевской квазичастицы — спинового полярона, движение которого жестко скоррелировано с динамикой локализованных на ближайших ионах меди спинов.

Концепция спинового полярона развивалась на основе модели решетки Кондо [1–3, 14–16], а также спин-фермионной модели (СФМ) [17–22], являющейся эффективным низкоэнергетическим вариантом трехзонной модели Эмери [23, 24]. В частности, в рамках СФМ при использовании реальных энергетических параметров удалось описать тонкие особенности электронной структуры и спектральных характеристик спин-поляронных квазичастиц [18, 19]. Основным инструментом в отмеченных исследованиях являлась проекционная техника Цванцига–Мори [25–27], которая в сочетании с формализмом двухвременных запаздывающих функций Грина дает возможность рассчитывать термодинамические средние, необходимые для описания как

нормальных, так и сверхпроводящих свойств ансамбля спин-поляронных квазичастиц [20, 22, 28]. Особенность использования этой техники в рамках спин-поляронного подхода заключается в получении замкнутой системы уравнений для функций Грина, которые строятся на расширенном наборе базисных операторов, корректно учитывающих сильную спин-фермионную связь квазичастиц на CuO_2 -плоскости. Главным недостатком такого подхода является его среднеполевой характер, не позволяющий должным образом учитывать динамические процессы спин-флуктуационного рассеяния, играющие важную роль, например, в описании псевдощелевой фазы купратных сверхпроводников.

Недавно в работе [29] была предпринята попытка развить спин-поляронный подход в рамках диаграммной техники, названной авторами “пучковой”. Особенностью этого подхода является точный учет алгебры спиновых операторов на одном узле, что позволяет корректно описывать одноузельные процессы спин-зарядового рассеяния. Однако при таком подходе пренебрегается зависимостью спиновых операторов от мнимого времени, что не позволяет выйти за рамки статического приближения.

Предлагаемая в данной работе реализация концепции спинового полярона основана на комбинации хорошо разработанных диаграммных методов как для фермиевских [30], так и для спиновых [31, 32] операторов, и, таким образом, не содержит недостатков использованных ранее подходов.

¹⁾e-mail: ddm@iph.krasn.ru

2. Спин-фермионная модель. Гамильтониан СФМ [17, 33–37], учитывающий основные особенности электронной структуры CuO_2 -плоскости высокотемпературных сверхпроводников, имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{k\alpha} \left(\xi_{k_x} a_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha} + \xi_{k_y} b_{k\alpha}^\dagger b_{k\alpha} + t_k (a_{k\alpha}^\dagger b_{k\alpha} + b_{k\alpha}^\dagger a_{k\alpha}) \right) + \frac{J}{N} \sum_{fkq\alpha\beta} e^{if(q-k)} u_{k\alpha}^\dagger \tilde{\mathbf{S}}_f^{\alpha\beta} u_{q\beta} + \frac{I}{2} \sum_{f\delta} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f+2\delta}. \quad (1)$$

При записи гамильтониана введены обозначения

$$\begin{aligned} \xi_{k_{x(y)}} &= \varepsilon_p - \mu + \tilde{\tau} (1 - \cos k_{x(y)}), \\ t_k &= (2\tilde{\tau} - 4t) s_{k_x} s_{k_y}, \quad s_{k_{x(y)}} = \sin(k_{x(y)}/2), \\ u_{k\beta} &= s_{k_x} a_{k\beta} + s_{k_y} b_{k\beta}, \quad \tilde{\mathbf{S}}_f = \mathbf{S}_f \boldsymbol{\sigma}, \\ \tilde{\tau} &= \frac{t_{pd}^2}{\Delta_{pd}} \left(1 - \frac{\Delta_{pd}}{U_d - \Delta_{pd}} \right), \\ J &= \frac{4t_{pd}^2}{\Delta_{pd}} \left(1 + \frac{\Delta_{pd}}{U_d - \Delta_{pd}} \right). \end{aligned} \quad (2)$$

Слагаемые первой суммы в гамильтониане (1) описывают подсистему дырок на ионах кислорода в квазиимпульсном представлении. Операторы $a_{k\alpha}^\dagger$ ($a_{k\alpha}$) и $b_{k\alpha}^\dagger$ ($b_{k\alpha}$) есть операторы рождения (уничтожения) дырки в состоянии с квазиимпульсом k и проекцией спина $\alpha = \pm 1/2$ в подсистеме ионов кислорода с p_x - и p_y -орбиталями соответственно. Функции $\xi_{k_{x(y)}}$ и t_k , согласно их определению (2), выражаются через энергию связи дырки на ионе кислорода ε_p , химпотенциал μ , интеграл прямых перескоков между ближайшими ионами кислорода t , а также параметр $\tilde{\tau}$, учитывающий интенсивность перескоков дырок на кислороде за счет процессов второго порядка по параметру гибридизации t_{pd} . В выражении для $\tilde{\tau}$ разность $\Delta_{pd} = \varepsilon_p - \varepsilon_d$ определяет щель с переносом заряда, где ε_d — одноузельная энергия дырки на ионе меди. Вторая сумма гамильтониана соответствует обменному взаимодействию с интенсивностью J между подсистемой дырок на кислороде и спинами, локализованными на ионах меди. Скалярное произведение векторного оператора спина \mathbf{S}_f на узле f и вектора $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, составленного из матриц Паули, обозначено посредством $\tilde{\mathbf{S}}_f$. Посредством N обозначено число элементарных ячеек, равное числу ионов меди. Последняя сумма в (1) соответствует сверхобменному взаимодействию с параметром I между ближайшими спинами на ионах меди, возникающему в четвертом порядке теории возмущений. Здесь вектор δ связывает ион меди с четырьмя ближайшими ионами кислорода.

Для дальнейшего удобно переписать гамильтониан СФМ (1) в представлении новых фермиевских операторов $\varphi_{k\alpha}$ и $\psi_{k\alpha}$, которые можно определить посредством следующего унитарного преобразования [38, 39]

$$\begin{aligned} \varphi_{k\alpha} &= (s_{k_x} a_{k\alpha} + s_{k_y} b_{k\alpha}) / \nu_k, \\ \psi_{k\alpha} &= (s_{k_x} b_{k\alpha} - s_{k_y} a_{k\alpha}) / \nu_k, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\nu_k = \sqrt{s_{k_x}^2 + s_{k_y}^2}$. Выполнив преобразование (3), представим гамильтониан СФМ в виде, удобном для применения диаграммной техники:

$$\hat{H}_{s-f} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}. \quad (4)$$

Здесь оператор \hat{H}_0 описывает невзаимодействующие кислородные дырки и локализованные на ионах меди спины

$$\hat{H}_0 = \sum_{k\alpha} \left(\xi_{\psi k} \psi_{k\alpha}^\dagger \psi_{k\alpha} + \xi_{\varphi k} \varphi_{k\alpha}^\dagger \varphi_{k\alpha} \right) - \sum_f h S_f^z, \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} \xi_{\varphi k} &= \varepsilon_p + 2\tilde{\tau} \nu_k^2 - 8t \frac{s_{k_x}^2 s_{k_y}^2}{\nu_k^2} - \mu, \\ \xi_{\psi k} &= \varepsilon_p + 8t \frac{s_{k_x}^2 s_{k_y}^2}{\nu_k^2} - \mu. \end{aligned} \quad (6)$$

Последнее слагаемое в выражении (5), описывающее зеemanовскую энергию спинов с бесконечно малым полем ($h \rightarrow 0$), направленным вдоль оси z , добавляется для корректного построения диаграммной техники для спиновых операторов. Оператор взаимодействия имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}} &= \sum_{k\alpha} V_k (\varphi_{k\alpha}^\dagger \psi_{k\alpha} + \psi_{k\alpha}^\dagger \varphi_{k\alpha}) + \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{kqf\alpha\beta} J_{kq} e^{if(q-k)} \varphi_{k\alpha}^\dagger \tilde{\mathbf{S}}_f^{\alpha\beta} \varphi_{q\beta} + \frac{I}{2} \sum_{f\delta} \mathbf{S}_f \mathbf{S}_{f+2\delta}, \end{aligned} \quad (7)$$

где

$$V_k = -4t \frac{s_{k_x} s_{k_y}}{\nu_k^2} (s_{k_x}^2 - s_{k_y}^2), \quad J_{kq} = J \nu_k \nu_q.$$

Удобство записи гамильтониана СФМ в виде (4) обусловлено тем, что только один сорт затравочных квазичастиц (именно тех, что описываются операторами $\varphi_{k\alpha}$) связан с локализованной спиновой подсистемой.

В дальнейшем важное значение будет иметь также расщепленный характер функции взаимодействия J_{kq} .

3. Функции Грина дырок и массовый оператор. Для изучения спектральных свойств системы, описываемой гамильтонианом (4), воспользуемся формализмом мацубаровских функций Грина, которые определим следующими выражениями,

$$\begin{aligned} G_{\alpha}^{(\varphi)}(k, \tau - \tau') &= - \left\langle T_{\tau} \tilde{\varphi}_{k\alpha}(\tau) \tilde{\varphi}_{k\alpha}^{\dagger}(\tau') \right\rangle, \\ G_{\alpha}^{(\psi)}(k, \tau - \tau') &= - \left\langle T_{\tau} \tilde{\psi}_{k\alpha}(\tau) \tilde{\psi}_{k\alpha}^{\dagger}(\tau') \right\rangle, \end{aligned} \quad (8)$$

где T_{τ} – оператор упорядочения по мацубаровским временным переменным τ и τ' , изменяющимся в пределах от 0 до $\beta = 1/T$, где T – температура. Операторы φ и ψ записаны в представлении Гейзенберга

$$\tilde{\varphi}_{k\alpha}(\tau) = \exp(\tau \hat{H}_{s-f}) \varphi_{k\alpha} \exp(-\tau \hat{H}_{s-f}). \quad (9)$$

Угловые скобки в (8) означают термодинамическое усреднение с матрицей плотности, определяемой гамильтонианом \hat{H}_{s-f} . Важным обстоятельством является то, что локализованная спиновая подсистема находится в состоянии квантовой спиновой жидкости. Это означает отсутствие дальнего магнитного порядка ($\langle S_f^z \rangle = 0$) и SU(2)-инвариантность спиновых корреляционных функций $C_{fm} = 3 \langle S_f^x S_m^x \rangle = 3 \langle S_f^y S_m^y \rangle = 3 \langle S_f^z S_m^z \rangle$.

Фурье-образы функций Грина (8) имеют вид

$$G_{\alpha}^{(\eta)}(k, \tau) = T \sum_{\omega_m} e^{-i\omega_m \tau} G_{\alpha}^{(\eta)}(k, i\omega_n), \quad (10)$$

где $\omega_n = (2n+1)\pi T$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ – мацубаровские частоты, $\eta = \varphi, \psi$.

Функция $G_{\alpha}^{(\varphi)}(k, i\omega_n)$ удовлетворяет уравнению Дайсона

$$G_{\alpha}^{(\varphi)}(k, i\omega_n) = \frac{1}{\left(G_k^{(0)}(i\omega_n)\right)^{-1} - \Sigma(k, i\omega_n)}, \quad (11)$$

где $\Sigma(k, i\omega_n)$ – неприводимая часть массового оператора, а функция

$$G_k^{(0)}(i\omega_m) = \frac{i\omega_m - \xi_{\psi k}}{(i\omega_m - \xi_{\varphi k})(i\omega_m - \xi_{\psi k}) - V_k^2} \quad (12)$$

описывает невзаимодействующие со спиновой подсистемой квазичастицы сорта φ , но учитывает их гибридизацию с квазичастицами сорта ψ .

В дальнейшем нас будет интересовать режим низкой плотности носителей тока, характерный для купратных сверхпроводников. В этой связи обратим внимание на два важных обстоятельства, отличающих гамильтониан СФМ (4) от формально схожего с ним

гамильтониана “расширенной” модели решетки Кондо [4]. Первое отличие связано с реализацией неравенства $J \gg W$, где W – ширина зоны затравочных дырок на кислороде. Именно большая величина J отвечает за формирование в купратах спинполяронных квазичастиц. Отметим, что в модели решетки Кондо обычно рассматривается противоположный предел $J \ll W$. Второе отличие обусловлено низкой концентрацией дырок в купратах $x < 0.2$. При описании эффекта Кондо, напротив, важное значение имеет большое количество носителей тока, поскольку это обуславливает эффективную экранировку.

Приближение низкой плотности при диаграммном описании дает возможность отбросить все графики, содержащие фермионные петли. Можно показать, что выражение для массового оператора, описывающего связь дырок с локализованной спиновой подсистемой, может быть записано следующим образом:

$$\begin{aligned} \Sigma(k, i\omega_m) &= J_{kk} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{N} \sum_{f_1 \dots f_n} T^n \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots d\tau_n \times \\ &\times \sum_{\omega_1 \dots \omega_{n-1}} e^{i\tau_1(\omega_m - \omega_1)} \dots e^{i\tau_n(\omega_{n-1} - \omega_m)} \times \\ &\times X_{f_1 - f_2}(i\omega_1) \dots X_{f_{n-1} - f_n}(i\omega_{n-1}) \times \\ &\times \langle T_{\tau} \left(\tilde{\mathbf{S}}_{f_1}(\tau_1) \dots \tilde{\mathbf{S}}_{f_n}(\tau_n) \right) \rangle_{\downarrow\downarrow} \mathfrak{S}_I(\beta)_{0c}^{\text{irr}}, \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$X_f(i\omega_l) = \frac{1}{N} \sum_q J_{qq} e^{iqf} G_k^{(0)}(i\omega_l). \quad (14)$$

Матрица рассеяния $\mathfrak{S}_I(\beta)$ учитывает взаимодействия только между локализованными спинами

$$\mathfrak{S}_I(\beta) = T_{\tau} \exp \left\{ - \int_0^{\beta} d\tau \frac{I}{2} \sum_{f\delta} \mathbf{S}_f(\tau) \mathbf{S}_{f+2\delta}(\tau) \right\}, \quad (15)$$

а матричный $\tilde{\mathbf{S}}_f$ и векторный \mathbf{S}_f спиновые операторы берутся в представлении взаимодействия

$$\tilde{\mathbf{S}}_f(\tau) = e^{\tau \hat{H}_0} \tilde{\mathbf{S}}_f e^{-\tau \hat{H}_0}, \quad \mathbf{S}_f(\tau) = e^{\tau \hat{H}_0} \mathbf{S}_f e^{-\tau \hat{H}_0}. \quad (16)$$

Нижний индекс “0” у правой угловой скобки указывает на то, что термодинамическое среднее в выражении (13) берется с матрицей плотности, описывающей систему без взаимодействия. Стоящий рядом индекс “c” означает, что при рассмотрении среднего от произведения спиновых операторов по теореме Вика [31] учитываются только связанные диаграммы.

Надпись “irr” сверху у правой угловой скобки означает, что учитываются только неприводимые диаграммы, т.е. диаграммы, которые не могут быть разрезаны на две несвязанные части по одной фермиевской линии. В силу условия SU(2)-инвариантности состояния спиновой подсистемы, в произведении n матричных операторов $\tilde{S}_f(\tau)$ можно взять любой диагональный элемент. Для определенности мы выбираем элемент $\downarrow\downarrow$.

4. Спиновые функции Грина. Вычисление T_τ -упорядоченного термодинамического среднего от каждого произведения спиновых операторов в выражении (13) осуществляется согласно общим правилам спиновой диаграммной техники [31]. Методика вычисления спиновых функций Грина в однопетлевом приближении для систем, находящихся в состоянии квантовой спиновой жидкости и описываемых на основе СФМ, была развита в работе [40]. В частности, для спиновой функции Грина

$$\begin{aligned} D_{++}(f\tau; f'\tau') &= -\langle T_\tau S_f^+(\tau) S_{f'}^-(\tau') \rangle = \\ &= \frac{T}{N} \sum_{q,l} e^{iq(f-f')-i\omega_l(\tau-\tau')} D_{++}(q, i\omega_l) \\ &(\omega_l = 2l\pi T, \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \end{aligned} \quad (17)$$

было получено выражение

$$D_{++}(q, i\omega_l) = G_{++}(q, i\omega_l) P(q, i\omega_l), \quad (18)$$

в котором

$$\begin{aligned} G_{++}(q, i\omega_l) &= \frac{i\omega_l}{(i\omega_l)^2 - \tilde{\Omega}_q^2(i\omega_l)}, \\ P(q, i\omega_l) &= \frac{2}{3i\omega_l} \frac{1}{N} \sum_p C_p (I_{q-p} - I_p), \\ \tilde{\Omega}_q^2(i\omega_l) &= \frac{1}{3N} \sum_q C_q (I_q - I_k - \Pi_k(i\omega_l)) (I_q - I_{k-q}). \end{aligned} \quad (19)$$

В выражениях (19) посредством I_q и C_q обозначены фурье-образы обменного интеграла I_{fm} и корреляционной функции C_{fm} , соответственно,

$$I_q = I \sum_\delta e^{-iq\delta} = 4I\gamma_{1q}, \quad C_q = \sum_\delta e^{-iq\delta} C_\delta, \quad (20)$$

где $\gamma_{1q} = (\cos k_x + \cos k_y)/2$. Поляризационный оператор $\Pi_k(i\omega_l)$ в (19) учитывает влияние носителей тока на спиновую подсистему.

Выражение для спиновой функции Грина может быть записано в более простом виде, если принять во внимание то обстоятельство, что обменное взаимодействие учитывается только между ближайшими

соседними спинами, а также ограничиться статическим приближением для поляризационного оператора $\Pi_k(i\omega_l) = \Pi_k$:

$$D_{++}(q, i\omega_l) = \frac{(8/3)C_1 I (\gamma_{1q} - 1)}{(i\omega_l)^2 - \Omega_q^2}. \quad (21)$$

Здесь Ω_q — закон дисперсии спин-волновых возбуждений

$$\Omega_q^2 = \frac{16}{3} I^2 |C_1| (1 - \gamma_{1q}) [1 + \gamma_{1q} + \Delta_q], \quad (22)$$

и функция

$$\Delta_q = \frac{3/4 + 2C_2 + C_3}{4|C_1|} - 1 + \frac{\Pi_q}{4I} \quad (23)$$

описывает щель в спектре спиновых возбуждений в окрестности точки (π, π) зоны Бриллюэна. Посредством C_j обозначены спиновые корреляторы из j -ой координационной сферы, которые должны находиться самосогласованно через спиновые функции Грина

$$C_j = \frac{3}{2} \frac{T}{N} \sum_{q,l} e^{iq\delta_j} D_{++}(q, i\omega_l), \quad (24)$$

где δ_j — вектор, соединяющий узлы из j -й координационной сферы.

Для вычисления концентрационной зависимости спиновых корреляторов заменим в спектре Ω_q поляризационный оператор Π_q его средним значением по зоне Бриллюэна Π . Далее примем во внимание, что определенная выражением (23) щель $\Delta_Q(\Pi)$ при $q = Q \equiv (\pi, \pi)$ линейно связана с обратной магнитной корреляционной длиной ξ^{-1} . Согласно экспериментальным данным по нейтронному рассеянию и ядерному магнитному резонансу (см., например, [41, 42]), величина ξ^{-1} зависит от допирования x и для лантановых сверхпроводников возрастает в несколько раз при увеличении x в интервале $0.03 \div 0.3$. В соответствии с этими данными, для каждого уровня допирования x значение усредненного поляризационного оператора Π подбирается нами таким образом, чтобы спиновая щель увеличивалась в 2.5 раза при увеличении x от 0.03 до 0.3.

5. Однопетлевое приближение для массового оператора. Вклады первого порядка по параметру обменного взаимодействия J в массовый оператор (13) равны нулю, поскольку спиновая система находится в фазе квантовой спиновой жидкости. Первые отличные от нуля вклады возникают во втором порядке и графически изображаются однопетлевыми диаграммами, представленными на рис. 1. На этих диаграммах, согласно общим правилам [13, 31],

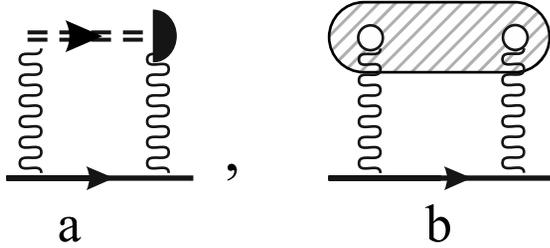


Рис. 1. Однопетлевые диаграммы для массового оператора

сплошной линии со стрелкой сопоставляется функция Грина невзаимодействующих дырок $G_k^{(0)}(i\omega_m)$. Каждой волнистой линии отвечает параметр взаимодействия J , причем происхождение волнистой линии со светлым кружком связано с продольным спин-фермионным взаимодействием, а происхождение волнистой линии без кружка – с поперечным взаимодействием. Двойная штриховая линия с черным полукругом обозначает спиновую функцию Грина $D_{++}(q, i\omega_l) = G_{++}(q, i\omega_l)P(q, i\omega_l)$, причем штриховая линия соответствует пропагатору $G_{++}(q, i\omega_l)$, а полукруг – концевому множителю $P(q, i\omega_l)$. За штрихованному овалу на второй диаграмме ставится в соответствие фурье-образ функции Грина

$$D_{zz}(f\tau; f'\tau') = -\langle T_\tau S_f^z(\tau) S_{f'}^z(\tau') \rangle. \quad (25)$$

Каждой тройной вершине сопоставляются два множителя ν_q : один из множителей отвечает входящей фермиевской функции Грина $G_q^{(0)}(i\omega_m)$, другой – выходящей. Во всех вершинах выполняется закон сохранения импульса и частоты.

Поскольку вследствие $SU(2)$ -инвариантности основного состояния спиновой подсистемы должно выполняться равенство

$$D_{zz}(q, i\omega_l) = \frac{1}{2}D_{++}(q, i\omega_l), \quad (26)$$

аналитические выражения для однопетлевых диаграмм, обозначенных на рис. 1 посредством “а” и “b”, можно записать в виде

$$\Sigma^{(a)}(k, i\omega_m) = -J_{kk}\bar{Y}_k(i\omega_m), \quad (27)$$

$$\Sigma^{(b)}(k, i\omega_m) = -\frac{1}{2}J_{kk}\bar{Y}_k(i\omega_m), \quad (28)$$

где

$$\bar{Y}_k(i\omega_m) = \frac{T}{N} \sum_{p,n} J_{k-p,k-p} G_{k-p}^{(0)}(i\omega_{m-n}) D_{++}(p, i\omega_n).$$

Энергетический спектр спин-поляронов квазичастиц определяется полюсами запаздывающей

функции Грина, получаемой в результате аналитического продолжения мацубаровской функции Грина (11), которое в данном случае осуществляется на основе аппроксимантов Паде [43]. Рассчитанный в однопетлевом приближении для массового оператора (13) спектр изображен на рис. 2 черными кривыми. Для сравнения на этом же рисунке синими и зелеными кривыми показан затравочный спектр “голых” дырок подсистемы ионов кислорода.

Обратим внимание на две важные особенности спин-поляронного спектра на рис. 2, которые отмечались ранее авторами [18, 19], изучавшими энергетическую структуру спин-поляронов квазичастиц в рамках СФМ на основе проекционной техники Цванцига–Мори [25, 26]. Первая особенность связана со значительным понижением (почти на 2 эВ) энергии спин-поляронов состояний за счет сильной связи кислородных дырок со спиновой подсистемой. Для малых значений допирования, характерных для купратных сверхпроводников, заселенными оказываются как раз состояния, отвечающие дну нижней зоны на рис. 2. Вторая особенность представленного спектра заключается в формировании локального минимума в окрестности точки $(\pi/2, \pi/2)$ зоны Бриллюэна. Именно эта особенность приводит к характерной форме поверхности Ферми в слабо-допированных купратах в виде дырочного кармана.

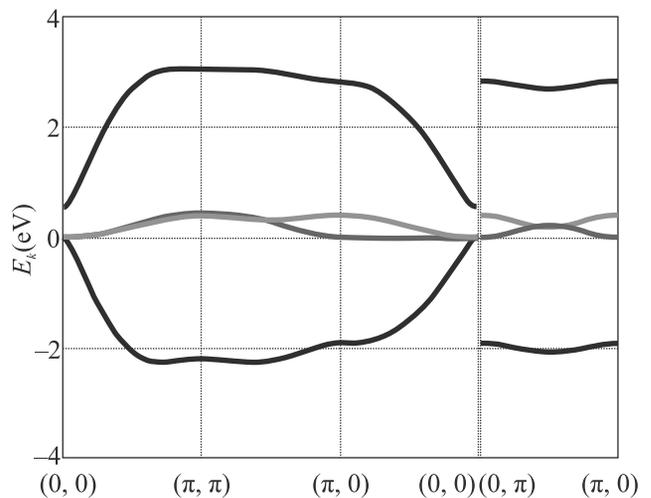


Рис. 2. Энергетический спектр спиновых поляронов (черные кривые), рассчитанный в однопетлевом приближении. Синие и зеленые кривые изображают затравочный спектр дырок подсистемы кислорода

6. Приближение лестничных диаграмм для массового оператора. Недостатком спин-поляронного спектра на рис. 2 является отсутствие третьей важной особенности, отмечавшейся

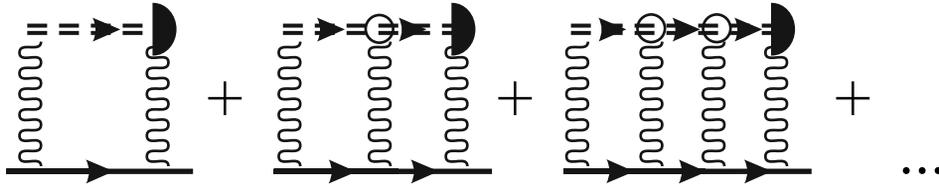


Рис. 3. Ряд из лестничных диаграмм, учитывающих процессы многократного рассеяния дырок на локализованных спинах

авторами [18, 19] и заключающейся в отщеплении нижней спин-поляронной зоны от зоны затравочных дырочных состояний на величину щели порядка 1–2 эВ.

В недавней работе [29] в рамках пучковой диаграммной техники было показано, что щель между нижней спин-поляронной зоной и верхней затравочной зоной возникает при учете процессов многократного рассеяния дырок на одном и том же локализованном спине подсистемы меди. В рамках используемого нами подхода, основанного на диаграммной технике для спиновых операторов, такого рода процессы содержатся, среди прочих, в бесконечной последовательности лестничных диаграмм, изображенной на рис. 3. Можно заметить, что эта последовательность начинается с диаграммы “а” на рис. 1, к которой прибавляются диаграммы, возникающие из “а” путем добавления линий продольных взаимодействий. Благодаря отмечавшемуся в п. 2 расщепленному характеру функции спин-фермионного взаимодействия J_{kq} , аналитические вклады для членов ряда на рис. 3 нетрудно просуммировать и получить выражение для соответствующей собственно энергетической части

$$\Sigma^{(A)}(k, i\omega_m) = \frac{-J_{kk}\bar{Y}_k(i\omega_m)}{1 - Y_k(i\omega_m)}, \quad (29)$$

где

$$Y_k(i\omega_m) = \frac{T}{N} \sum_{p,n} J_{k-p,k-p} G_{k-p}^{(0)}(i\omega_{m-n}) G_{++}(p, i\omega_n).$$

Энергетический спектр спиновых поляронов, рассчитанный в лестничном приближении, в котором массовый оператор аппроксимируется суммой собственно энергетических частей $\Sigma^{(A)}$ (29) и $\Sigma^{(b)}$ (28), представлен на рис. 4. Из сравнения спектра на рис. 2, полученного в однопетлевом приближении, со спектром на рис. 4 следует качественное отличие, которое заключается в отщеплении зоны спин-поляронных квазичастиц от зоны “голых” дырок на величину 1 эВ. Кроме этого, на рис. 4 в окрестности нуля возникает третья зона со слабой дисперсией, которая отсутствует на рис. 2.

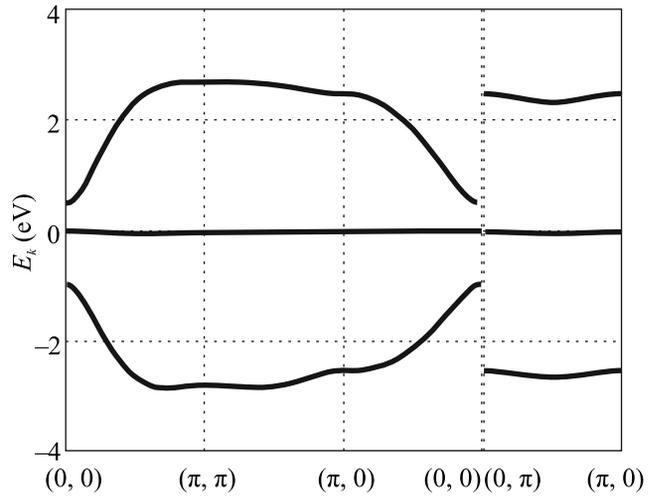


Рис. 4. Энергетический спектр спиновых поляронов, рассчитанный в лестничном приближении

7. Заключение. В работе концепция спинового полярона в купратных сверхпроводниках впервые реализована на основе диаграммной техники для фермиевских и спиновых операторов. На основе рассмотрения дырочной и спиновой подсистем на CuO_2 -плоскости в рамках спин-фермионной модели выделен минимальный набор однопетлевых и лестничных диаграмм для собственно энергетической части фермионной функции Грина, необходимый для воспроизведения наиболее важных особенностей спектра спин-поляронных квазичастиц. Показано, что для значительного понижения энергии спин-поляронных квазичастиц и формирования локального минимума энергетического спектра в окрестности точки $(\pi/2, \pi/2)$ зоны Бриллюэна достаточно учитывать лишь однопетлевые диаграммы. Однако для получения энергетической щели между нижней ветвью спин-поляронных состояний и верхними ветвями кислородных дырок необходим учет лестничных диаграмм для массового оператора фермионной функции Грина. В результате такого учета достигается хорошее качественное согласие спин-поляронного спектра, полученного на основе диаграммного подхода, с результатами предыдущих работ, в которых

энергетическая структура спин-поляронных квазичастиц изучались в рамках проекционной техники Цванцига–Мори. Ожидается, что развитый в работе подход послужит эффективным инструментом при описании псевдощелевой фазы купратных сверхпроводников, носителями тока в которых выступают спин-поляронные квазичастицы.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты # 18-02-00837 и # 20-32-70059).

1. A. F. Barabanov, R. O. Kuzian, and L. A. Maksimov, *Phys. Rev. B* **55**, 4015 (1997).
2. А. Ф. Барабанов, О. В. Уразаев, А. А. Ковалев, Л. А. Максимов, *Письма в ЖЭТФ* **68**, 386 (1998).
3. А. Ф. Барабанов, А. В. Михеенков, А. М. Белемук, *Письма в ЖЭТФ* **75**, 118 (2002).
4. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили, М. М. Коровушкин, А. Ф. Барабанов, *УФН* **191**, 673 (2021).
5. M. Vojta, *Adv. Phys.* **58**, 699 (2009).
6. V. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida, and J. Zaanen, *Nature* **518**, 179 (2015).
7. N. Plakida, *High-Temperature Cuprate Superconductors: Experiment, Theory, and Applications*, Springer, Dordrecht (2010).
8. Н. М. Плакида, Л. Антон, С. Адам, Г. Адам, *ЖЭТФ* **124**, 367 (2003).
9. А. А. Владимиров, Д. Иле, Н. М. Плакида, *ТМФ* **152**, 538 (2007).
10. Ю. А. Изюмов, *УФН* **165**, 403 (1995).
11. Ю. А. Изюмов, *УФН* **167**, 465 (1997).
12. М. В. Еремин, С. Г. Соловьянов, С. В. Варламов, *ЖЭТФ* **112**, 1763 (1997).
13. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, *Квазичастицы в сильно коррелированных системах*, изд-во СО РАН, Новосибирск (2001).
14. L. A. Maksimov, R. Naun, and A. F. Barabanov, *Phys. Lett. A* **238**, 288 (1998).
15. Ю. А. Изюмов, Ю. Н. Скрябин, *Базовые модели в теории ферромагнетизма*, изд-во УрО РАН, Екатеринбург (2002).
16. В. В. Вальков, М. М. Коровушкин, А. Ф. Барабанов, *Письма в ЖЭТФ* **88**, 426 (2008).
17. А. Ф. Барабанов, Л. А. Максимов, Г. В. Уймин, *Письма в ЖЭТФ* **47**, 532 (1988).
18. А. Ф. Барабанов, А. А. Ковалев, О. В. Уразаев, А. М. Белемук, Р. Хайн, *ЖЭТФ* **119**, 777 (2001).
19. Д. М. Дзедзисашвили, В. В. Вальков, А. Ф. Барабанов, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 596 (2013).
20. V. V. Val'kov, D. M. Dzebisashvili, and A. F. Barabanov, *Phys. Lett. A* **379**, 421 (2015).
21. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили, М. М. Коровушкин, А. Ф. Барабанов, *Письма в ЖЭТФ* **103**, 433 (2016).
22. V. V. Val'kov, D. M. Dzebisashvili, M. M. Korovushkin, and A. F. Barabanov, *J. Low Temp. Phys.* **191**, 408 (2018).
23. V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
24. C. M. Varma, S. Schmitt-Rink, and E. Abrahams, *Solid State Commun.* **62**, 681 (1987).
25. R. Zwanzig, *Phys. Rev.* **124**, 983 (1961).
26. H. Mori, *Prog. Theor. Phys.* **33**, 423 (1965).
27. Ю. А. Церковников, *ТМФ* **49**, 219 (1981).
28. D. M. Dzebisashvili and K. K. Komarov, *Eur. Phys. J. B* **91**, 278 (2018).
29. V. V. Val'kov, V. A. Mitskan, M. M. Korovushkin, D. M. Dzebisashvili, and A. F. Barabanov, *J. Low Temp. Phys.* **197**, 34 (2019).
30. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, М. (1962).
31. Ю. А. Изюмов, Ф. А. Коссан-Оглы, Ю. Н. Скрябин, *Полевые методы в теории ферромагнетизма*, Наука, М. (1974).
32. Р. О. Зайцев, В. А. Иванов, *ФТТ* **29**, 2554 (1987).
33. P. Prelovšek, *Phys. Lett. A* **126**, 287 (1988).
34. J. Zaanen and A. M. Oleś, *Phys. Rev. B* **37**, 9423 (1988).
35. E. B. Stechel and D. R. Jennison, *Phys. Rev. B* **38**, 4632 (1988).
36. V. J. Emery and G. Reiter, *Phys. Rev. B* **38**, 4547 (1988).
37. H. Matsukawa and H. Fukuyama, *J. Phys. Soc. Jpn.* **58**, 2845 (1989).
38. B. S. Shastry, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1288 (1989).
39. Д. Ф. Дигор, В. А. Москаленко, *ТМФ* **130**, 320 (2002).
40. В. В. Вальков, Д. М. Дзедзисашвили, А. Ф. Барабанов, *ТМФ* **191**, 319 (2017).
41. V. Keimer, N. Belk, R. J. Birgeneau, A. Cassanho, C. Y. Chen, M. Greven, M. A. Kastner, A. Aharony, Y. Endoh, R. W. Erwin, and G. Shirane, *Phys. Rev. B* **46**, 14034 (1992).
42. V. Barzykin and D. Pines, *Phys. Rev. B* **52**, 13585 (1995).
43. H. J. Vidberg and J. W. Serene, *J. Low Temp. Phys.* **29**, 179 (1977).

Influence of cation impurities and both cation and anion nonstoichiometry on aluminum oxide energy gap width

V. M. Zainullina^{*+1)}, M. A. Korotin⁺

^{*}*Institute of Solid State Chemistry, Ural Branch of Russian Academy of Sciences, 620990 Yekaterinburg, Russia*

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

Submitted 19 July 2021
Resubmitted 9 August 2021
Accepted 9 August 2021

DOI: 10.31857/S1234567821170109

At present, miniaturization of the electronic devices is achieved by increasing the dielectric constant, K , and by using low-dimensional materials [1]. In this regard, high K oxides, such as Al_2O_3 ($K = 10$) and HfO_2 ($K = 25$) are considered as promising materials for advanced electronic devices [2]. During the past decade, the optical and electronic properties of aluminum oxide with transition metal impurities have been intensively investigated [1, 3]. Almost all theoretical studies were performed within the supercell approximation with periodic repetition of atomic defects and a discrete set of impurity concentrations. The Coherent Potential Approximation (CPA) is a fundamentally different approach developed for the study of substitutional disordered alloys with a continuous interval of impurity concentrations.

In this Letter, we employed a novel CPA scheme developed in [4] using the TB-LMTO-ASA. The combination of these two approximations allows us to consider substitutional impurities, as well as vacancies in the lattice sites.

The purpose of the work was to study the effect of mono- and multi-component (Zr, Nb, Mo, Ga, Sn) doping and nonstoichiometry on the electronic spectrum of $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ in the vicinity of the energy gap using the CPA approach.

When aluminum sublattice is doped with one impurity such as $\text{Al}_{1.94}\text{Zr}_{0.06}\text{O}_3$, $\text{Al}_{1.94}\text{Nb}_{0.06}\text{O}_3$, and $\text{Al}_{1.94}\text{Mo}_{0.06}\text{O}_3$, new partially occupied $4d$ paired bands (α and α' , β and β' , γ and γ') appear near the bottom of the conduction band (CB) of $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (Fig. 1,A), in good agreement with experimental data. The nonstoichiometry on the Al sublattice ($\text{Al}_{1.94}\text{O}_3$) does not change the electronic structure of $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ in the vicinity of the energy gap because Al vacancy s -, p -states lie

higher. The spectra of these compositions are found to be metallic.

We also found new insulators $\text{Al}_{1.97}\text{Ga}_{0.03}\text{O}_3$ (mono-doping), $\text{Al}_{1.96}\text{Zr}_{0.03}\text{O}_3$, $\text{Al}_{1.95}\text{Nb}_{0.03}\text{O}_3$, $\text{Al}_{1.94}\text{Mo}_{0.03}\text{O}_3$ (the latter 3 cases are multi-doping with both impurity atom and Al vacancy) with energy gap values lying in the UV range of sunlight (Fig. 1,B). Doping of the Al sublattice with isovalent Ga impurity does not form an isolated impurity band in the vicinity of $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ energy gap, because the Ga s -, p -states lie higher. The electronic spectrum of $\text{Al}_{1.97}\text{Ga}_{0.03}\text{O}_3$ has a dielectric type with a large energy gap of 8.1 eV. The DOS for $\text{Al}_{1.96}\text{Zr}_{0.03}\text{O}_3$ with the energy gap of 7.2 eV is shown in Fig. 1,B. Incorporation of Nb atom and Al vacancy in the Al sublattice simultaneously allows us to suggest the $\text{Al}_{1.95}\text{Nb}_{0.03}\text{O}_3$ compound with the energy gap value equal to 5.7 eV. For $\text{Al}_{1.94}\text{Mo}_{0.03}\text{O}_3$, the calculated value of the energy gap is 4.3 eV. The $\text{Al}_{1.97}\text{Ga}_{0.03}\text{O}_3$ and $\text{Al}_{1.96}\text{Zr}_{0.03}\text{O}_3$ are potential candidates for new capacitors.

Another way to reduce the $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ band gap to the values lying in the visible and IR ranges of the solar spectrum is the mono- and multi-doping of nonstoichiometric $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_{3-\delta}$ with d - (Zr, Nb, and Mo) and p - (Ga and Sn) impurities with the corresponding concentrations. We obtained a semiconducting state for $\text{Al}_{1.97}\text{Ga}_{0.03}\text{O}_{2.97}$ with the energy gap value of 2.1 eV. We established a semiconducting type spectrum for nonstoichiometric multi d - and p -doped compositions, $\text{Al}_{1.96}\text{Zr}_{0.03}\text{O}_{2.97}$ and $\text{Al}_{1.91}\text{Nb}_{0.03}\text{Sn}_{0.06}\text{O}_{2.97}$, with the energy gap values lying in the IR range of the sunlight, 0.4–1.6 eV. The new semiconductors can be used in photodiodes.

Thus, the CPA approach allows one to predict the fundamental electronic properties of disordered nonstoichiometric multi-doped oxide compounds with arbitrary impurity concentrations and design promising materials for advanced electronic and photoelectric devices.

¹⁾e-mail: veronika@ihim.uran.ru

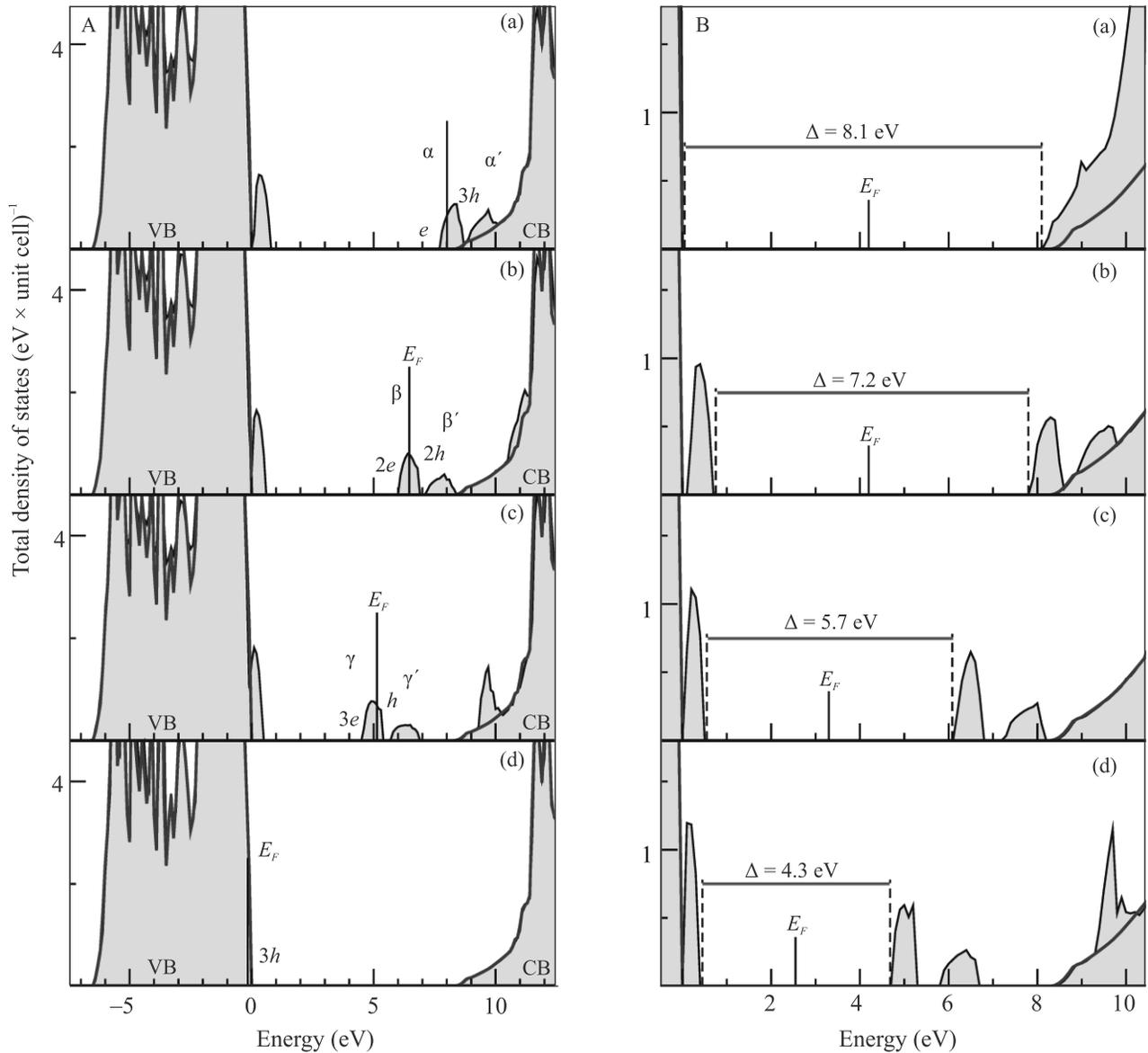


Fig. 1. (Color online) A – Calculated total (grey area) densities of states (DOS) for $\text{Al}_{1.94}\text{Zr}_{0.06}\text{O}_3$ (a), $\text{Al}_{1.94}\text{Nb}_{0.06}\text{O}_3$ (b), $\text{Al}_{1.94}\text{Mo}_{0.06}\text{O}_3$ (c), and $\text{Al}_{1.94}\text{O}_3$ (d). (B) – Total DOS (grey area) for $\text{Al}_{1.97}\text{Ga}_{0.03}\text{O}_3$ (a), $\text{Al}_{1.96}\text{Zr}_{0.03}\text{O}_3$ (b), $\text{Al}_{1.95}\text{Nb}_{0.03}\text{O}_3$ (c), and $\text{Al}_{1.94}\text{Mo}_{0.03}\text{O}_3$ (d) in the vicinity of the energy gap of $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. The red horizontal segment shows the energy gap interval. The value of the energy gap Δ is given in red. The Fermi level is denoted by a vertical solid line and E_F mark. The energy interval from 0.0 to 8.3 eV corresponds to the interval of $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ energy gap. Blue color shows the DOS for $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$

The research was carried out within the state assignments AAAA-A18-118111290051-4 and AAAA-A18-118020190098-5.

This is an excerpt of the article “Influence of cation impurities and both cation and anion nonstoichiometry on aluminum oxide energy gap width”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364021170033

1. A. Vedenev, V. Rylkov, K. Napolskii, A. Leontiev,

A. Klimenko, A. Kozlov, V. Luzanov, S. Nikolaev, M. Temiryazeva, and A. Bugaev, JETP Lett. **106**, 411 (2017).

2. T. Perevalov and V. Gritsenko, Phys.-Uspekhi **53**, 561 (2010).

3. M. Kim, S. Hong, H. Kim, M. Kim, S. Hong, H. Kim, S. Kim, S. Choi, R. Elliman, and S. Russo, Appl. Phys. Lett. **94**, 112110 (2009).

4. M. Korotin, N. Skorikov, V. Zainullina, E. Kurmaev, A. Lukoyanov, and V. Anisimov, JETP Lett. **94**, 806 (2012).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

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

том 114

Выпуск 6

25 сентября 2021

*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.ru>

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

© Российская академия наук, 2021

© Редколлегия журнала “Письма в ЖЭТФ” (составитель), 2021

Search for exotic states in ^{13}C

A. S. Demyanova⁺¹⁾, A. N. Danilov⁺, S. V. Dmitriev⁺, A. A. Ogloblin⁺, V. I. Starastsin⁺, S. A. Goncharov^{*},
D. M. Janseitov^{×◊▽}

⁺National Research Centre Kurchatov Institute, 123182 Moscow, Russia

^{*}Lomonosov Moscow State University, 119991 Moscow, Russia

[×]Joint Institute for Nuclear Research, 141700 Dubna, Russia

[◊]Institute of Nuclear Physics, National Nuclear Center of Republic of Kazakhstan, 050032 Almaty, Republic of Kazakhstan

[▽]Al-Farabi Kazakh National University, 050040 Almaty, Republic of Kazakhstan

Submitted 2 August 2021

Resubmitted 2 August 2021

Accepted 16 August 2021

DOI: 10.31857/S1234567821180014

^{13}C is usually recognized a good example of a “normal” nucleus well described by the shell model. Its level scheme is reliably determined up to the excitation energies ~ 10 MeV. However, some new ideas and results renewed interest in ^{13}C . The most ambitious among them is hypothesis [1] about possible existence of α -particle Bose–Einstein condensation (αBEC). Some features of the condensate structure were predicted [1] and observed [2, 3] in the second 0^+ , 7.65 MeV state of ^{12}C (so called Hoyle state). It was also suggested [4, 5] that the structures analogous to the Hoyle state may exist in some neighbor nuclei, e.g., ^{13}C . In [6] existence of two rotational bands built on the $3/2^-$, 9.90 MeV state and some yet not seen $3/2^+$ state was proposed. The radii of the members of the first band were predicted [7] to be enhanced (more than 3 fm). Our results for the 9.90 MeV state [8] showed that the predicted radius enhancement doesn't take place. Recently a hypothesis was put forward about a new type of symmetry in the $^{13}\text{C} - D'_{3h}$ symmetry [9]. On the basis of D'_{3h} symmetry, the rotational nature of a whole group of low-lying ^{13}C states was predicted. If this hypothesis is confirmed, our understanding about the ^{13}C structure will radically change. Thus, a critical analysis of the available data is required to answer the question about the nature of low-lying excited ^{13}C states.

Recently another approach was proposed for measuring the radii of nuclei in the excited states, the modified diffraction model (MDM) [3]. Its application [10] to the analysis of existing quite scarce literature data demonstrated that the radii of some states in ^{13}C really are enhanced. However, this result should be taken with

some reservation because the used data were obtained at 1-2 energies. Later our group made two experiments on scattering of α -particles on ^{13}C at 65 and 90 MeV [8, 11, 12]. Previous results for the increased radii of the 3.09 and 8.86 MeV states were confirmed. Some amazing result was obtained for the 9.90 MeV state – decreased radius [11, 12]. So in ^{13}C coexistence of different structures is seen: neutron halo (3.09 MeV), cluster state (8.86 MeV, analog of the Hoyle state), compact cluster state (9.90 MeV) [11, 12]. Moreover, our team has successfully applied MDM to study of isobar-analog states (IAS) [13, 14]. Study of isobar-analog states in ^{13}N can be additional check of obtained results for ^{13}C states.

First aim of this work was search for possible analogs of the Hoyle state in excited states of ^{13}C . As mentioned in [5], possible candidate can be the $1/2^-$, 11.08 MeV state. Previously increased radius for this state was determined using MDM in [10] but this result was obtained only based on data at single energy 388 MeV [4]. This is upper energy limit for MDM application. So new experimental data were very desirable. The 11.08 MeV state was observed in both experiments at 65 and 90 MeV [8, 11, 12]. We applied MDM to this new experimental data. Averaged on two energies rms radius is 2.8 ± 0.2 fm. This value within errors coincides with the radius of the 8.86 MeV state in ^{13}C and the Hoyle state in ^{12}C and is smaller than predictions [5]. It can be an argument to possible close structure of these states.

Second aim is question about the 9.90 MeV state. Our previous MDM analysis has shown that the 9.90 MeV state $3/2^-$ is compact [11, 12]. While some theoretical works [7] contradict this result and predict radius enhancement for the 9.90 MeV state. Moreover, it was

¹⁾e-mail: a.s.demyanova@bk.ru

proposed in [9] that the 9.90 MeV state is member of rotational band $K^\pi = 1/2^-$ based on the 8.86 MeV state. As the 8.86 MeV state has increased radius, quite natural that other members of the band should also have increased radius.

To check these results we study the isobar-analog state of the 9.90 MeV state in ^{13}N – the 9.48 MeV state using MDM [14]. Several works have been found in the literature on the reaction $^{13}\text{C}(^3\text{He}, t)^{13}\text{N}$ at 43.6 MeV [15] and 450 MeV [16] with the excitation of the 9.48 MeV state. We applied MDM to these data. There are two variants of determining radius [14] using MDM based on charge-exchange reactions. We obtained following results for the 9.48 MeV state: 2.5 ± 0.3 fm for the first variant and 2.3 ± 0.3 fm for the second. So, both variants gave practically the same result: we obtained normal, non-increased radius for the 9.48 MeV state, which within errors coincides with the radius of the ground state. But the data at 450 MeV is on the upper limit of the MDM applicability and, therefore, additional verification is required. So a new experiment with ^3He beam at middle energies is highly desirable.

Also we have clarified radius of the 9.90 MeV state based on existing experimental data. Averaged on 65 and 90 MeV rms radius is 2.0 ± 0.3 fm. Obtained value of the radius practically coincided with value from [8] but value of error is a bit larger. In principle, within the error limits, the value of the radius obtained for the 9.90 MeV in ^{13}C coincides with the radius of the 9.48 MeV state in ^{13}N state and radius of the g.s in ^{13}C ; perhaps, due to rather large value of errors, values are similar.

It is interesting to note that the 9.90 MeV state is strongly excited in the α -cluster transfer reactions ($^6\text{Li}, d$) and ($^7\text{Li}, t$) on ^9Be [17] while the 8.86 MeV state is not. This means that α -cluster structures of the 8.86 and 9.90 MeV states are probably different: the latter has a strong $^9\text{Be} + \alpha$ component which is absent in the 8.86 MeV. So, 8.86 and 9.90 MeV states can't be members of one band due to different structures and rms radii and proposed in [9] band $K^\pi = 1/2^-$ most likely doesn't exist. At the same time, proposed in [6] band $K^\pi = 3/2^-$ can exist and members of this band should have normal rms radius. Anyhow, question regarding rotational states and bands in ^{13}C is still open and deeper analysis is needed.

The reported study was funded by Russian Foundation for Basic Research, project number 20-32-70115.

This is an excerpt of the article “Search for exotic states in ^{13}C ”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal.

DOI: 10.1134/S0021364021180016

1. A. Tohsaki, H. Horiuchi, P. Schuck, and G. Röpke, Phys. Rev. Lett. **87**, 192501 (2001).
2. M. Chernykh, H. Feldmeier, T. Neff, P. von Neumann-Cosel, and A. Richter, Phys. Rev. Lett. **98**, 032501 (2007).
3. A. N. Danilov, T. L. Belyaeva, A. S. Demyanova, S. A. Goncharov, and A. A. Ogloblin, Phys. Rev. C **80**, 054603 (2009).
4. T. Kawabata, Y. Sasamoto, M. Fujiwara et al. (Collaboration), Journal of Physics: Conference Series **111**, 012013 (2008).
5. T. Yamada and Y. Funaki, Int. J. Mod. Phys. E **17**, 2101 (2008).
6. M. Milin and W. von Oertzen, Eur. Phys. J. A **14**, 295 (2002).
7. N. Furutachi, M. Kimura, Phys. Rev. C **83**, 021303 (2011).
8. A. A. Ogloblin, A. S. Demyanova, A. N. Danilov, S. A. Goncharov, T. L. Belyaeva, W. Trzaska, and Yu. G. Sobolev, JETP Lett. **102**, 199 (2015).
9. R. Bijker and F. Iachello, Phys. Rev. Lett. **122**, 162501 (2019).
10. A. S. Demyanova, A. A. Ogloblin, A. N. Danilov, T. L. Belyaeva, and S. A. Goncharov, Int. J. Mod. Phys. E **20**, 915 (2011).
11. A. S. Demyanova, A. N. Danilov, S. V. Dmitriev et al. (Collaboration), EPJ Web of Conferences **66**, 02027 (2014).
12. A. S. Demyanova, A. A. Ogloblin, A. N. Danilov, S. A. Goncharov, T. L. Belyaeva, Yu. G. Sobolev, S. V. Khlebnikov, N. Burtebaev, W. Trzaska, P. Heikkinen, G. P. Tyurin, D. Janseitov, and Yu. B. Gurov, EPJ Web of Conferences **117**, 04012 (2016).
13. A. S. Demyanova, A. A. Ogloblin, A. N. Danilov, T. L. Belyaeva, S. A. Goncharov, and W. Trzaska, JETP Lett. **104**(8), 526 (2016).
14. A. S. Demyanova, A. A. Ogloblin, S. A. Goncharov, A. N. Danilov, T. L. Belyaeva, and W. Trzaska, Physics of Atomic Nuclei **80**, 831 (2017).
15. R. J. Peterson, J. R. Shepard, and R. A. Emigh, Phys. Rev. C **24**, 826 (1981).
16. H. Fujimura, H. Akimune, I. Daito, M. Fujiwara, K. Hara, K. Y. Hara, M. N. Harakeh, F. Ihara, T. Inomata, K. Ishibashi, T. Ishikawa, T. Kawabata, A. Tamii, M. Tanaka, H. Toyokawa, T. Yamanaka, and M. Yosoi, Phys. Rev. C **69**, 064327 (2004).
17. V. Z. Goldberg, V. V. Davidov, A. A. Ogloblin, S. B. Sakuta, and V. I. Tshuev, Proc. of Soviet Academy of Science, Ser. Fiz. **35**, 1663 (1971).

Вычисление ширины распада $\tau \rightarrow K^- K^0 \nu_\tau$ в расширенной модели НИЛ с оценкой вклада от взаимодействия каонов в конечном состоянии

М. К. Волков¹⁾, А. А. Пивоваров

Лаборатория теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова, Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

Поступила в редакцию 5 августа 2021 г.

После переработки 5 августа 2021 г.

Принята к публикации 14 августа 2021 г.

Вычислена парциальная ширина распада $\tau \rightarrow K^- K^0 \nu_\tau$ в рамках расширенной модели Намбу–Иона-Лазинио. Рассмотрены контактный и векторный каналы. В векторном канале учтены вклады от ρ мезона в основном и первом радиально возбужденном состоянии. Полученные результаты находятся в удовлетворительном согласии с экспериментом. Учет взаимодействия каонов в конечном состоянии приводит лишь к незначительным поправкам, не выходящим за пределы точности модели.

DOI: 10.31857/S1234567821180026

1. Введение. В недавних работах, посвященных описанию распадов тау лептона на два псевдоскалярных мезона [1–3], было показано, что при описании этих процессов в рамках модели Намбу–Иона-Лазинио (НИЛ) [4, 5] важную роль играет также учет взаимодействия рожденных частиц в конечном состоянии. Особенно это касается случаев, когда среди них присутствует легкий пион. Тогда величина поправок в ширину распада может достигать до 30%. При возрастании суммарной массы рождаемых мезонов эта поправка уменьшается. Так, например, при рождении каона и η мезона она составляет около 15%. А при рождении исследуемых здесь двух каонов она оказывается около 6% и становится пренебрежимо малой с точки зрения точности нашей модели, составляющей порядка 15%. Таким образом, наблюдается тенденция к уменьшению вклада взаимодействия в конечном состоянии при увеличении суммарной массы рожденных мезонов, а также при появлении необходимости учета промежуточных возбужденных мезонных состояний.

Рассмотренный здесь распад до настоящего времени привлекает внимание как экспериментальных коллабораций, так и теоретических групп. Например, он исследовался в недавних работах коллабораций Belle и BaBar [6, 7]. Также этот распад изучался во многих теоретических работах [8–11], использующих резонансную киральную теорию возмущений,

модель векторной доминантности, алгебру угловых моментов и т. д.

2. Лагранжиан расширенной модели НИЛ. Фрагмент кварк-мезонного лагранжиана расширенной модели НИЛ, содержащий нужные нам вершины, принимает следующий вид [5, 12–14]:

$$\Delta L_{\text{int}} = \bar{q} \left[\frac{1}{2} \gamma^\mu \sum_{j=\pm} \lambda_j^\rho (A_\rho \rho_\mu^j + B_\rho \rho_\mu^{\prime j}) + i \gamma^5 \sum_{j=\pm,0} \lambda_j^K (A_K K^j + B_K K^{\prime j}) \right] q, \quad (1)$$

где q и \bar{q} поля u -, d - и s -кварков с составляющими массами $m_u \approx m_d = 280$ МэВ, $m_s = 420$ МэВ, возбужденные мезонные состояния отмечены штрихом. Множители A и B имеют вид:

$$A_M = \frac{1}{\sin(2\theta_M^0)} \times \left[g_M \sin(\theta_M + \theta_M^0) + g'_M f_M(k_\perp^2) \sin(\theta_M - \theta_M^0) \right],$$

$$B_M = \frac{-1}{\sin(2\theta_M^0)} \times \left[g_M \cos(\theta_M + \theta_M^0) + g'_M f_M(k_\perp^2) \cos(\theta_M - \theta_M^0) \right]. \quad (2)$$

Индекс M обозначает соответствующий мезон.

Формфактор, описывающий первые радиально возбужденные мезонные состояния, принимает вид [14]:

$$f(k_\perp^2) = (1 + dk^2) \Theta(\Lambda^2 - k^2), \quad (3)$$

¹⁾e-mail: volkov@theor.jinr.ru; tex_k@mail.ru

где d – параметр наклона, величина которого зависит от кваркового состава мезона [14], k – относительный импульс кварков в мезоне.

Параметры θ_M – углы смешивания, возникающие в результате диагонализации свободного лагранжиана, содержащего мезоны в основном и первом радиально возбужденном состояниях [14]:

$$\theta_\rho = 81.8^\circ, \theta_\rho^0 = 61.5^\circ, \theta_K = 58.11^\circ, \theta_K^0 = 55.52^\circ. \quad (4)$$

Матрицы λ – линейные комбинации матриц Гелл-Мана.

Константы связи:

$$g_\rho = \left(\frac{3}{2I_{20}} \right)^{1/2}, \quad g'_\rho = \left(\frac{3}{2I_{20}^{\prime 2}} \right)^{1/2},$$

$$g_K = \left(\frac{Z_K}{4I_{11}} \right)^{1/2}, \quad g'_K = \left(\frac{1}{4I_{11}^{\prime 2}} \right)^{1/2}, \quad (5)$$

где Z_K – дополнительная константа перенормировки, появляющаяся в $K - K_1$ переходах:

$$Z_K = \left(1 - \frac{3}{2} \frac{(m_u + m_s)^2}{M_{K_{1A}}^2} \right)^{-1},$$

$$M_{K_{1A}} = \left(\frac{\sin^2 \alpha}{M_{K_1(1270)}^2} + \frac{\cos^2 \alpha}{M_{K_1(1400)}^2} \right)^{-1/2}. \quad (6)$$

Здесь учтено расщепление состояния K_{1A} на два физических мезона $K_1(1270)$ и $K_1(1400)$ с углом смешивания $\alpha = 57^\circ$ [15]. Используемые массы мезонов $M_{K_1(1270)} = 1253 \pm 7$ МэВ и $M_{K_1(1400)} = 1403 \pm 7$ МэВ [16].

Интегралы, появляющиеся в кварковых петлях в результате перенормировки лагранжиана:

$$I_{n_1 n_2}^{f^m} = -i \frac{N_c}{(2\pi)^4} \times$$

$$\times \int \frac{f^m(\mathbf{k}^2)}{(m_u^2 - k^2)^{n_1} (m_s^2 - k^2)^{n_2}} \Theta(\Lambda^2 - \mathbf{k}^2) d^4 k, \quad (7)$$

где $\Lambda = 1.03$ ГэВ – параметр трехмерного обрезания по кварковым петлям [14].

3. Процесс $\tau \rightarrow K^- K^0 \nu_\tau$ в расширенной модели НИЛ. Диаграммы, описывающие этот процесс, изображены на рис. 1 и 2.

В модели НИЛ этим диаграммам соответствует амплитуда:

$$M_{\text{tree}} = -2\sqrt{2}G_f V_{ud} I_{11}^{KK} \left[T_K^{(c)} + \frac{C_\rho}{g_\rho} \times \right.$$

$$\times \frac{I_{11}^{KK\rho}}{I_{11}^{KK}} T_K^{(\rho)} \frac{q^2}{M_\rho^2 - q^2 - i\sqrt{q^2}\Gamma_\rho} + \frac{C_{\rho'}}{g_{\rho'}} \times$$

$$\left. \times \frac{I_{11}^{KK\rho'}}{I_{11}^{KK}} T_K^{(\rho')} \frac{q^2}{M_{\rho'}^2 - q^2 - i\sqrt{q^2}\Gamma_{\rho'}} \right] L_\mu (p_{K^0} - p_{K^-})^\mu, \quad (8)$$

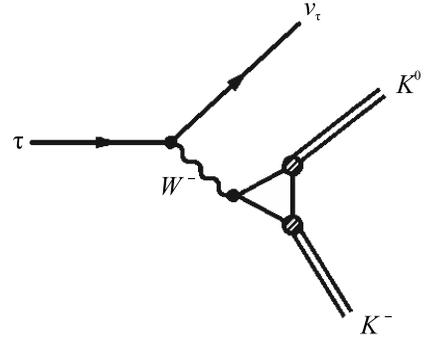


Рис. 1. Контактная диаграмма

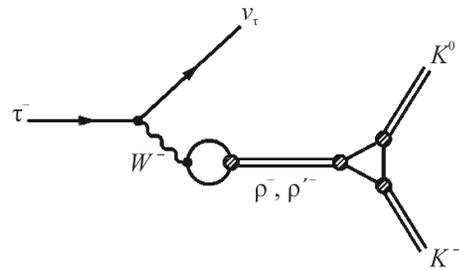


Рис. 2. Диаграмма с промежуточными мезонами

где G_f – константа Ферми, V_{ud} – элемент матрицы Кабиббо–Кобаяши–Маскава, L_μ – лептонный ток, $M_\rho = 775.11 \pm 0.34$ МэВ и $\Gamma_\rho = 149.1 \pm 0.8$ МэВ – масса и ширина мезона $\rho(770)$, $M_{\rho'} = 1465 \pm 25$ МэВ и $\Gamma_{\rho'} = 400 \pm 60$ МэВ – масса и ширина мезона $\rho(1450)$ [16].

Константы, описывающие $K_1 - K$ переходы:

$$T_K^{(c)} = 1 - \frac{(I_{11}^{K_1 K})^2}{I_{11}^{KK}} \frac{(m_s + m_u)^2}{M_{K_{1A}}^2},$$

$$T_K^{(\rho)} = 1 - \frac{I_{11}^{K_1 K \rho} I_{11}^{K_1 K}}{I_{11}^{KK \rho}} \frac{(m_s + m_u)^2}{M_{K_{1A}}^2},$$

$$T_K^{(\rho')} = 1 - \frac{I_{11}^{K_1 K \rho'} I_{11}^{K_1 K}}{I_{11}^{KK \rho'}} \frac{(m_s + m_u)^2}{M_{K_{1A}}^2}. \quad (9)$$

Интегралы с вершинами из лагранжиана в числителе, также используемые в амплитуде:

$$I_{n_1 n_2}^{M, \dots, M'} = -i \frac{N_c}{(2\pi)^4} \times$$

$$\times \int \frac{A_M \dots B_{M'} \dots}{(m_u^2 - k^2)^{n_1} (m_s^2 - k^2)^{n_2}} \Theta(\Lambda^2 - \mathbf{k}^2) d^4 k, \quad (10)$$

где A_M, B_M определены в (2).

Константы

$$C_\rho = \frac{1}{\sin(2\theta_\rho^0)} [\sin(\theta_\rho + \theta_\rho^0) + R_\rho \sin(\theta_\rho - \theta_\rho^0)],$$

$$C_{\rho'} = \frac{-1}{\sin(2\theta_{\rho'}^0)} [\cos(\theta_\rho + \theta_\rho^0) + R_\rho \cos(\theta_\rho - \theta_\rho^0)] \quad (11)$$

возникают в переходах между W -бозоном и промежуточным векторным мезоном. Здесь θ и θ^0 – углы смешивания основных и возбужденных состояний, определенные в (4). Величины R принимают следующий вид:

$$R_\rho = \frac{I_{20}^f}{\sqrt{I_{20} I_{20}^{f^2}}}. \quad (12)$$

В результате для парциальной ширины данного процесса получаем результат:

$$Br(\tau \rightarrow K^- K^0 \nu_\tau) = 13.95 \times 10^{-4}. \quad (13)$$

Экспериментальное значение [16]:

$$Br(\tau \rightarrow K^- K^0 \nu_\tau)_{\text{exp}} = (14.86 \pm 0.34) \times 10^{-4}. \quad (14)$$

Как видно, результат выходит за пределы экспериментальной погрешности, но находится в пределах погрешности модели.

В данный процесс большой вклад дает канал с промежуточным мезоном $\rho(1450)$. И этот вклад чувствителен к ширине распада этого мезона ($\Gamma_\rho = 400 \pm 60$ МэВ). Если взять эту ширину равной 380 МэВ, то результат совпадает с экспериментальным значением.

4. Учет взаимодействия в конечном состоянии. Для учета взаимодействия в конечном состоянии необходимо рассмотреть треугольные мезонные диаграммы с обменом нейтральными мезонами ρ , ω и ϕ , изображенные на рис. 3. Соответствующие вершины можно найти в работе [4].

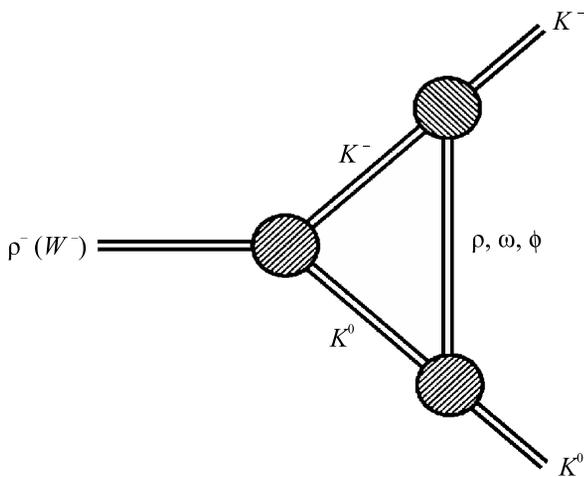


Рис. 3. Мезонные треугольники

Для них получаем интегралы следующего вида:

$$\begin{aligned} F_\mu^{(\rho)} &= \int \frac{(k-2p_{K^-})_\lambda (k+2p_{K^0})_\nu (2k+p_{K^0}-p_{K^-})_\mu \left(g^{\nu\lambda} - \frac{k^\nu k^\lambda}{M_\rho^2}\right)}{[k^2 - M_\rho^2][(k+p_{K^0})^2 - M_K^2][(k-p_{K^-})^2 - M_K^2]} \times \\ &\quad \times \frac{d^4 k}{(2\pi)^4}, \\ F_\mu^{(\omega)} &= \int \frac{(k-2p_{K^-})_\lambda (k+2p_{K^0})_\nu (2k+p_{K^0}-p_{K^-})_\mu \left(g^{\nu\lambda} - \frac{k^\nu k^\lambda}{M_\omega^2}\right)}{[k^2 - M_\omega^2][(k+p_{K^0})^2 - M_K^2][(k-p_{K^-})^2 - M_K^2]} \times \\ &\quad \times \frac{d^4 k}{(2\pi)^4}, \\ F_\mu^{(\phi)} &= \int \frac{(k-2p_{K^-})_\lambda (k+2p_{K^0})_\nu (2k+p_{K^0}-p_{K^-})_\mu \left(g^{\nu\lambda} - \frac{k^\nu k^\lambda}{M_\phi^2}\right)}{[k^2 - M_\phi^2][(k+p_{K^0})^2 - M_K^2][(k-p_{K^-})^2 - M_K^2]} \times \\ &\quad \times \frac{d^4 k}{(2\pi)^4}. \end{aligned} \quad (15)$$

Как видно, данные интегралы совпадают по структуре с интегралом, полученным в работе [1], и равны соответственно:

$$\begin{aligned} F_\mu^{(\rho)} &= i \left[\frac{I_1^{(\rho)}}{M_\rho^2} + I_{2M}^{(\rho)} \right] (p_{K^0} - p_{K^-})_\mu, \\ F_\mu^{(\omega)} &= i \left[\frac{I_1^{(\omega)}}{M_\omega^2} + I_{2M}^{(\omega)} \right] (p_{K^0} - p_{K^-})_\mu, \\ F_\mu^{(\phi)} &= i \left[\frac{I_1^{(\phi)}}{M_\phi^2} + I_{2M}^{(\phi)} \right] (p_{K^0} - p_{K^-})_\mu. \end{aligned} \quad (16)$$

В результате полная амплитуда, учитывающая взаимодействие в конечном состоянии, принимает вид:

$$\begin{aligned} M_{\text{tot}} &= -2\sqrt{2}G_f V_{ud} I_{11}^{KKK} \times \\ &\times \left[T_K^{(c)} + \frac{C_\rho}{g_\rho} \frac{I_{11}^{KK\rho}}{I_{11}^{KKK}} T_K^{(\rho)} \frac{q^2}{M_\rho^2 - q^2 - i\sqrt{q^2}\Gamma_\rho} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{C_{\rho'}}{g_{\rho'}} \frac{I_{11}^{KK\rho'}}{I_{11}^{KKK}} T_K^{(\rho')} \frac{q^2}{M_{\rho'}^2 - q^2 - i\sqrt{q^2}\Gamma_{\rho'}} \right] \times \\ &\times \left\{ 1 - 4 \left(I_{11}^{KK\rho} \right)^2 \left(T_K^{(\rho)} \right)^2 \left[\frac{I_1^{(\rho)}}{M_\rho^2} + I_{2M}^{(\rho)} \right] + \right. \\ &\quad + 4 \left(I_{11}^{KK\omega} \right)^2 \left(T_K^{(\omega)} \right)^2 \left[\frac{I_1^{(\omega)}}{M_\omega^2} + I_{2M}^{(\omega)} \right] + \\ &\quad \left. + 4 \left(I_{11}^{KK\phi} \right)^2 \left(T_K^{(\phi)} \right)^2 \left[\frac{I_1^{(\phi)}}{M_\phi^2} + I_{2M}^{(\phi)} \right] \right\} \times \\ &\quad \times L_\mu (p_{K^0} - p_{K^-})^\mu, \end{aligned} \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned}
T_K^{(\omega)} &= 1 - \frac{I_{11}^{K1K\omega} I_{11}^{K1K}}{I_{11}^{KK\omega} M_{K_{1A}}^2}, \\
T_K^{(\phi)} &= 1 - \frac{I_{11}^{K1K\phi} I_{11}^{K1K}}{I_{11}^{KK\phi} M_{K_{1A}}^2}, \\
I_{2M}^{(\rho)} &= \frac{-i}{(2\pi)^4} \int \frac{\theta(\Lambda_M^2 + k^2)}{(M_\rho^2 - k^2)(M_K^2 - k^2)} d^4k = \\
&= \frac{1}{(4\pi)^2} \frac{1}{M_\rho^2 - M_K^2} \times \\
&\times \left[M_\rho^2 \ln \left(\frac{\Lambda_M^2}{M_\rho^2} + 1 \right) - M_K^2 \ln \left(\frac{\Lambda_M^2}{M_K^2} + 1 \right) \right], \\
I_{2M}^{(\omega)} &= \frac{-i}{(2\pi)^4} \int \frac{\theta(\Lambda_M^2 + k^2)}{(M_\omega^2 - k^2)(M_K^2 - k^2)} d^4k = \\
&= \frac{1}{(4\pi)^2} \frac{1}{M_\omega^2 - M_K^2} \times \\
&\times \left[M_\omega^2 \ln \left(\frac{\Lambda_M^2}{M_\omega^2} + 1 \right) - M_K^2 \ln \left(\frac{\Lambda_M^2}{M_K^2} + 1 \right) \right], \\
I_{2M}^{(\phi)} &= \frac{-i}{(2\pi)^4} \int \frac{\theta(\Lambda_M^2 + k^2)}{(M_\phi^2 - k^2)(M_K^2 - k^2)} d^4k = \\
&= \frac{1}{(4\pi)^2} \frac{1}{M_\phi^2 - M_K^2} \times \\
&\times \left[M_\phi^2 \ln \left(\frac{\Lambda_M^2}{M_\phi^2} + 1 \right) - M_K^2 \ln \left(\frac{\Lambda_M^2}{M_K^2} + 1 \right) \right], \\
I_{1M}^{(\rho)} &= \frac{-i}{(2\pi)^4} \int \frac{\theta(\Lambda_M^2 + k^2)}{(M_\rho^2 - k^2)} d^4k = \\
&= \frac{1}{(4\pi)^2} \left[\Lambda_M^2 - M_\rho^2 \ln \left(\frac{\Lambda_M^2}{M_\rho^2} + 1 \right) \right], \\
I_{1M}^{(\omega)} &= \frac{-i}{(2\pi)^4} \int \frac{\theta(\Lambda_M^2 + k^2)}{(M_\omega^2 - k^2)} d^4k = \\
&= \frac{1}{(4\pi)^2} \left[\Lambda_M^2 - M_\omega^2 \ln \left(\frac{\Lambda_M^2}{M_\omega^2} + 1 \right) \right], \\
I_{1M}^{(\phi)} &= \frac{-i}{(2\pi)^4} \int \frac{\theta(\Lambda_M^2 + k^2)}{(M_\phi^2 - k^2)} d^4k = \\
&= \frac{1}{(4\pi)^2} \left[\Lambda_M^2 - M_\phi^2 \ln \left(\frac{\Lambda_M^2}{M_\phi^2} + 1 \right) \right]. \quad (18)
\end{aligned}$$

Выражение в фигурных скобках содержит вклады от мезонных треугольников. Вклады от треугольников с обменом ρ и ω мезонами приближенно сокращают друг друга, и основной вклад идет от треугольника с обменом ϕ мезоном.

В результате учета взаимодействия в конечном состоянии появился новый параметр – обрезание по мезонной петле Λ_M .

В предыдущей главе в рамках расширенной модели НИЛ была вычислена парциальная ширина распада $\tau \rightarrow KK\nu_\tau$ в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными в пределах ошибок, допустимых в нашей модели. Учитывая взаимодействие мезонов в конечном состоянии и принимая $\Lambda_M = 610$ МэВ, можно получить полное согласие с экспериментом. Заметим, что это обрезание близко к тому, которое использовалось при описании распада $\tau \rightarrow \pi\nu_\tau$ (740 МэВ) и было получено при помощи родственного процесса $e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-$ [1]. Однако в том процессе учет взаимодействия в конечном состоянии играл очень важную роль и давал весьма существенную поправку. В нашем же случае эта поправка существенно меньше и лежит в пределах погрешности модели НИЛ. Поправки такого же порядка можно получить, меняя ширину промежуточного радиально возбужденного мезона в пределах допустимых экспериментальных ошибок. Также интересно отметить, что при описании родственного процесса $e^+e^- \rightarrow K^+K^-$ в рамках расширенной модели НИЛ также получалось вполне удовлетворительное согласие с экспериментом без учета взаимодействия мезонов в конечном состоянии [17].

5. Заключение. В последних наших работах были описаны все возможные распады тау лептона на два псевдоскалярных мезона. Вычисления показали, что учет взаимодействия в конечном состоянии играет важную роль в таких процессах, как $\tau \rightarrow \pi\nu_\tau$ и $\tau \rightarrow K\nu_\tau$ и составляет порядка 30%. При этом следует заметить, что в указанных распадах в векторном канале учитывался вклад основного состояния, в то время как влияние промежуточных радиально возбужденных векторных мезонов было не существенно. В распадах $\tau \rightarrow K\eta\nu_\tau$ и $\tau \rightarrow KK\nu_\tau$ при возрастании суммарной массы рожденных мезонов роль взаимодействия в конечном состоянии заметно снижалась. В распаде $\tau \rightarrow K\eta\nu_\tau$ вклад от взаимодействия в конечном состоянии уменьшился до 15%, а в распаде $\tau \rightarrow KK\nu_\tau$ составил порядка 6%, что не выходит за пределы погрешности модели. При этом интересно отметить, что в данных процессах резко увеличилась роль промежуточных возбужденных мезонов в векторном канале. Вполне возможно, что это связано с уменьшением роли взаимодействия в конечном состоянии. Как было показано в гл. 3, одно только изменение ширины промежуточного возбужденного мезона оказывает большее влияние на результат, чем учет взаимодействия в конеч-

ном состоянии. Природа взаимного влияния на ширину распада учета радиально возбужденных промежуточных состояний и учета взаимодействия в конечном состоянии требует более тщательного исследования.

Авторы выражают благодарность К. Нурлану за интерес к работе и полезные обсуждения.

-
1. M. K. Volkov, A. B. Arbuzov, and A. A. Pivovarov, JETP Lett. **112**(8), 457 (2020).
 2. M. K. Volkov and A. A. Pivovarov, Pisma v ZhETF **113**(12), 777 (2021).
 3. M. K. Volkov and A. A. Pivovarov, arXiv:2107.03725 [hep-ph].
 4. M. K. Volkov, Sov. J. Part. Nucl. **17**, 186 (1986).
 5. M. K. Volkov and A. E. Radzhabov, Phys.-Uspekhi **49**, 551 (2006).
 6. S. Ryu, I. Adachi, H. Aihara et al. (Belle), Phys. Rev. D **89**(7), 072009 (2014).
 7. J. P. Lees, V. Poireau, V. Tisserand et al. (BaBar), Phys. Rev. D **98**(3), 032010 (2018).
 8. B. A. Li, Phys. Rev. D **55**, 1436 (1997).
 9. S. Dubnička and A. Z. Dubničková, Acta Phys. Slov. **60**(1), 1 (2010).
 10. L. R. Dai, R. Pavao, S. Sakai, and E. Oset, Eur. Phys. J. A **55**(2), 20 (2019).
 11. S. González-Solís, A. Miranda, J. Rendón, and P. Roig, Phys. Rev. D **101**(3), 034010 (2020).
 12. M. K. Volkov and C. Weiss, Phys. Rev. D **56**, 221 (1997).
 13. M. K. Volkov, Phys. Atom. Nucl. **60**, 1920 (1997).
 14. M. K. Volkov and A. B. Arbuzov, Phys.-Uspekhi **60**(7), 643 (2017).
 15. M. K. Volkov, K. Nurlan, and A. A. Pivovarov, Int. J. Mod. Phys. A **34**(24), 1950137 (2019).
 16. P. A. Zyla, R. M. Barnett, J. Beringer et al. (Particle Data Group), PTEP **2020**(8), 083C01 (2020).
 17. M. K. Volkov, K. Nurlan, and A. A. Pivovarov, Phys. Rev. C **98**(1), 015206 (2018).

Population transfer in a nitrogen-vacancy spin qutrit via shortcuts to adiabaticity with simplified drivings

R.-Y. Yan, Z.-B. Feng¹⁾

School of Science, Xuchang University, 461000 Xuchang, China

Submitted 5 August 2021

Resubmitted 9 August 2021

Accepted 10 August 2021

DOI: 10.31857/S1234567821180038

Electron spin of nitrogen-vacancy (NV) center in diamond holds many distinct advantages. Acting as a significant building block towards information science and technology, coherent population transfer has attracted increasing attention in recent years [1–4].

Rapidly implementing quantum operation of interest and accurately manipulating quantum system are highly desirable. A set of techniques named as shortcuts to adiabaticity (STA) has been put forward [5–7], capable of performing the adiabatic-like robust operation but in a shorter time. By means of the STA of superadiabatic transitionless driving (SATD), Zhou et al. experimentally reported an accelerated population transfer in a spin qutrit of NV center [8]. However, the SATD-corrected Rabi pulses had the complex time profiles, which could be adverse to precisely adjust control variables. Thereby, choosing simple and feasible pulses plays a key role in the subject of STA for obtaining fast and robust operations.

The ground state of electron spin of NV center is a triplet, which are denoted as $|m_0\rangle$, $|m_{-1}\rangle$, and $|m_1\rangle$. A spin-orbit excited state is labeled as $|A_2\rangle$. Then $|m_{-1}\rangle$, $|A_2\rangle$, and $|m_1\rangle$ constitute a three-state system (qutrit). $|m_{-1}\rangle$ and $|m_1\rangle$ are encoded into qubit states, while $|A_2\rangle$ acts as an auxiliary state. An optical driving is applied to the qutrit, leading to a coupling between $|m_{-1}\rangle$ and $|A_2\rangle$ with a Rabi rate Ω_p . Meanwhile, the coupling between $|m_1\rangle$ and $|A_2\rangle$ can be realized using another driving, and the Rabi rate of which is Ω_s . At two-photon resonance, we get a Λ -configuration interaction of the qutrit with external drivings. We design Rabi pulses within the framework of invariant-based STA.

First, we address a population transfer from an initial state $|m_{-1}\rangle$ to a target state $|m_1\rangle$ by setting $\Omega_{p,s}$ as the sine and cosine functions of time $t \in [0, t_f]$. Numerically, the time dependencies of $\Omega_{p,s}$ are demonstrated

in Fig. 1a, in which we have $t_f = 10$ ns. Based on the designed Rabi pulses Ω_p (Ω_s) having the commonly utilized sine (cosine) waveform, we achieve the prescribed population transfer, see Fig. 1b. Secondly, it is necessary to consider the reversed transfer from $|m_1\rangle$ to $|m_{-1}\rangle$ by adjusting the Rabi pulses Ω_p and Ω_s . Correspondingly, $\Omega_{p,s}$ versus time $t \in [0, 15$ ns] are plotted in Fig. 1c. Based on the designed Rabi couplings, the coherent population transfer from $|m_1\rangle$ to $|m_{-1}\rangle$ of interest can be realized well, see Fig. 1d.

Our strategy may have the following advantages. (i) The Rabi drivings in our scheme have the sine and cosine waveforms, which are easily generated in experiment. Compared with the SATD-based counterpart [8], the simplified pulses are beneficial to reduce the control deviation error. (ii) The drivings under consideration satisfy the condition of two-photon resonance. Compared with the drivings in the large-detuning regime, the resonant drivings can induce faster population transfer. (iii) Based on the Rabi drivings as the sine and cosine functions of time, the bidirectional state transfer in a convenient way is highly desirable to quantum state engineering.

In summary, an efficient strategy is developed for rapidly implementing population transfer within a spin qutrit of NV center in diamond via STA with simplified drivings. We perform population transfer and its reversed operation by designing the time-dependent Rabi pulses with sine and cosine waveforms. Compared with the STAD-corrected pulses, the pulses adopted in our protocol are more accessible technically. The present scheme could offer an optimized avenue towards the STA-based quantum control of spin qutrit experimentally.

This is an excerpt of the article “Population transfer in a nitrogen-vacancy spin qutrit via shortcuts to adiabaticity with simplified drivings”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364021180028

¹⁾e-mail: zbfeng010@163.com

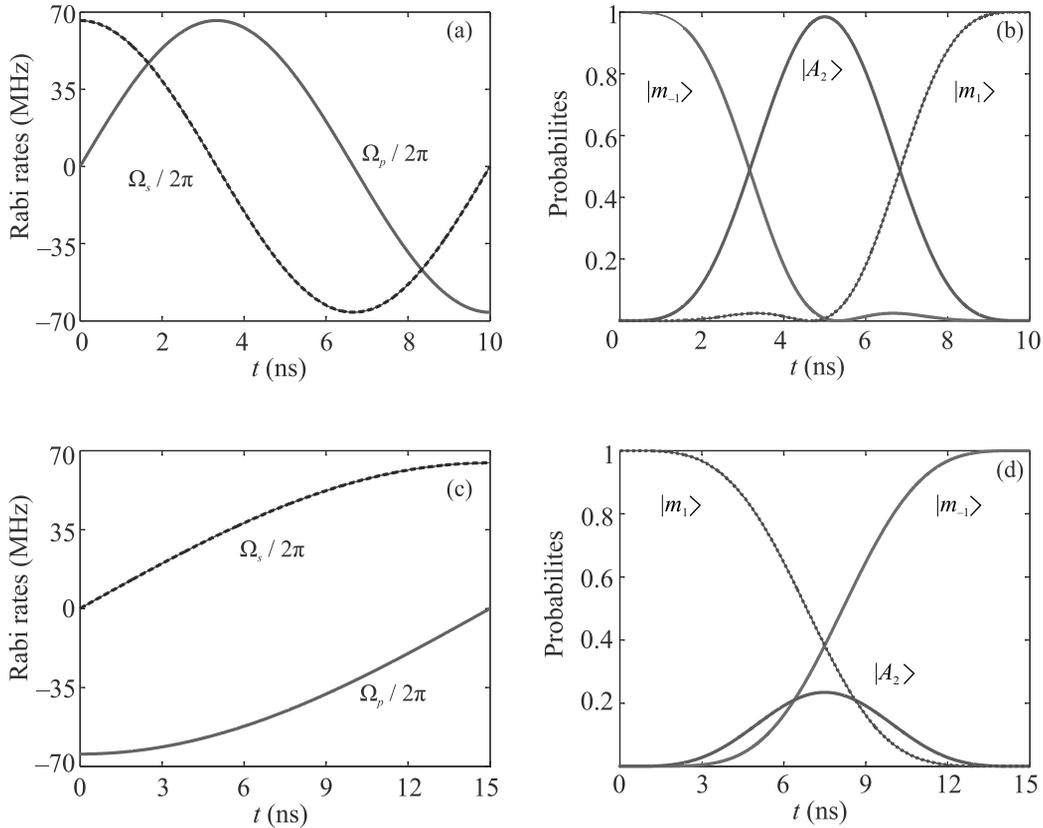


Fig. 1. (Color online) (a) – Rabi pulses $\Omega_{p,s}/2\pi$ with sine and cosine waveforms versus time t . (b) – The time evolution of the probabilities occupied by $|m_{-1}\rangle$ (red solid line), $|A_2\rangle$ (purple solid line), and $|m_1\rangle$ (blue dotted line). (c) – Rabi pulses $\Omega_{p,s}$ for performing a reversed state transfer from $|m_1\rangle$ to $|m_{-1}\rangle$. (d) – Coherent population transfer from $|m_1\rangle$ to $|m_{-1}\rangle$ versus time t

1. W.-J. Su, Z.-B. Yang, and H.-Z. Wu, Opt. Commun. **383**, 101 (2017).
2. S.-H. Wu, M. Amezcuca, and H. Wang, Phys. Rev. A **99**, 063812 (2019).
3. H. Ali, A. Basit, F. Badshah, M. Qurban, and G.-Q. Ge, Europhys. Lett. **127**, 30007 (2019).
4. F. Böhm, N. Nikolay, S. Neinert, C.E. Nebel, and O. Benson, Phys. Rev. B **104**, 035201 (2021).

5. X. Chen, I. Lizuain, A. Ruschhaupt, D. Guéry-Odelin, and J. G. Muga, Phys. Rev. Lett. **105**, 123003 (2010).
6. A. del Campo, Phys. Rev. Lett. **111**, 100502 (2013).
7. D. Guéry-Odelin, A. Ruschhaupt, A. Kiely, E. Torrontegui, S. Martínez-Garaot, and J.G. Muga, Rev. Mod. Phys. **91**, 045001 (2019).
8. B. B. Zhou, A. Baksic, H. Ribeiro, C. G. Yale, F. J. Heremans, P. C. Jerger, A. Auer, G. Burkard, A. A. Clerk, and D. D. Awschalom, Nature Phys. **13**, 330 (2017).

Оптимизация многослойных фотонных структур с помощью искусственных нейронных сетей для получения заданного оптического отклика

К. Р. Сафронов¹⁾, В. О. Бессонов, А. А. Федянин

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

Поступила в редакцию 11 августа 2021 г.

После переработки 12 августа 2021 г.

Принята к публикации 12 августа 2021 г.

Предложен новый метод глубокого машинного обучения для задачи подбора параметров многослойной фотонной структуры по заданному оптическому спектру коэффициента отражения. Предложенный метод обучения основан на соединении искусственной нейронной сети для решения обратной задачи и аналитического метода матриц распространения. Такой подход позволяет добиться высокой точности работы сети. Показана возможность применения разработанного метода для дизайна структуры, выполняющей взятия производной по координате для падающего оптического сигнала.

DOI: 10.31857/S123456782118004X

Устройства нанофотоники обеспечивают сложные функциональные возможности за счет структурирования материалов на микро- и наномасштабе [1–3]. Одной из наиболее простых, но при этом универсальных нанофотонных структур является массив чередующихся слоев с различной толщиной и показателем преломления. Оптический отклик такой многослойной структуры (МС) регулируется параметрами слоев и может подстраиваться под требования конкретной задачи. Благодаря такой гибкости, МС успешно применяются в таких областях, как топологическая фотоника [4], нелинейная оптика [5, 6], магнитооптика [7], оптические вычисления [8], поляритоника [9] и др. [10–12]. Однако для реализации всех этих возможностей необходима разработка методов подбора параметров (дизайна) МС, обладающей заданным оптическим откликом.

Дизайн МС может быть осуществлен перебором всевозможных конфигураций и расчетом оптического отклика для каждого набора параметров. Такой расчет может быть проведен одним из многих хорошо разработанных методов, включая метод конечных элементов, метод конечных разностей во временной области, метод матриц распространения (ММР) и др. Недостатком такого подхода являются его большие временные и вычислительные затраты. Другой подход основан на решении обратной задачи, т. е. определении параметров МС напрямую из заданного отклика [13]. Для решения обратной задачи разрабо-

тано множество оптимизационных методов [14–17]. Однако они являются итеративными и, следовательно, дорогостоящими с точки зрения вычислений, что делает их неподходящими для крупномасштабных и сложных структур. Кроме того, даже незначительная модификация целевого оптического отклика заставляет начинать оптимизацию заново.

Чтобы преодолеть это препятствие, недавно было предложено использовать подход, основанный на искусственных нейронных сетях (ИНС) [18, 19]. ИНС можно использовать одним из двух способов. Первый вариант – предсказание оптического отклика структуры по геометрическим параметрам [19–21]. В этом случае ИНС заменяет дорогостоящее вычислительное моделирование и повышает скорость стандартных методов оптимизации. Второй вариант – обучение ИНС для предсказания структуры с требуемым откликом [22, 23], т. е. для решения обратной задачи. Это позволяет подбирать структуры с заданным оптическим откликом за доли секунды. Основной проблемой второго варианта использования ИНС является неединственность решения обратной задачи, что приводит к несогласованности данных и плохой сходимости ИНС [18]. Для решения этой проблемы было предложено несколько подходов. Одним из наиболее распространенных из них является двухэтапное обучение ИНС: сначала обучается одна сеть для предсказания оптического отклика по заданным параметрам, а затем эта предварительно обученная ИНС соединяется с другой сетью для решения обратной задачи, чтобы сформировать тандем

¹⁾e-mail: safronov@nanolab.phys.msu.ru

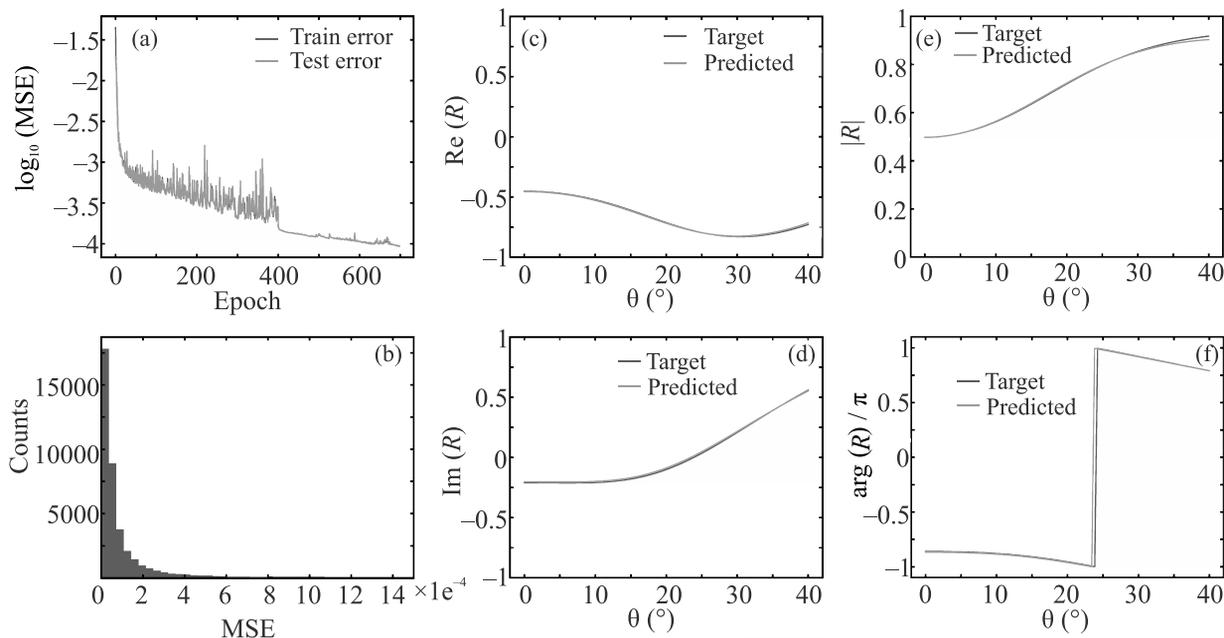


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Зависимость десятичного логарифма СКО (MSE) для тренировочного (оранжевая кривая) и тестового (синяя кривая) наборов данных от номера эпохи. (b) – Гистограмма распределения СКО по тестовому набору данных. (c)–(f) – Зависимости действительной части $\text{Re}(R)$, мнимой части $\text{Im}(R)$, модуля $|R|$ и фазы $\arg(R)$, нормированной на π , коэффициента отражения от угла падения. Целевой коэффициент отражения показан синей кривой, коэффициент отражения МС, предсказанной ИНС, показан оранжевой кривой

сетей [18, 23]. В этом случае от ИНС не требуется какого-то конкретного решения обратной задачи и сеть выбирает какое-то одно из множества решений, которое приводит к лучшей сходимости. Другой примечательный подход основан на генеративных составительных сетях. В этом случае две ИНС (генератор и дискриминатор) обучаются одновременно [24]. Третий подход использует уменьшение размерности пространства параметров с помощью автоэнкодера [25]. При этом предполагается, что обратная задача имеет единственное решение в пространстве меньшей размерности. Одной общей проблемой во всех предлагаемых методах является необходимость обучения нескольких ИНС, что неизбежно приводит к дополнительным ошибкам.

В данной работе предложен альтернативный подход, использующий только одну ИНС для решения обратной задачи дизайна МС, что позволяет значительно повысить качество работы сети. Показано, что обученная ИНС успешно обходит проблему неединственности решения обратной задачи. Данный подход может использоваться для определения параметров различных нанофотонных устройств.

В работе рассматривается МС, состоящая из 10 чередующихся слоев SiO_2 ($n = 1.45$)/ Ta_2O_5 ($n = 2.08$) толщиной от 0 до $d_{\text{max}} = 350$ нм, нанесенных

на стеклянную подложку ($n = 1.52$). Цель состоит в определении толщин слоев d_i ($i = 1 \dots 10$) МС с заданным оптическим откликом. Входными данными для ИНС является угловой спектр амплитудного коэффициента отражения для ТЕ-поляризованного излучения при $\lambda = 800$ нм в диапазоне углов падения θ от 0° до 40° . Спектр дискретизован на 100 точек. На вход ИНС поступает массив, состоящий из действительной r'_i и мнимой r''_i части коэффициента отражения для каждого угла падения, т.е. массив имеет длину 200. Действительная и мнимая части спектра отражения были выбраны вместо фазы и амплитуды, поскольку в фазе могут наблюдаться разрывы, ограничивающие точность ИНС [26]. Выходные данные ИНС представляют собой массив D из 10 нормированных толщин d_i/d_{max} МС. Материал каждого слоя считается известным и фиксированным. Слой на границе с воздухом выполнен из SiO_2 .

ММП был использован для создания набора данных, содержащих спектры коэффициента отражения случайно сгенерированных 10-слойных структур. Это гарантирует, что целевые спектры могут быть реализованы с помощью рассматриваемой в работе одномерной МС. Затем набор данных делится на тренировочную часть (используется для обучения ИНС) и тестовую (для проверки качества ра-

боты ИНС). Наш метод обучения ИНС основан на соединении сети с ММР [27]. В процессе обучения целевой угловой спектр $R_{\text{target}}(\theta)$ используется в качестве входа ИНС, а массив D нормированных толщин является выходом ИНС. Затем D используется в ММР для вычисления углового спектра $R_{\text{predicted}}(\theta)$ МС, сгенерированной ИНС. Затем вычисляется среднеквадратичная ошибка (СКО) между спектрами $R_{\text{predicted}}$ и R_{target} . После этого веса и смещения слоев ИНС обновляются с помощью обратного распространения ошибки, чтобы минимизировать СКО. Для того, чтобы ММР не становился узким местом в обучении ИНС, был разработан оптимизированный код, в котором ММР реализован путем перемножения многомерных матриц (тензоров). ММР естественным образом вписывается в процесс обучения ИНС, поскольку он основан на умножении матриц – основной операции глубокого обучения. Кроме того, ММР определяет аналитическую зависимость между толщиной слоя и спектром отражения и может быть использован для обратного распространения ошибки, т.е. расчета градиента СКО относительно весов и смещений ИНС. В описанном процессе обучения параметры МС из тренировочного набора данных никак не используются. В этом случае ИНС выучивает закономерности, заложенные в ММР, а не просто интерполирует данные из тренировочного набора.

Метод обучения ИНС был протестирован на примере сети, содержащей 4 скрытых слоя по 500 нейронов. ИНС обучалась на 100 000 образцов из тренировочного набора данных в течение 700 эпох. СКО резко падает через 10 эпох, а затем постепенно уменьшается до 10^{-4} (рис. 1а). Распределение СКО в тестовом наборе данных локализовано около нуля, что доказывает хорошее качество обучения (рис. 1б). Рисунки 1с, d демонстрируют работу нашей сети на случайном примере из тестового набора данных. Наша сеть успешно справляется с обратной задачей. Рисунки 1е, f демонстрируют амплитуду $|R|$ и фазу $\arg(R)$ коэффициента отражения, которые вычисляются из действительной r'_i и мнимой r''_i части коэффициента отражения по формулам:

$$|R_i| = \sqrt{(r'_i)^2 + (r''_i)^2}, \quad (1)$$

$$\arg(R_i) = \arctan(r''_i/r'_i), \quad (2)$$

где $i = 1 \dots 100$. Так как $\arg(R)$ лежит в пределах от $-\pi$ до π , то в спектре коэффициента отражения может наблюдаться скачок на 2π (рис. 1f).

Важный вопрос заключается в том, как разработанная ИНС справляется с проблемой неединственности решения обратной задачи. На рисунках 2а, b

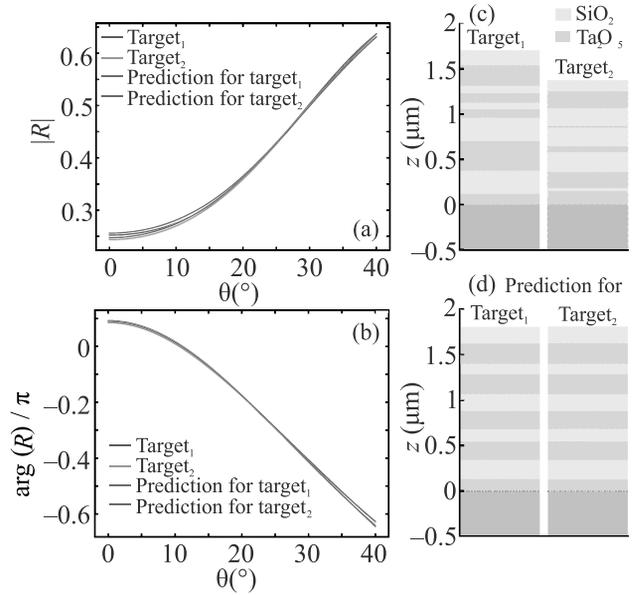


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а), (б) – Зависимости модуля $|R|$ и фазы $\arg(R)$, нормированной на π , коэффициента отражения от угла падения для двух близких по спектру примеров из тестового набора данных (синяя и оранжевая кривые) и спектры МС, предсказанных ИНС (зеленая и красная кривые). (с), (d) – МС с близкими спектрами из тестового набора данных и МС, предсказанные ИНС

демонстрируются два похожих спектра от совершенно разных МС из тестового набора данных (рис. 2с). Среднее отклонение толщин слоев, определяемое формулой:

$$\Delta d = \sum_{i=1}^N \frac{d_i^{\text{target}_1} - d_i^{\text{target}_2}}{N},$$

где $N = 10$, было использовано как мера сходства МС. Для выбранных образцов $\Delta d = 96$ нм. Как видно из рис. 2а, b, ИНС успешно справляется с дизайном МС с выбранными спектрами. Однако средняя разница в толщине слоев Δd для сгенерированных МС составляет всего 3 нм (рис. 2d). Далее была оценена корреляция между разницей спектров ΔR и разницей толщин слоев Δd для образцов из тестового набора данных и для МС, сгенерированных ИНС. В качестве меры корреляции был использован коэффициент Пирсона $\rho_{(\Delta R, \Delta d)}$. Для тестового набора данных $\rho_{(\Delta R, \Delta d)}^{\text{test}} = -0.05$, а для МС, подобранных ИНС, $\rho_{(\Delta R, \Delta d)}^{NN} = 0.48$. Видно, что в тестовом наборе данных нет корреляции между разницей спектров и разницей толщин, т. е. похожий оптический отклик могут демонстрировать МС с абсолютно разными параметрами. Однако существует довольно сильная по-

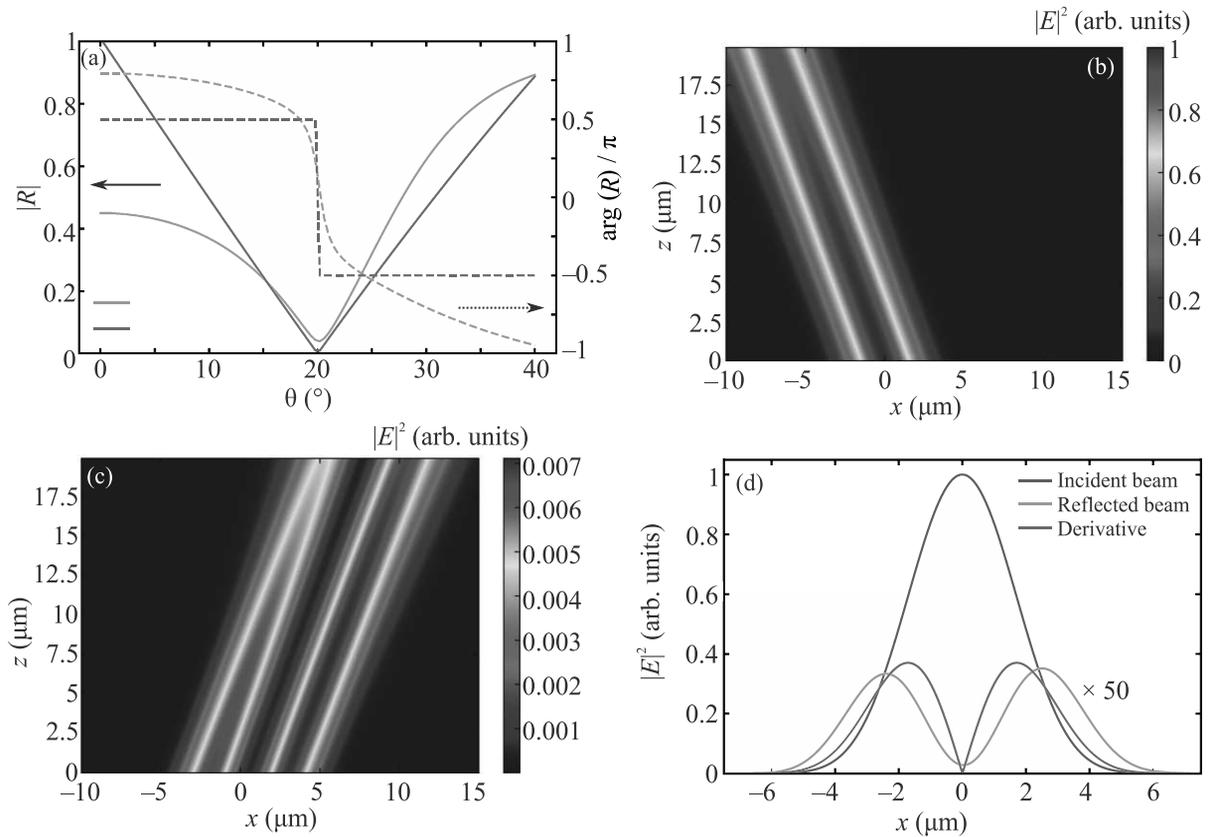


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Зависимости модуля $|R|$ (левая ось ординат) и фазы $\arg(R)$ (правая ось ординат), нормированной на π , коэффициента отражения от угла падения для идеального дифференциатора (красные кривые) и МС, предсказанной ИНС (оранжевые кривые). (b), (c) – Зависимость интенсивности падающего и отраженного от МС пучков от координаты. (d) – Сечение интенсивности падающего пучка (синяя кривая), отраженного (оранжевая) и аналитически вычисленная производная интенсивности падающего пучка (красная)

ложительная корреляция между разницей спектров и разницей толщин для образцов, подобранных сетью. Это означает, что для этих МС близкие спектры создаются похожими структурами. Таким образом, при обучении ИНС сглаживает пространство параметров и из множества возможных решений обратной задачи сходится к какому-то одному.

В качестве примера применения нашей сети были подобраны параметры МС, являющейся оптическим пространственным дифференциатором. Как известно, для реализации пространственной производной первого порядка такое устройство должно иметь передаточную функцию (в нашем случае коэффициент отражения) $R \approx ik_x$ [28], где $k_x = k_0 \sin \theta$ – тангенциальная компонента волнового вектора, θ – угол падения. Таким образом, амплитуда коэффициента отражения дифференциатора должна иметь форму, аналогичную модулю x , а фаза должна испытывать скачок на π . Для демонстрации работы сети была спроектирована МС, выполняющая дифференцирование при угле падения 20° . МС, подо-

бранная ИНС, обладает спектром, похожим на отклик идеального дифференциатора (рис. 3а). Работа разработанного устройства была исследована с помощью собственного метода матриц распространения, который позволяет вычислять отражение не только для плоских волн, но и для сфокусированных гауссовых пучков. Это достигается путем разложения гауссова пучка на набор плоских волн [29]. Качество дифференцирования было исследовано для сфокусированного на поверхность МС 3-мкм гауссова пучка. Поскольку отражение в районе 20° близко к 0, то падающий (рис. 3b) и отраженный лучи (рис. 3c) визуализированы отдельно для наглядности. Рисунок 3d показывает поперечное сечение падающего и отраженного лучей, а также аналитически рассчитанную производную первого порядка. Действительно, наша ИНС подобрала МС с откликом, похожим на идеальный дифференциатор, но не идентичную ему. Увеличение количества слоев может обеспечить лучшее качество взятия производной.

Таким образом, в данной работе продемонстрирован метод обучения одной единственной искусственной нейронной сети для решения обратной задачи дизайна многослойной фотонной структуры по заданному угловому спектру коэффициента отражения. Предложенный метод позволяет достичь среднеквадратической ошибки меньше 10^{-4} , и тем самым проектировать МС, обладающие целевым оптическим откликом с высокой степенью достоверности. Обученная ИНС успешно решает проблему неединственности решения обратной задачи путем сглаживания пространства параметров. Кроме того, ИНС подходит для проектирования устройств нанофотоники, например, оптического дифференциатора. Предложенный метод обучения ИНС может быть перенесен на частотный спектр коэффициента отражения, что откроет еще больше возможностей для создания нанофотонных устройств с различной функциональностью.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, грант # 14.W03.008.31 (разработка оптического дифференциатора) и грант # 075-15-2020-801 (разработка нейронной сети), Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта # 19-32-90225 (разработка оптимизированного метода матриц распространения). Часть исследований выполнена при поддержке Центра квантовых технологий МГУ и некоммерческого Фонда развития науки и образования "Интеллект".

1. A. F. Koenderink, A. Alu, and A. Polman, *Science* **348**, 516 (2015).
2. А. Д. Гартман, М. К. Кройчук, А. С. Шорохов, А. А. Федянин, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 730 (2020).
3. A. M. Chernyak, M. G. Barsukova, A. S. Shorokhov, A. I. Musorin, and A. A. Fedyanin, *JETP Lett.* **111**, 46 (2020).
4. P. S. Pankin, B.-R. Wu, J.-H. Yang, K.-P. Chen, I. V. Timofeev, and A. F. Sadreev, *Commun. Phys.* **3**, 1 (2020).
5. B. I. Afinogenov, A. A. Popkova, V. O. Bessonov, B. Lukyanchuk, and A. A. Fedyanin, *Phys. Rev. B* **97**, 115438 (2018).
6. B. I. Afinogenov, V. O. Bessonov, I. V. Soboleva, and A. A. Fedyanin, *ACS Photonics* **6**, 844 (2019).
7. M. N. Romodina, I. V. Soboleva, A. I. Musorin, Y. Nakamura, M. Inoue, and A. A. Fedyanin, *Phys. Rev. B* **96**, 081401 (2017).
8. W. Wu, W. Jiang, J. Yang, S. Gong, and Y. Ma, *Opt. Lett.* **42**, 5270 (2017).
9. F. Barachati, A. Fieramosca, S. Hafezian, J. Gu, B. Chakraborty, D. Ballarini, L. Martinu, V. Menon, D. Sanvitto, and S. Kéna-Cohen, *Nature Nanotech.* **13**, 906 (2018).
10. I. S. Kriukova, V. A. Krivenkov, P. S. Samokhvalov, and I. R. Nabiev, *JETP Lett.* **112**, 537 (2020).
11. A. E. Schegolev, A. M. Popov, A. V. Bogatskaya, P. M. Nikiforova, M. V. Tereshonok, and N. V. Klenov, *JETP Lett.* **111**, 371 (2020).
12. K. R. Safronov, D. N. Gulkin, I. M. Antropov, K. A. Abrashitova, V. O. Bessonov, and A. A. Fedyanin, *ACS Nano* **14**, 10428 (2020).
13. S. D. Campbell, D. Sell, R. P. Jenkins, E. B. Whiting, J. A. Fan, and D. H. Werner, *Opt. Mater. Express* **9**, 1842 (2019).
14. R. L. Haupt and D. H. Werner, *Genetic algorithms in electromagnetics*, John Wiley & Sons, New Jersey (2007).
15. J. Robinson and Y. Rahmat-Samii, *IEEE Trans. Antennas Propag.* **52**, 397 (2004).
16. J. S. Jensen and O. Sigmund, *Laser Photonics Rev.* **5**, 308 (2011).
17. S. Molesky, Z. Lin, A. Y. Piggott, W. Jin, J. Vucković, and A. W. Rodriguez, *Nat. Photonics* **12**, 659 (2018).
18. D. Liu, Y. Tan, E. Khoram, and Z. Yu, *ACS Photonics* **5**, 1365 (2018).
19. J. Peurifoy, Y. Shen, L. Jing, Y. Yang, F. Cano-Renteria, B. G. DeLacy, J. D. Joannopoulos, M. Tegmark, and M. Soljačić, *Sci. Adv.* **4**, eaar4206 (2018).
20. C. C. Nadell, B. Huang, J. Malof, and W. J. Padilla, *Opt. Express* **27**, 27523 (2019).
21. I. Sajedian, J. Kim, and J. Rho, *Microsyst. Nanoeng.* **5**, 1 (2019).
22. J. He, C. He, C. Zheng, Q. Wang, and J. Ye, *Nanoscale* **11**, 17444 (2019).
23. S. So, J. Mun, and J. Rho, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **11**, 24264 (2019).
24. Z. Liu, D. Zhu, S. P. Rodrigues, K. T. Lee, and W. Cai, *Nano Lett.* **18**, 6570 (2018).
25. Y. Kiarashinejad, S. Abdollahramezani, and A. Adibi, *Npj Comput. Mater.* **6**, 1 (2020).
26. S. An, C. Fowler, B. Zheng, M. Y. Shalaginov, H. Tang, H. Li, L. Zhou, J. Ding, A. M. Agarwal, C. Rivero-Baleine, K. A. Richardson, T. Gu, J. Hu, and H. Zhang, *ACS Photonics* **6**, 3196 (2019).
27. C. C. Katsidis and D. I. Siapkas, *Appl. Opt.* **41**, 3978 (2002).
28. A. Pors, M. G. Nielsen, and S. I. Bozhevolnyi, *Nano Lett.* **15**, 791 (2015).
29. F. I. Baida and M.-P. Bernal, *Commun. Phys.* **3**, 1 (2020).

Facile fabrication of Cu_2O thin film with high Seebeck coefficient

M. Zhang, F. Song, S. Liang¹⁾

Chemistry Department, Renmin University of China, 100872 Beijing, China

Submitted 7 August 2021

Resubmitted 17 August 2021

Accepted 19 August 2021

DOI: 10.31857/S1234567821180051

Thermoelectric (TE) materials might offer potential solutions for power generation and cooling technologies due to their capability of direct and reversible conversion between heat and electricity [1]. Possessing unique features such as all solid-state assembly, no noise, and long lifespan, TE materials, nevertheless, suffer from low heat-to-electricity converting efficiency which limits applications in niche market [2]. Due to a variety of structural, electronic, and thermal properties, numerous works on copper-based thermoelectric were reported, such as $\text{Cu}_3\text{Sb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{S}_4$ ($x = 0.05$) with maximum ZT value of 0.72 at 623 K [3], Cu_3SbS_4 showing a ZT of ~ 0.63 at 623 K [4]. Here we report thermoelectric properties of Cu_2O thin film with high Seebeck coefficient. The Cu_2O thin film was fabricated by oxidizing copper wire directly on stove at ambient environment. Figure 1 shows Cu_2O thin film Seebeck coefficient versus temperature. SC is on average about 2.5 mV/K, with a maximum ~ 4 mV/K, which is about four times of the currently reported 1 mV/K. The Seebeck coefficient is expected to change gradually with temperature without sharp peaks. The observed rapidly changed data points in Fig. 1 are possibly due to the measurement un-

certainty. When the copper oxidation time is less than 3 min, it results in almost negligible SC. Therefore the data in Fig. 1 were obtained with samples oxidized for 4 min. Resistivity about $31 \Omega \cdot \text{cm}$ for our Cu_2O thin film was estimated from the IV curve; it is comparable to $11.6 \Omega \cdot \text{cm}$ reported in [5] for the Cu_2O thin film doped with F [5]. To avoid the parallel conductivity of copper in the bulk, we have repeated resistivity measurements with a thin copper wire (0.1 mm in diameter) oxidized thoroughly with prolonged heating in the stove. We measured the length dependence of resistance to get contact resistance and accurate resistivity of the Cu_2O wire. From the results shown in Fig. 1c, we estimate the contact resistance $\sim 80 \text{ k}\Omega$, and resistivity $\sim 31 \Omega \cdot \text{cm}$, which is similar to the previous results measured on partially oxidized thicker copper wires with substantial copper metal core. Using the estimated resistivity about $31 \Omega \cdot \text{cm}$, power factor of the Cu_2O thin film reached $52 \mu\text{W}/\text{m} \cdot \text{K}^2$. We conjecture the relatively high Seebeck coefficient relates very likely to the band bending between Cu_2O -Cu, Cu_2O - SnO_2 . High Seebeck coefficient and ensuing improved power factor could find applications in temperature/touch monitoring, transient thermoelectric cooling and space-constrained area.

This is an excerpt of the article “Facile fabrication of Cu_2O thin film with high Seebeck coefficient”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364021180041

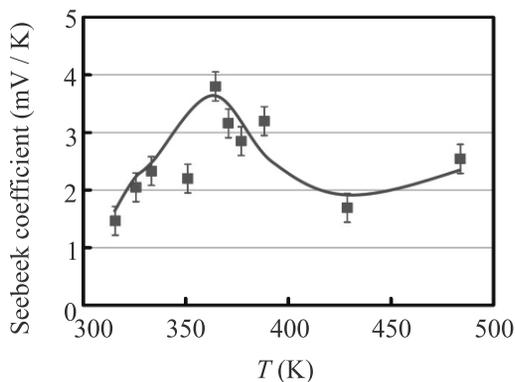


Fig. 1. (Color online) Cu_2O thin film Seebeck coefficient versus temperature (K)

¹⁾e-mail: sliang@ruc.edu.cn

1. G. J. Snyder and E. S. Toberer, Nat. Mater. **7**(2), 105 (2008).
2. L. E. Bell, Cooling, Science **321**(5895), 1457 (2008).
3. S. K. Chen, C. Di Paola, D. Laricchia, M. J. Reece, C. Weber, E. McCabe, I. Abrahams, and N. Bonini, J. Mater. Chem. C **8**(33), 11508 (2020).
4. K. Chen, B. Du, N. Bonini, C. Weber, H. Yan, and M. J. Reece, J. Phys. Chem. C **120**(48), 27135 (2016).
5. F. Ye, J.-J. Zeng, X.-M. Cai, X.-Q. Su, B. Wang, H. Wang, V. A. L. Roy, X.-Q. Tian, J.-W. Li, D.-P. Zhang, P. Fan, and J. Zhang, J. Alloys Compd. **721**, 64 (2017).

Сильное влияние длины световой волны на квантовые осцилляции фототока и их резонансно-туннельная природа в GaAs/AlAs $p-i-n$ структурах¹⁾

Ю. Н. Ханин, Е. Е. Вдовин²⁾, С. В. Морозов

Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН,
142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 23 июля 2021 г.

После переработки 19 августа 2021 г.

Принята к публикации 20 августа 2021 г.

Обнаружено сильное влияние длины волны падающего света λ на относительную долю осциллирующей составляющей фототока в GaAs/AlAs $p-i-n$ гетероструктурах. Эффект объяснен в рамках расширенной “резонансно-туннельной” модели происхождения осцилляций, учитывающей также смещение глубины поглощения света в гетероструктуре с длиной волны λ . Поведение фотоосцилляций в магнитном поле оказалось аналогичным поведению туннельных резонансов в $n-i-n$ структурах с широкими квантовыми ямами и дало подтверждения как нашей интерпретации влияния λ на относительный вклад осциллирующей компоненты в фототок, так и применимости нашей модели осцилляций.

DOI: 10.31857/S1234567821180063

Полупроводниковые $p-i-n$ гетероструктуры широко используются в качестве детекторов излучения и имеют множество применений в оптоэлектронике. Кроме того, в проводимости полупроводниковых структур при определенных условиях могут проявляться различные квантовые осцилляционные эффекты. Существует ряд работ, посвященных колебаниям проводимости $n-i-n$ гетероструктур в зависимости от приложенного напряжения вследствие оптического излучения или из-за квантования энергии движения носителей, ограниченных потенциальными барьерами [1–4]. Квантовые осцилляции фототока с напряжением в $p-i-n$ гетеросистемах были впервые экспериментально обнаружены в однобарьерных GaAs/AlAs структурах [5, 6] и интерпретированы как следствие периодических изменений темпа рекомбинации фотовозбужденных носителей в моменты совпадения уровней треугольной квантовой ямы, формирующейся в нелегированной приборьерной i -области, с дном зоны проводимости высоколегированного p -слоя. Однако наши дальнейшие исследования влияния интенсивности падающего светового потока на относительный вклад осциллирующей части фототока показали явную несостоятельность этой модели и потребовали для описания полученных данных привлечения совершенно другого меха-

низма происхождения осцилляций, подобного резонансному туннелированию фотовозбужденных электронов из p -слоя через потенциальный барьер с участием уровней такой квантовой ямы [7]. Последовавшие же затем эксперименты по изучению зависимости вклада осциллирующей компоненты в фототок от длины световой волны λ , являющиеся основным предметом этой работы, в свой черед также вызвали необходимость в дополнительной доработке и расширении резонансно-туннельной модели осцилляций с учетом роли λ в фотопоглощении гетеросистемы.

В данной работе изучено поведение квантовых осцилляций фототока в GaAs/AlAs $p-i-n$ гетероструктурах при воздействии на них светом с длинами волн λ в интервале от 395 до 935 нм. Обнаружено сильное влияние длины волны λ на относительную величину осциллирующей компоненты фототока, описанное в рамках доработанной и расширенной резонансно-туннельной модели происхождения осцилляций, учитывающей теперь изменение глубины поглощения света с λ . Исследование поведения осцилляций фототока в магнитном поле, перпендикулярном току (параллельном гетерослоям), показало их подавление и сдвиг, аналогичные туннельным резонансам в $n-i-n$ структурах с широкими квантовыми ямами, что дало подтверждения как нашей интерпретации влияния λ на относительный вклад осциллирующей компоненты в полный фототок, так и применимости резонансно-туннельной модели осцилляций.

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

²⁾e-mail: vdov62@yandex.ru

Исследованные нами образцы были изготовлены на основе GaAs/AlAs $p-i-n$ однобарьерных гетероструктур с нелегированными i -слоями 60 и 100 нм со стороны p^+ и n областей, соответственно, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Барьерный слой AlAs толщиной 5 нм расположен между нелегированными i -слоями. Верхний p^+ -слой GaAs толщиной 0.5 мкм легирован до концентрации $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Более детально такие структуры описаны в работах [5, 6]. Образцы облучались светом с длинами волн в диапазоне λ от 875 до 395 нм со стороны высоколегированной p -области. Изменение λ в данном диапазоне приводило, согласно [8, 9], к перемещению границы поглощения света последовательно вдоль всех слоев активной части структуры от самого верхнего края p^+ -слоя вглубь образца, радикально изменяющему темпы фотогенерации носителей в составляющих ее слоях (p , i и n) и, следовательно, изменяющему баланс вкладов возбужденных в этих слоях носителей в полный фототок через структуру. Схематическая зонная диаграмма активной области гетероструктуры при смещающем напряжении $V_b < 1.5 \text{ В}$ ($V_b \approx 1.5 \text{ В}$ соответствует условию плоских зон) показана на рис. 1. Изме-

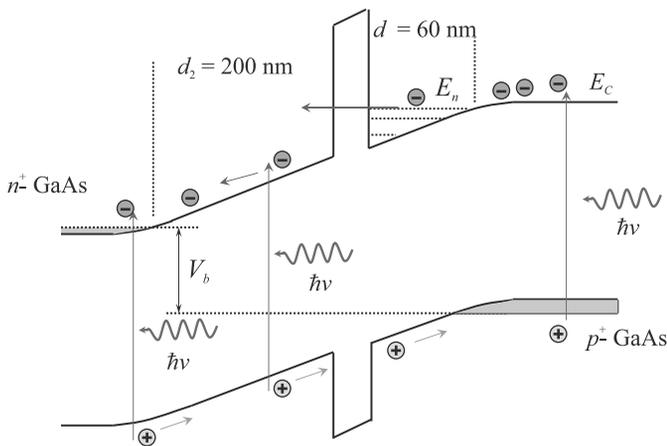


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зонная диаграмма экспериментального образца при $V_b < 1.5 \text{ В}$. Стрелками показаны процессы фотогенерации электронно-дырочных пар и движения носителей в электрическом поле. Пунктирные линии – уровни размерного квантования E_n в ТКЯ, а E_C – дно зоны проводимости в контактном p^+ -слое. Толстая горизонтальная стрелка показывает резонансно-туннельный ток через верхний уровень ТКЯ

ние V_b в сторону отрицательных значений, начиная с $V_b \approx 1.5 \text{ В}$, приводит к движению электронных уровней размерного квантования E_n в треугольной квантовой яме (ТКЯ) вверх по энергии относительно ее дна, но вниз относительно края зоны проводимости

E_C , ограничивающего эту яму справа, приводя к последовательному вхождению в ТКЯ все новых уровней с $E_n \approx E_C$ (см. рис. 1). В моменты совпадения E_n с E_C происходит резкое резонансное увеличение туннельного тока через барьер электронов, возбужденных светом в глубине контактного p -слоя и дошедших в результате диффузии и дрейфа до края ТКЯ с энергией $\sim E_C$. Это обусловлено возникновением для таких электронов аддитивного канала туннелирования через барьер из трехмерных состояний на краю ТКЯ с участием двумерных уровней ямы, что и приводит к осцилляциям фототока [7]. Иначе говоря, мы полагаем, что причиной осцилляций является резонансное туннелирование фотовозбужденных электронов, выходящих из p^+ -слоя с E_C , через барьер с участием уровней ТКЯ, аналогично обычному резонансному туннелированию электронов через двухбарьерные структуры с широкими квантовыми ямами. Хорошее совпадение лестницы напряжений V_b , соответствующей экстремумам осцилляций, с последовательностью моментов совпадения E_n и E_C показано уже в нашей первой работе [5]. При этом в рамках резонансно-туннельного механизма амплитуда осцилляций (I_{osc}) преимущественно определяется числом электронов, возбужденных в p^+ -слое и достигших края ТКЯ с энергией E_C , а величина неосциллирующей компоненты фототока (I_{non}) – аддитивными вкладами токов носителей, генерируемых светом определенной длины волны в остальных областях активной части гетероструктуры. Отметим, что электроны, которые достигают барьера, проходя через монотонный непрерывный спектр над ТКЯ, туннелируют через барьер нерезонансно, давая вклад в неосциллирующую часть фототока. При этом часть электронов рекомбинируют в p^+ области, и вообще не вносят вклад в фототок.

Более детально вклады этих процессов будут описаны ниже, при обсуждении экспериментов и роли λ в нашей расширенной модели.

Для создания оптических мезаструктур диаметром 25–200 мкм применялась стандартная технология химического травления. Омические контакты изготавливались путем последовательного напыления слоев AuGe/Ni/Au и отжига при $T = 400^\circ \text{С}$. Вольт-амперные характеристики (ВАХ) были измерены при уровне шума менее 100 фА. Измерения проводились при температуре 4.2–100 К. В качестве источников светового излучения в интервале длин волн λ от 875 до 565 нм был использован спектрофотометр, а в интервале от 565 до 395 нм набор светодиодов.

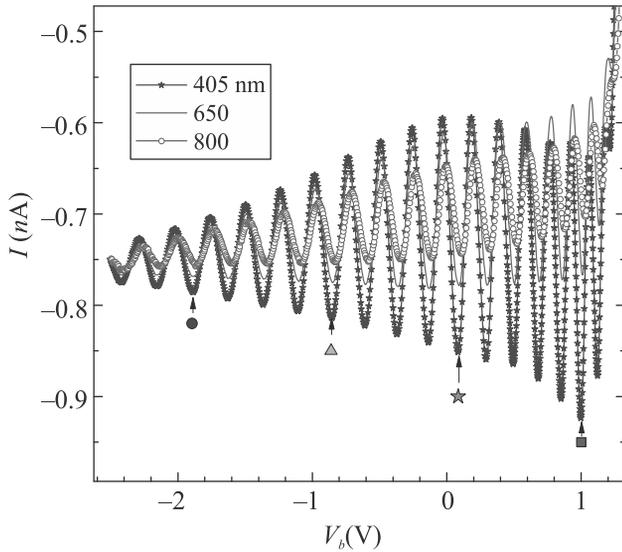


Рис. 2. (Цветной онлайн) ВАХ для трех значений λ в условиях поддержания равенства величин фототока при $V_b = -2.5$ В. Для обеспечения равенства фототоков использовались источники разной мощности. Символами (звездочка, квадрат и др.) отмечены максимумы, зависимости для которых построены на рис. 3

На рисунке 2 представлены обратные ветви ВАХ экспериментальных образцов, измеренные при трех значениях λ и, как и в нашей предыдущей работе по изучению влияния интенсивности света на осцилляции [7], при условии поддержания равенства величин неосциллирующих компонент фототока I_{non} , при $V_b = -2.5$ В, т.е. там, где осцилляции практически исчезают. Такой подход к измерениям позволяет максимально визуализировать влияние λ на относительную амплитуду осцилляций $I_{\text{osc}}/I_{\text{non}}$ и делает наглядной рассматриваемую ниже интерпретацию этого эффекта. Детали этого подхода и ВАХ, измеренные в том же интервале λ более традиционно – при одинаковой интенсивности излучения – приведены в дополнительном материале. ВАХ на рисунке 2 сразу же наглядно демонстрируют сильные изменения величины $I_{\text{osc}}/I_{\text{non}}$ в данном интервале λ . Для анализа поведения этой величины во всем экспериментальном диапазоне λ были построены зависимости $I_{\text{osc}}/I_{\text{non}}(\lambda)$ для максимумов осцилляций при $V_b = 1, 0.085, -0.860$ и -1.895 В (отмеченных на рис. 2 стрелками), где значения I_{osc} и I_{non} определялись согласно выражениям $I_{\text{osc}} = (I_{\text{max}} - I_{\text{min}})$ и $I_{\text{non}} = (I_{\text{max}} + I_{\text{min}})/2$, а I_{max} и I_{min} – величины фототока в соседних экстремумах экспериментальной ВАХ. Из полученных кривых уже достаточно явно видно (см. рис. 3а), что все они изменяются в равной мере с изменением λ , и это, в свою очередь, указыва-

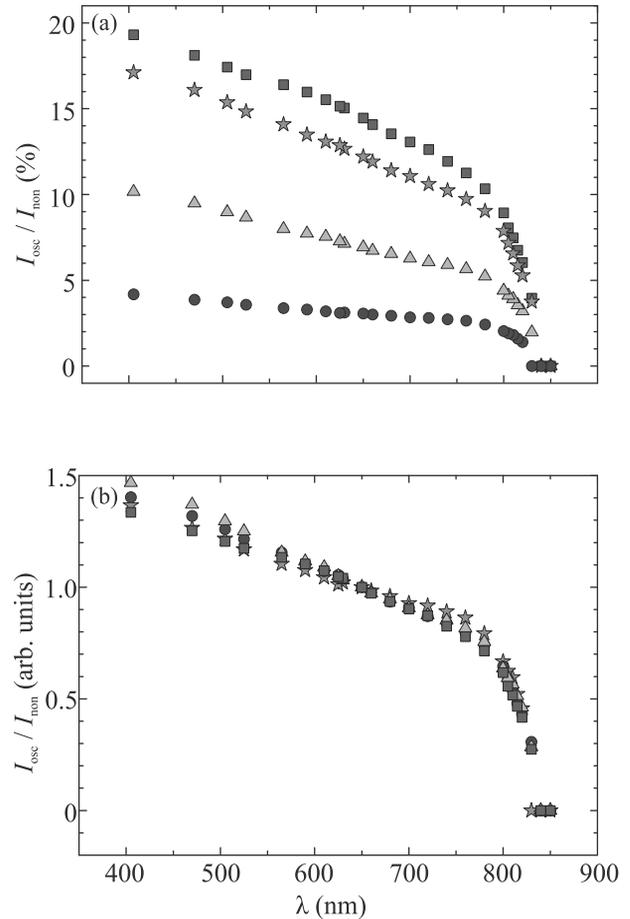


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Зависимости $I_{\text{osc}}/I_{\text{non}}(\lambda)$ для максимумов осцилляций при $V_b = 1$ В (квадраты), $V_b = 0.085$ В (звезды), $V_b = -0.86$ В (треугольники), $V_b = -1.895$ В (кружки) из рис. 2; (б) – Те же зависимости, разделенные на соответствующее значение $I_{\text{osc}}/I_{\text{non}}$ при $\lambda = 650$ нм для каждой кривой с рис. 3а

ет на их универсальный характер. После нормировки каждой из этих зависимостей на соответствующую ей величину $I_{\text{osc}}/I_{\text{non}}$ при $\lambda = 650$ нм, получаем универсальную зависимость, представленную на рис. 3б.

Прежде чем излагать сценарий наблюдаемого нами влияния λ на величину $I_{\text{osc}}/I_{\text{non}}$ в рамках резонансно-туннельной модели, следует еще раз отметить, что, согласно [8, 9], с ростом λ граница эффективного поглощения света, падающего на образец со стороны верхнего p^+ -слоя, монотонно перемещается вглубь образца, последовательно проходя слои p^+, i, n^-, n^+ . Для пояснения масштаба влияния λ на глубину поглощения в нашей структуре отметим, что для $\lambda = 395$ нм менее 1% фотонов смогли бы пройти в глубину p^+ -слоя на расстояние 0.2 мкм, в то время, как для $\lambda = 650$ нм та же доля фотонов проходит далеко в глубину n^+ слоя (до

~ 2 мкм), а порядка 15% проходит через оба i -слоя и достигает границы с n^+ , согласно [8]. Тогда в случае $\lambda < 395$ нм, который здесь не рассматривается, все падающие фотоны поглощаются в p^+ -слое у верхнего края образца и все порожденные светом пары носителей успевают рекомбинировать внутри этого слоя, не успев продиффундировать к краю ТКЯ и не создавая никакого фототока через всю структуру. С ростом λ , когда хвост функции поглощения фотонов только начинает проникать в ТКЯ, появляется фототок, состоящий из двух компонент. Во-первых, формируется канал поставки электронов для процесса резонансного туннелирования через ТКЯ, состоящий только из электронов, сгенерированных в p^+ -слое и дошедших к краю ТКЯ с энергией E_C , определяющий осциллирующую компоненту фототока I_{osc} . Во-вторых, часть электронов, не успевших потерять энергию до E_C по пути из глубины p^+ -слоя к краю ТКЯ или сгенерированных вблизи этого края, будут затем туннелировать через барьер нерезонансно и дадут вклад в неосциллирующую компоненту фототока I_{non} . Дальнейший рост λ приведет к прохождению все большей доли фотонов из падающего потока в i -области структуры и, следовательно, увеличению относительного количества генерируемых в этих слоях носителей, которые вносят вклады только в I_{non} и, в результате, уменьшают отношение I_{osc}/I_{non} . Именно такое монотонное уменьшение I_{osc}/I_{non} с ростом λ , обусловленное плавным изменением баланса вкладов резонансной I_{osc} и нерезонансной I_{non} составляющих при движении границы поглощения вглубь образца, и наблюдается на большей части экспериментальной зависимости $I_{osc}/I_{non}(\lambda)$ (см. рис. 3). Резкий же перелом и последующий быстрый спад этой зависимости может быть обусловлен проявлением эффекта Франца–Келдыша. Так как $\lambda \sim 800$ нм соответствует ширине запрещенной зоны GaAs, этот эффект будет поддерживать в i -слоях (где есть электрическое поле) поглощение фотонов и генерацию электрон-дырочных пар при $\lambda > 800$ нм, в отличие от p^+ -слоя (где поля нет). В результате это будет приводить к дополнительному уменьшению I_{osc}/I_{non} в данном интервале λ .

Измерения поведения фотоосцилляций в перпендикулярном току магнитном поле B_{ort} дали независимое подтверждение представленного выше объяснения зависимости $I_{osc}/I_{non}(\lambda)$, а также применимости резонансно-туннельной модели. Приложение B_{ort} приводило к плавному и практически независимому от λ подавлению величины I_{osc} , представленному на рис. 4а, и смещению положений осцилляций по V_b , которое будет обсуждено чуть ниже. Равен-

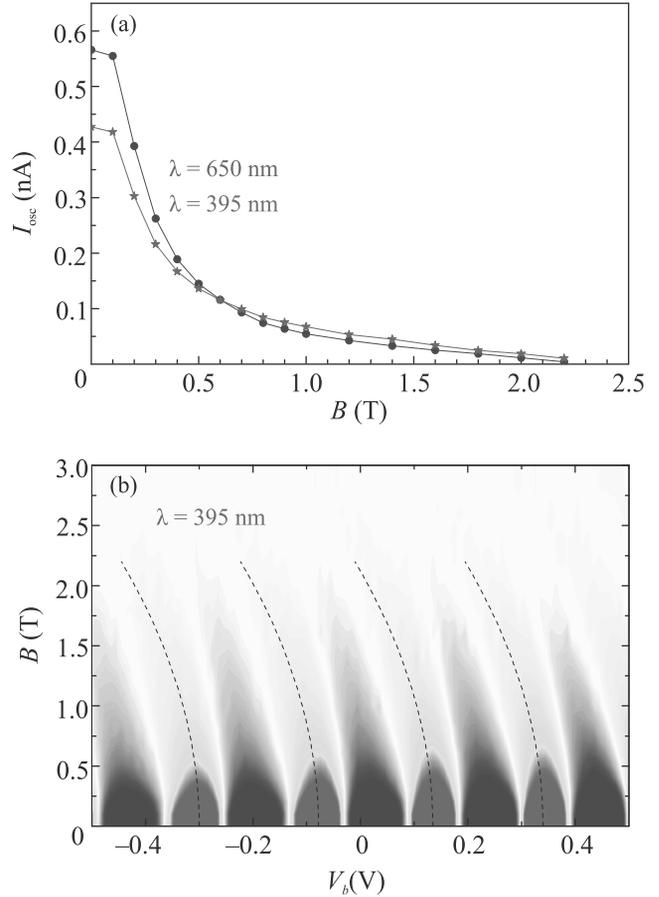


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Зависимости I_{osc} от B_{ort} для $\lambda = 395$ нм (круги) и $\lambda = 650$ нм (звезды); (б) карта dI/dV_b в координатах (V_b, B_{ort}) для $\lambda = 395$ нм, пунктирными линиями показаны рассчитанные положения максимумов фотопроводимости

ство же подавления I_{osc} для разных λ также объяснимо в рамках нашей модели неизменностью λ процесса, определяющего величину I_{osc} – резонансного туннелирования электронов из p^+ -слоя. В таком случае, подавление I_{osc} обусловлено тем же механизмом, что и в случае подавления и смещения резонансов полем B_{ort} при туннелировании через двухбарьерные $n-i-n$ структуры с широкими квантовыми ямами в [4], которое вызвано влиянием силы Лоренца на туннелирующий электрон, приводящим к смещению параболоидов для дисперсионных соотношений, соответствующих начальным и конечным электронным состояниям в k -пространстве, друг относительно друга на величину $\Delta k = eB_{ort}\Delta s/\hbar$. Это вызывает изменение как напряжений резонансов, так и областей пересечения параболоидов, определяющих величины резонансных токов. При этом в реальном пространстве начальные и конечные состоя-

ния находятся на дистанции туннелирования Δs , а сдвиг резонансного напряжения определяется формулой $e\Delta V_b = f(eB_{\text{ort}}\Delta s)^2/2m^*$, где f – коэффициент пропорциональности между напряжением V_b и энергией. Как и в случае [4, 10], кроме подавления I_{osc} , нами также наблюдалось квадратичное смещение положений фотоосцилляций по напряжению с ростом B_{ort} в сторону увеличения электрического поля, представленные на рис. 4б, где пунктирные линии показывают траектории сдвигов осцилляций, рассчитанные в соответствии с формулой из [4, 10] в предположении, что $\Delta s = 40$ нм и $f = 10$. Значение f получено нами из обработки емкостных измерений, а величина $\Delta s = 40$ нм указывает на то, что переходы электронов в ТКЯ происходят из области обеднения на ее границе с p^+ -слоем. Такое значение Δs и поведение осцилляций в B_{ort} показывают, что процессы переходов между электронными состояниями в p^+ -слое и ТКЯ носят именно туннельный характер и, таким образом, являются независимым подтверждением применимости нашей резонансно-туннельной модели осцилляций. Для дополнительной проверки механизма подавления I_{osc} нами было экспериментально изучено магнитотуннелирование в подобной [4] $n-i-n$ двухбарьерной структуре с КЯ шириной 60 нм (т.е., с приблизительно тем же значением Δs , определяющим при резонансном туннелировании величину эффекта подавления [4, 10]), которое показало квадратичный сдвиг и подавление резонансных особенностей в $B_{\text{ort}} \approx 2$ Т, как и в случае наших измерений осцилляций фототока (см. рис. S2 в дополнительном материале).

Наконец отметим, что обнаруженное подобие магнитополевого поведения фотоосцилляций и туннельных резонансов в традиционных РТД структурах, совершенно неожиданное априори, может иметь также вполне самостоятельное и гораздо более общее значение, так как указывает либо на возможность существования реального потенциального барьера для электронов с $E \approx E_C$ на границе между p^+ -слоем и ТКЯ, либо на проявление эффекта “надбарьерного” отражения от границы p^+ /ТКЯ, как в [11], играющего роль “барьера” для туннельных переходов электронов между состояниями в p^+ -слое и ТКЯ. Обе эти версии, однако, требуют дополнительного изучения и проверки в будущем.

Как результат, нами обнаружено сильное влияние длины световой волны λ на относительный вклад осциллирующей компоненты фототока $I_{\text{osc}}/I_{\text{пон}}$ в однобарьерных GaAs/AlAs $p-i-n$ гетероструктурах. Эффект объяснен с помощью расширенной резонансно-

туннельной модели осцилляций, в рамках которой влияние λ обусловлено изменением глубины поглощения света. Поведение осцилляций в B_{ort} оказалось подобным туннельным резонансам в структурах с широкими квантовыми ямами, что подтверждает нашу интерпретацию роли λ и применимость резонансно-туннельной модели осцилляций. Обнаруженная сильная зависимость амплитуды осцилляций от λ может быть использована при конструировании новых устройств нанопотоники на базе $p-i-n$ гетероструктур. Мы полагаем, что как и другие структуры с N -образными областями ВАХ и участками отрицательного дифференциального сопротивления (ОДС), например, традиционные резонансно-туннельные диоды, наша система с осциллирующей ВАХ может иметь перспективы применения в качестве базового элемента для реализации таких электронных устройств, как генераторы, преобразователи частоты и логические элементы. Продемонстрированная же в данной работе возможность прямого управления осцилляциями (т.е. параметрами области ОДС, определяющими, в частности, и частоту генерации) с помощью изменения длины световой волны, делает их потенциально интересными и для комбинированных оптоэлектронных приложений.

Авторы выражают благодарность М. Хенини (M. Henini, University of Nottingham, UK) за изготовление образцов. Работа выполнена в рамках Госзадания # 075-00355-21-00.

1. T. W. Hickmott, P. M. Solomon, F. F. Fang, F. Stern, R. Fischer, and H. Morkoc, Phys. Rev. Lett. **52**, 2053 (1984).
2. M. Alikacem, D. K. Maude, L. Eaves, M. Henini, G. Hill, and M. A. Pate, Appl. Phys. Lett. **59**, 3124 (1991).
3. T. M. Fromhold, L. Eaves, F. W. Sheard, M. L. Leadbeater, T. J. Foster, and P. C. Main, Phys. Rev. Lett. **72**, 2608 (1994).
4. M. L. Leadbeater, E. S. Alves, L. Eaves, M. Henini, O. H. Hughes, A. Celeste, J. C. Portal, G. Hill, and M. A. Pate, J. Phys.: Condens. Matter **1**, 4865 (1989).
5. E. E. Vdovin, M. Ashdown, A. Patane, L. Eaves, R. P. Campion, Yu. N. Khanin, M. Henini, and O. Makarovskiy, Phys. Rev. B **89**, 205305 (2014).
6. Ю. Н. Ханин, Е. Е. Вдовин, О. Макаровский, М. Хенини, Письма в ЖЭТФ **102**(11), 830 (2015).
7. Е. Е. Вдовин, Ю. Н. Ханин, Письма в ЖЭТФ **113**(9), 605 (2021).
8. H. C. Casey, D. D. Sell, and K. W. Wecht, J. Appl. Phys. **46**, 250 (1975).

9. A. E. Belyaev, S. A. Vitusevich, L. Eaves, P. C. Main, M. Henini, A. Forster, W. Reetz, and S. V. Danylyuk, *Nanotechnology* **13**, 94 (2002).
10. A. Patanè, A. Polimeni, L. Eaves, P. C. Main, M. Henini, Yu. Y. Dubrovskii, A. E. Belyaev, P. N. Brounkov, E. E. Vdovin, Yu. N. Khanin, and G. Hill, *J. Appl. Phys.* **88**, 2005 (2000).
11. Е. Е. Вдовин, Ю. В. Дубровский, И. А. Ларкин, Ю. Н. Ханин, Т. Андерссон, *Письма в ЖЭТФ* **61**(7), 566 (1995).

О физике и атомных механизмах интеркаляции молекулярного водорода в графитовые нановолокна

Ю. С. Нечаев⁺, Е. А. Денисов^{*1)}, Н. А. Шурыгина⁺, А. О. Черетаева[×], Е. К. Костикова[°], С. Ю. Давыдов[∇]

⁺ Научный центр металловедения и физики металлов,
Центральный научно-исследовательский институт черной металлургии им. И. П. Бардина, 105005 Москва, Россия

^{*} Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 С.-Петербург, Россия

[×] Научно-исследовательский институт прогрессивных технологий,
Тольяттинский государственный университет, 445020 Тольятти, Россия

[°] Институт прикладных математических исследований,
Карельский научный центр Российской академии наук, 185910 Петрозаводск, Россия

[∇] Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 13 августа 2021 г.

После переработки 24 августа 2021 г.

Принята к публикации 25 августа 2021 г.

В настоящем исследовании представлены результаты детального анализа, полученные с использованием эффективной методики обработки термодесорбционных спектров водорода, фундаментальных экспериментальных данных Башкина и др. о трех состояниях водорода (# 1, # 2 и # 3), отвечающих физической сорбции, хемосорбции и интеркаляции, в графитовых нановолокнах (ГНВ), подвергнутых гидрированию в H_2 при давлении 9 ГПа и температуре 753 К (с последующей закалкой), что приводило к содержанию водорода до 6.3 вес. %. В частности, в настоящей работе внимание сосредоточено на раскрытии физики и атомных механизмов интеркаляции в ГНВ специфического молекулярного водорода (состояние # 3), несколько более стабильного, чем хемосорбированный водород (состояние # 2), а также на сопоставлении с результатами анализа и интерпретации известных уникальных данных Родригез и др. по “супер” хранению водорода в “ноу-хау” активированных ГНВ.

DOI: 10.31857/S1234567821180075

В работе [1] получены фундаментальные результаты изучения (с использованием нескольких экспериментальных методов исследования) состояний водорода в графитовых нановолокнах (в материале содержалось около 90 % графитовых нановолокон (ГНВ)), подвергнутых воздействию молекулярного водорода при давлении 9 ГПа, сначала при температуре $T = 623$ К (выдержка $\Delta t = 18$ ч), а затем при $T = 723$ К ($\Delta t = 6$ ч) с последующим охлаждением (закалкой) до 133 К и “разгрузением” (при этой температуре) до атмосферного давления. Это в конечном счете приводило к суммарному содержанию водорода в материале до $C_{H\Sigma} = 6.3$ вес. % (получено посредством взвешивания продуктов горения материала).

В работе [1] изучали также одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ), содержание которых в полученном материале не превышало 50–60 % (остальное сажа); суммарное содержание водорода в мате-

риале достигало $C_{H\Sigma} = 6.8$ вес. %. Дальнейшее экспериментальное изучение состояний водорода в ОУНТ, подвергнутых воздействию молекулярного водорода при давлении ~ 5 ГПа и температуре ~ 770 К, проведено в работах [2–5].

В работе [1], которую цитируют и в последующих работах [2–5], отмечено, что изменение картин рентгеновской дифракции свидетельствует о “распухании” кристаллической решетки ГНВ при гидрировании (до $C_{H\Sigma} = 6.3$ вес. %) и о почти полном возвращении к исходной структуре после удаления около 5.1 вес. % водорода (при нагреве материала до 873 К (рис. 1 в [1])) до остаточного содержания $C_{H(resid.)} \approx 1.2$ вес. %. Отмечено [1], что наблюдаемое смещение пика (002) при поглощении 6.3 вес. % водорода может указывать на увеличение межплоскостного расстояния в ГНВ на 40 %, от 3.36 до 4.67 Å. Методом ИК спектроскопии установлено [1], что гидрирование приводит к возрастанию пропускания света наноматериалом в изученном диапазоне энергий 400–5000 cm^{-1} , характерных для валентных колеба-

¹⁾e-mail: yuri1939@inbox.ru

ний С–Н связи. Удаление из ГНВ около 40% поглощенного под давлением водорода подавляет колебательные пики С–Н связи.

Совокупность экспериментальных данных [1] (в том числе из рис. 1 в [1]) свидетельствует о трех возможных состояниях водорода в гидрированных и закаленных под давлением ГНВ, а именно: 1) (состояние # 1) малая часть водорода (до $C_{H(\#1)} \approx 0.15$ вес. %) сохраняется при 77 К в виде слабо связанных адсорбированных молекул и выделяется (при нагреве, см. рис. 1 в [1]) при температурах ниже и около комнатной; 2) (состояние # 2) значительная часть водорода (до $C_{H(\#2)} \approx 2.5$ вес. %) образует С–Н ковалентные связи (согласно ИК спектроскопии), т.е. находится в хемосорбционном состоянии, и выделяется (при нагреве, рис. 1 в [1]) при температурах около 820 К; 3) (состояние # 3) значительная часть водорода ($C_{H(\#3)} \approx 2.6$ вес. %) находится в специфическом молекулярном состоянии, которое авторы [1] называют “новым состоянием” (“неактивным” к ИК спектроскопии), располагается (по мнению авторов [1]) между графеновыми слоями и выделяется при температурах около 840 К, т.е. оно несколько более стабильно, чем хемосорбционное состояние; 4) (состояние # 3*) существенная часть водорода ($C_{H(\#4)} \approx C_{H(\text{resid.})} \approx 1.2$ вес. %) находится в еще более стабильном (очевидно, также “неактивным” к ИК спектроскопии) состоянии и проявляется при втором (дополнительном) нагреве материала до 873 К (рис. 1 в [1]), а также при взвешивании продуктов горения материала.

Близкие результаты получены в работе [1] и для ОУНТ. Однако физика специфического молекулярного состояния (# 3 и # 3*) водорода в ГНВ и ОУНТ в работах [1–5] не раскрывается, при этом данные из рис. 1 в [1] не обработаны в полной мере, а предположение [1] об увеличении межплоскостного расстояния в ГНВ на 40% (при поглощении 6.3 вес. % водорода) не согласуется с представленными ниже оценками локального давления водорода.

В настоящем исследовании внимание сосредоточено на анализе (с использованием методологии [6–12] и результатов [13–16]) экспериментальных данных [1] (главным образом, из рис. 1 в [1]) для ГНВ, и, в частности, на раскрытии физики и атомных механизмов интеркаляции такого специфического молекулярного водорода (состояние # 3 и # 3*) в ГНВ, а также на сопоставлении с результатами [17–20] анализа и интерпретации уникальных экспериментальных данных [21–23] по “супер” хранению “обратимого” ($\sim 38 \pm 10$ вес. %) и “необратимого” ($\sim 11 \pm 3$ вес. %) водорода в “ноу-хау” активированных ГНВ.

На рисунке 1 в [1] представлены кривые температурной зависимости давления (P_{H_2}) и соответствующего ему количества водорода (C_H , вес. %), выделившегося из образца при нагреве со скоростью $\beta = 0.33$ К/с для ГНВ, насыщенных водородом при давлении 9 ГПа и температурах до 723 К. Поскольку водород из рабочей камеры в этих экспериментах не откачивался, то десорбционный поток водорода (J_H) здесь пропорционален производной P_{H_2} (или C_H) по времени (см., например, общепринятое выражение (1) в работе [12]). В этой связи целесообразно отметить, что в работе [12] был реализован другой крайний (типичный) случай, когда скорость откачки газа из камеры достаточно высока, а десорбционный поток водорода (J_H) пропорционален давлению водорода в камере P_{H_2} (см. выражение (1) в [12]).

Согласно методологии [6–12], посредством дифференцирования кривых (C_H/β) по температуре, что отвечает дифференцированию кривых C_H по времени (поскольку при нагреве с постоянной скоростью $dT = \beta dt$), можно получить термодесорбционные спектры водорода для ГНВ, представленные на рис. 1а, б. Результаты обработки этих спектров с использованием методики [8] представлены в табл. 1.

Методика [8] содержит несколько последовательных этапов ее реализации, в том числе аппроксимацию таких спектров симметричными гауссианами, отвечающими различным температурам (T_{max}) максимальной скорости десорбции.

Второй этап методики включает обработку гауссианов в приближении сорбционных процессов (реакций) первого или второго порядка, при этом использовали [8] соответствующие кинетические уравнения:

$$-\left(\frac{1}{\beta}\right) \frac{dC}{dt} = -\frac{dC}{dT} = K \frac{C}{\beta} = K_0 \left(\frac{C}{\beta}\right) \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right), \quad (1)$$

$$\begin{aligned} -\left(\frac{1}{\beta}\right) \frac{dC}{dt} &= -\frac{dC}{dT} = K \frac{C^2}{C_0\beta} = \\ &= K_0 \left(\frac{C^2}{C_0\beta}\right) \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right), \quad (2) \end{aligned}$$

в которых t – время; T – температура; R – универсальная газовая постоянная; $C = C_H$ – концентрация водорода в исследуемом материале, отвечающая рассматриваемому гауссиану для данной температуры T и времени нагрева t , $C_0 = C_{H0}$ – концентрация при $t = 0$.

Из температурной зависимости потока десорбции ($(-dC/dt) = J_H$), деленного на скорость нагрева (β), определяли значения констант скорости десорбции

Таблица 1. Результаты обработки при помощи методики [8] (в приближении реакций первого и второго порядка) термодесорбционных спектров водорода (из рис. 1а, б) для ГНВ. Здесь: T_{\max} – температура наибольшей скорости десорбции для данного пика; Q – энергия активации десорбции для данного пика; K_0 – предэкспоненциальный фактор константы скорости десорбции для данного пика

Номер пика	T_{\max} , К	Q , кДж/моль	K_0 , 1/с	Доля пика в спектре	C_{H_0} , вес. %
Реакция первого порядка					
1	245	12.7	4.4	0.022	0.13
2	839	240	$1.2 \cdot 10^{13}$	0.978	5.7
Реакция второго порядка					
1	245	25	$3.1 \cdot 10^3$	0.016	0.11
2	833	307	$3.0 \cdot 10^{17}$	0.984	6.5

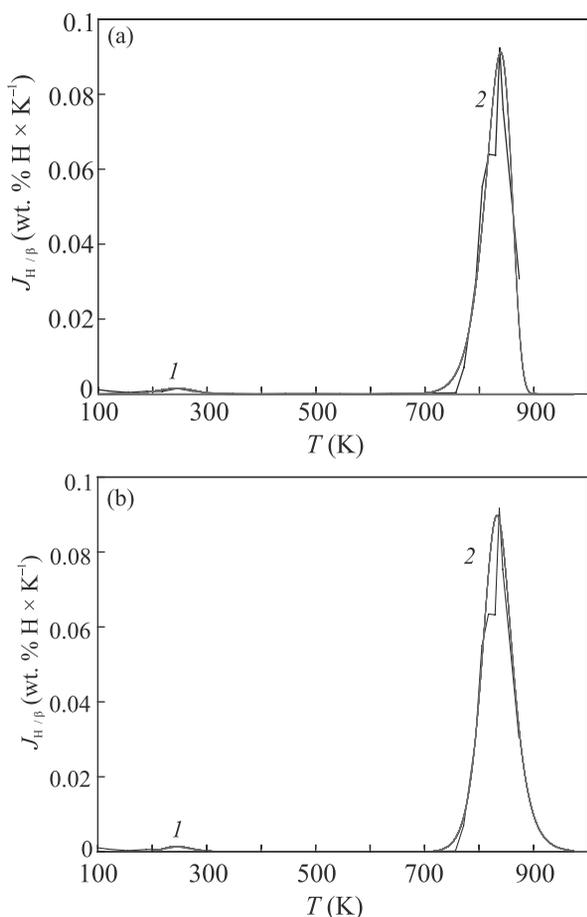


Рис. 1. (Цветной онлайн) Температурная зависимость термодесорбционного потока водорода (J_H), разделенного на скорость нагрева ($\beta = 0.33$ К/с), в ГНВ [1], насыщенных водородом при давлении 9 ГПа и температурах до 723 К: (а) – аппроксимация [8] спектра двумя пиками (#1 и #2) в приближении реакций первого порядка; (б) – аппроксимация [8] спектра двумя пиками (#1 и #2) в приближении реакций второго порядка

водорода (K) при различных температурах (в определенном температурном интервале около T_{\max}); отсюда, используя уравнение Аррениуса, определяли

значения энергий активации (Q) и предэкспоненциальных множителей (K_0) констант скорости десорбции водорода. Уточнение полученных значений T_{\max} , Q и K_0 проводили с помощью методов численного моделирования [9] термодесорбционных спектров в приближении пиков для процессов (реакций) первого или второго порядка (см. рис. 1а, б и табл. 1).

Анализ [8] полученных характеристик для пика #1 (табл. 1, рис. 1), отвечающего состоянию водорода #1, показывает, что десорбционный процесс протекает как реакция первого порядка, при этом лимитирует диффузия молекул водорода в рабочей камере (в газе), сопровождающаяся их обратимым захватом “центрами” физической сорбции в ГНВ. Энергия активации такой диффузии ($Q_{\#1}$) близка к энергии связи диффузанта с “центрами” физической сорбции молекул водорода в углеродных наноматериалах [6, 13]. Предэкспоненциальный фактор константы скорости такого процесса описывается известным выражением $K_{0\#1} \approx (D_{0\#1}/L^2)$, где величина $L \approx 0.5$ см отвечает характеристическому диффузионному размеру, близкому (по порядку величины) к размеру рабочей камеры, а величина $D_{0\#1} \approx 1$ см²/с отвечает предэкспоненциальному фактору эффективного коэффициента диффузии водорода (с “разбросом” возможных значений не более двух порядков [6]).

Анализ [6, 8] полученных характеристик для пика #2 (табл. 1, рис. 1), очевидно, отвечающего состояниям водорода #2 и #3, показывает, что десорбционный процесс может протекать как реакция второго порядка, при этом лимитирует “отрыв” молекул водорода от поверхности материала (возможны хемосорбционные модели “F” и/или “G”, показанные на рис. 8 в [6]).

При рассмотрении предположения [1] об увеличении межплоскостного расстояния в ГНВ на 40% (при поглощении 6.3 вес. % водорода) можно воспользоваться оценками работы [14], где для описа-

ния межслойной связи атомов графена использовались двухатомный потенциал Леннарда–Джонса и теория ван-дер-ваальсовой адгезии эпитаксиального графена [15], а также данные [16] об энергии ван-дер-ваальсовой связи (на единицу площади). Тогда получаем (в приближении идеального газа), что для того, чтобы раздвинуть графеновые плоскости до 4.67 \AA , требуется локальное давление водорода $\sim 1 \text{ ГПа}$. Полученная таким образом величина на порядок ниже давления (9 ГПа), применявшегося в работе [1]. Отсюда следует, что при 9 ГПа должно происходить существенно большее “распухание” кристаллической решетки ГНВ (при гидрировании до $C_{H2} = 6.3 \text{ вес. \%}$), чем отмечено в работе [1].

Физику и атомные механизмы интеркаляции в ГНВ [1] молекулярного водорода, “неактивного” к ИК спектроскопии (состояния #3 и #3*), можно описать при помощи водородного спилловер эффекта и явления Курдюмова по термоупругому равновесию фаз, как это сделано в работах [7, 17–20] при анализе и интерпретации уникальных экспериментальных данных [21–23] по “супер” хранению водорода в “ноу-хау” активированных ГНВ.

Имеются основания [7, 17–20] предполагать, что в ГНВ [1] (при насыщении водородом при давлении 9 ГПа и температурах до 723 К) в областях около частиц металлического катализатора образуются (из-за локальных напряжений и деформаций) закрытые (в определенном смысле) углеродные (графеновые) нанополости (см. рис. 24 в [7]), в которые проникают через определенные дефекты атомы водорода и ассоциируют там в молекулы, не способные выйти обратно через те же дефекты, что приводит к возникновению в этих наноплоскостях более высокого (чем 9 ГПа) локального давления водорода (за счет энергии ассоциации атомов водорода в молекулы).

В рамках такой модели можно объяснить и количественно описать интеркаляцию в ГНВ [1] специфического молекулярного водорода (состояния #3 и #3*), несколько более стабильного, чем хемосорбированный водород (состояние #2). При этом целесообразно принять во внимание результаты работ [24–28].

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект #18-29-19149 мк).

Авторы работы выражают также искреннюю признательность М. М. Бржезинской за плодотворную дискуссию.

-
1. И. О. Башкин, В. Е. Антонов, А. В. Баженов, И. К. Бдикин, Д. Н. Борисенко, Е. П. Криничная,

- А. П. Моравский, А. И. Харкунов, Ю. М. Шульга, Ю. А. Осипьян, Е. Г. Понятовский, Письма в ЖЭТФ **79**, 280 (2004) [JETP Lett. **79**, 226 (2004)].
2. Ю. М. Шульга, И. О. Башкин, А. В. Крестинин, В. М. Мартыненко, Г. И. Зверева, И. В. Кондратьева, Ю. А. Осипьян, Е. Г. Понятовский, Письма в ЖЭТФ **80**, 884 (2004) [JETP Lett. **80**, 752 (2004)].
3. K. P. Meletov, A. A. Maksimov, I. I. Tartakovskii, I. O. Bashkin, V. V. Shestakov, A. V. Krestinin, Yu. M. Shulga, K. S. Andrikopoulos, J. Arvanitidis, D. Chistofilos, and G. A. Kourouklis, Chem. Phys. Lett. **433**, 335 (2007).
4. M. Brzhezinskaya, V. Shamko, G. Yalovega, A. Krestinin, I. Bashkin, and E. Bogoslavskaja, J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena **196**, 99 (2014).
5. M. Brzhezinskaya, E. A. Belenkov, V. A. Greshnyakov, G. E. Yalovega, and I. O. Bashkin, J. Alloys Comp. **792**, 713 (2019).
6. Ю. С. Нечаев, УФН **176**, 581 (2006) [Phys.-Uspekhi **49**, 563 (2006)].
7. Yu. S. Nechaev and T. N. Veziroglu, Int. J. of Phys. Sci. **10**, 54 (2015).
8. Yu. S. Nechaev, N. M. Alexandrova, A. O. Cheretaeva, V. L. Kuznetsov, A. Öchsner, E. A. Kostikova, and Yu. V. Zaika, Int. J. Hydrogen Energy **45**, 25030 (2020).
9. Ю. В. Заика, Е. К. Костикова, Ю. С. Нечаев, Журнал технической физики **91**, 232 (2021) [Technical Physics **66**, 210 (2021)].
10. Ю. С. Нечаев, Н. М. Александрова, Н. А. Шурыгина, А. О. Черетаева, Е. А. Денисов, Е. К. Костикова, Изв. РАН, Серия физическая **85**, 918 (2021).
11. Yu. S. Nechaev, N. M. Alexandrova, N. A. Shurygina, A. O. Cheretaeva, E. K. Kostikova, and A. Öchsner, J. Nucl. Mater. **535**, 152162 (2020).
12. X. Zhao, R. A. Outlaw, J. J. Wang, M. Y. Zhu, G. D. Smith, and B. J. Holloway, J. Chem. Phys. **124**, 194704 (2006).
13. I. Nayyar, B. Ginovska, A. Karkamkar, T. Gennett, and T. Autrey, J. Carbon Res. **6**, 1 (2020).
14. С. Ю. Давыдов, ФТТ **60**, 808 (2018).
15. Z. H. Aitken and R. Huang, J. Appl. Phys. **107**, 123531 (2010).
16. W. Wang, S. Dai, X. Li, D. J. Srolovitz, and Q. Zheng, Nat. Commun. **6**, 7853 (2015).
17. Yu. S. Nechaev, N. M. Alexandrova, N. A. Shurygina, and A. O. Cheretaeva, Nanotubes and Carbon Nanostructures **28**, 233 (2020).
18. Ю. С. Нечаев, Е. А. Денисов, Н. М. Александрова, Н. А. Шурыгина, А. О. Черетаева, Е. К. Костикова, А. Öchsner, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования **2** (2022) (в печати).

19. Yu. S. Nechaev, E. A. Denisov, A. O. Cheretaeva, Yu. V. Gavrilov, and S. V. Verzhichinskaya, in *Book of Abstracts, 15th Intern. Conf. "Advanced nanostructures" (ACNS'2021)*, St.-Petersburg (2021), p. 131.
20. Yu. S. Nechaev, in *Book of Abstracts. 7th Edition of International Conference on Catalysis, Chemical Engineering and Technology*, Magnus Group, Tokyo (2021), p. 38.
21. C. Park, P. E. Anderson, A. Chambers, C. D. Tan, R. Hidalgo, and N. M. Rodriguez, *J. Phys. Chem. B* **103**, 10572 (1999).
22. R. T. K. Baker, *Encyclopedia of Materials: Science and Technology*, Elsevier Ltd., Amsterdam (2005), p. 932.
23. B. K. Gupta, R. S. Tiwari, and O. N. Srivastava, *J. Alloys Compd.* **381**, 301 (2004).
24. А. А. Артюх, Л. А. Чернозатонский, *Письма в ЖЭТФ* **109**, 481 (2019).
25. В. А. Демин, Д. Г. Квашнин, П. Ванчо, Г. Марк, Л. А. Чернозатонский, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 319 (2020).
26. А. И. Подливаев, *Письма в ЖЭТФ* **110**, 692 (2019).
27. А. И. Подливаев, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 728 (2020).
28. А. И. Подливаев, К. С. Гришаков, К. П. Катин, М. М. Маслов, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 182 (2021).

Андерсоновская локализация в двумерной электронно-дырочной системе

З. Д. Квон^{+*}, Е. Б. Ольшанецкий⁺¹⁾, М. А. Дрофа⁺, Н. Н. Михайлов⁺

⁺ Институт физики полупроводников, 630090 Новосибирск, Россия

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

Поступила в редакцию 12 августа 2021 г.

После переработки 25 августа 2021 г.

Принята к публикации 25 августа 2021 г.

В сильно разупорядоченной двумерной электронно-дырочной системе в квантовой яме на основе HgTe обнаружена андерсоновская локализация, поведение которой принципиальным образом отличается от наблюдаемого в широко изученных двумерных однокомпонентных электронных и дырочных системах. Установлено, что в системе происходит двухступенчатая локализация: первыми локализуются двумерные дырки, как частицы с почти на порядок большей эффективной массой, чем у электронов. Затем происходит локализация электронов. Также найдено, что в исследуемой системе отсутствует переход металл-изолятор: даже при значениях проводимости $\sigma > e^2/h$ наблюдается диэлектрическая температурная зависимость. Полученные результаты впервые поднимают вопрос о характере андерсоновской локализации в двумерной электронно-дырочной системе.

DOI: 10.31857/S1234567821180087

Андерсоновская локализация и переход металл-изолятор относятся к наиболее фундаментальным квантовомеханическим явлениям, с тех пор как они впервые были рассмотрены в основополагающей работе [1]. Особую актуальность они приобрели с появлением двумерных электронных систем и гипотезы о том, что двумерного металла не существует [2, 3]. Наконец указанная проблема приобрела новый импульс, когда переход металл-изолятор был обнаружен в двумерных системах экспериментально [4, 5] вопреки упомянутой гипотезе, и был поднят вопрос о роли эффектов взаимодействия в локализации и условиях возникновения коллективных состояний, подобных вигнеровскому кристаллу [6–11]. Из последних работ на обсуждаемую тему следует отметить [12].

Двумерные электронно-дырочные системы в HgTe ямах спустя более десяти лет после их обнаружения по-прежнему являются предметом интенсивных исследований [13, 14]. В данной работе впервые рассматривается поведение андерсоновской локализации в сильно разупорядоченной двумерной электронно-дырочной системе, когда она происходит при одновременном существовании электронов и дырок. Такой системой оказался обнаруженный недавно двумерный полуметалл (ДП) в 14 нм

HgTe яме [15], характеризуемый перекрытием зон, аналогичным тому, что наблюдается в широко исследованных ДП в ямах толщиной 18–22 нм [16–18], но имеющий значительно более низкую подвижность и электронов и дырок. Диэлектрическое состояние в HgTe квантовых ямах ранее изучалось в серии работ [19–21]. Однако все они посвящены случаю очень малого перекрытия зон, когда реализуется ситуация перколяционного или щелевого транспорта. Еще раз отметим принципиально важный факт: величина перекрытия в исследуемой системе не мала, а равна $E_{\text{overlap}} \approx 5$ мэВ [15], т.е. на порядок превышает величины перекрытия в упомянутой серии работ, и влияние возможных флуктуаций толщины ямы [22] на спектр пренебрежимо мало.

Экспериментальные образцы, исследованные в данной работе, представляли собой полевые холловские транзисторы, изготовленные на основе HgTe квантовых ям толщиной 14 нм с ориентацией (013) и снабженные металлическими TiAu затворами. Их более детальное описание дано в [15]. Измерения проводились в диапазоне температур 0.3–10 К, и в магнитных полях до 1 Т с использованием стандартной схемы фазочувствительного детектирования на частотах 0.3–12 Гц и при величинах измерительного тока через образец 0.01–10 нА в зависимости от характера измерений.

¹⁾e-mail: eolsh@isp.nsc.ru

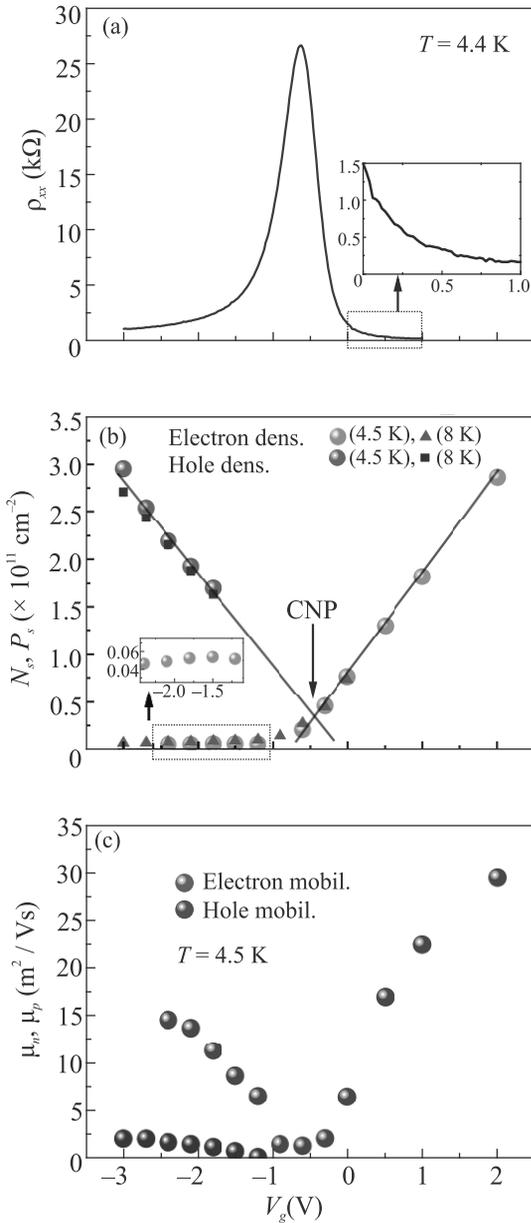


Рис. 1. (Цветной онлайн) (а) – Типичная зависимость $\rho_{xx}(V_g)$ при 4.5 К. (б) – Зависимости концентрации электронов $N_s(V_g)$ и дырок $P_s(V_g)$ от затворного напряжения при двух температурах. (с) – Зависимости подвижности электронов и дырок от затворного напряжения

На рисунке 1а показана типичная зависимость удельного сопротивления (ρ_{xx}) описанных структур от затворного смещения (V_g), измеренная при 4.4 К в диапазоне $-3-1$ В. Она представляет собой кривую с максимумом при $V_g^{\max} = -0.62$ В, где величина ρ_{xx} достигает 27 кОм/квадрат, означающей, что в окрестности максимума величина $k_F l$ (k_F – волновой вектор носителей заряда, l – их длина свобод-

ного изучаемой системы) близка к единице. Отсюда можно сделать вывод, что в окрестности максимума с точки зрения критерия Иоффе–Регеля, изучаемая система близка к переходу металл-изолятор, а при удалении от нее вправо система становится двумерным электронным металлом, а влево – двумерным полуметаллом. На рисунке 1б показаны зависимости концентраций электронов (N_s) и дырок (P_s) при температуре 8 и 4.5 К, а также их подвижности от затворного напряжения при 4.5 К, найденные из магнетотранспортных измерений. Их поведение подтверждает результаты работы [15] и говорит о существовании двумерного полуметалла в 14 нм HgTe квантовых ямах, характеризуемого заметно более низкой подвижностью как электронов так и дырок и, следовательно, значительно более высоким беспорядком, чем ДП в широко изученных ранее ямах толщиной 18–22 нм. Из них также видно, что точка зарядовой нейтральности (ТЗН), в которой $N_s = P_s = 4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ лежит немного правее максимума зависимости $\rho_{xx}(V_g)$. Также обратим внимание, что концентрация и электронов и дырок не меняется с температурой. Рисунок 2а представляет зависимости $\rho_{xx}(V_g)$ при различных температурах в широком диапазоне 0.3–10 К. Они однозначно показывают, что в окрестности максимума исследуемая система демонстрирует хорошо выраженное диэлектрическое поведение, когда сопротивление растет при уменьшении температуры от значений, близких и ниже h/e^2 до величин, превышающих их почти на два порядка, а при значениях затворного напряжения, соответствующих электронному металлу и полуметаллическому состоянию, т.е. при $\rho_{xx} \ll h/e^2$, наблюдается квазиметаллическое поведение, когда ее сопротивление слабо зависит от T . На рисунке 2б и с приведены уже температурные зависимости сопротивления при фиксированных значениях концентрации электронов (рис. 2б) и дырок (рис. 2с) (отметим, что в ТЗН и слева от нее электроны и дырки существуют одновременно), т.е. при движении к ТЗН со стороны электронного металла и при движении к ней со стороны ДП. Из них ясно видно, что поведение зависимостей $\rho_{xx}(T)$ кардинальным образом отличается от того, что наблюдается в однокомпонентных системах [4–6, 8–11]: при всех концентрациях как слева, так и справа от максимума наблюдается диэлектрическое поведение даже при значениях сопротивления $\rho_{xx} \ll h/e^2$. Таким образом, в исследуемой системе не наблюдается переход металл-изолятор.

Обсудим теперь приведенные результаты. Рассмотрим для начала энергетический спектр системы на основе недавней работы [23], в которой получена

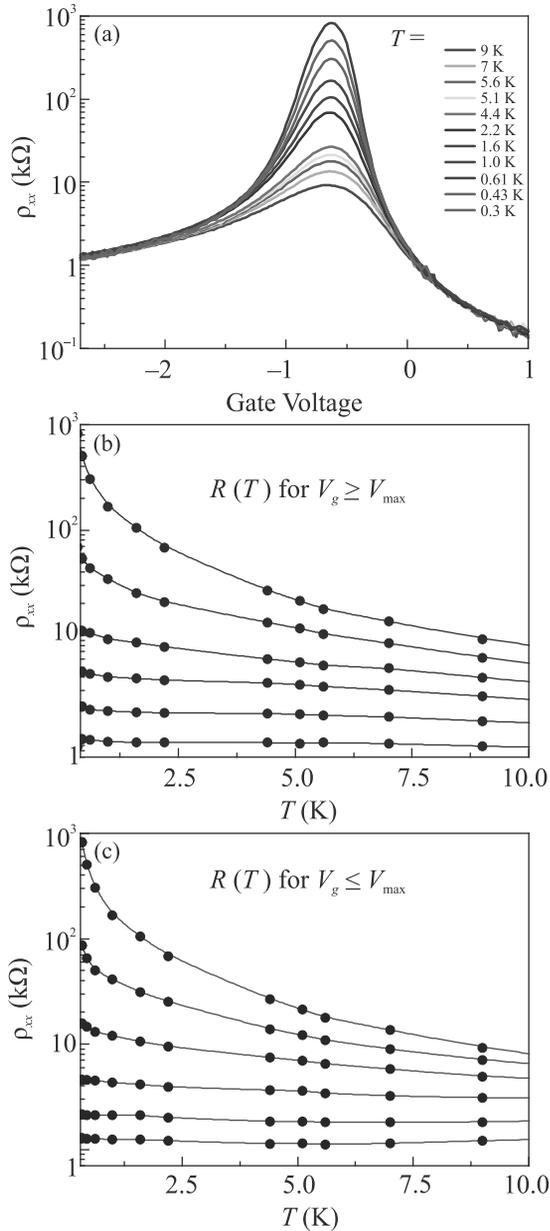


Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Зависимости $\rho_{xx}(V_g)$ при различных температурах в диапазоне 0.3–10 К. (б) – Зависимости $\rho_{xx}(T)$ в максимуме кривой $\rho_{xx}(V_g)$ и справа от него при различных концентрациях электронов (снизу вверх): 8, 6.6, 5.4, 4.4, 3.2, 2 (10^{10} см^{-2}). (с) – Зависимости $\rho_{xx}(T)$ в максимуме кривой $\rho_{xx}(V_g)$ и слева от него при различных концентрациях дырок (снизу вверх): 2.7, 2, 1.45, 1.1, 0.9, 0.2 (10^{11} см^{-2}). Сплошные линии на рис. 2б и с приведены для наглядности

наиболее надежная и детальная информация о нем из экспериментов по циклотронному резонансу, результаты которых хорошо согласуются с теоретическими расчетами. Согласно им эффективная масса электронов равна $m_n = (0.025 - 0.03)m_0$, дырок на

порядок больше $m_p = (0.25 - 0.3)m_0$, а перекрытие зон $E_{\text{overlap}} = (4 - 5)$ мэВ. Отметим, что величина перекрытия, определенная из значений концентраций в ТЗН, хорошо согласуется с указанной. Таким образом, в окрестности ТЗН, где наблюдается ярко выраженное диэлектрическое поведение, мы имеем ранее не рассматриваемую ситуацию, когда локализация происходит в двухкомпонентной электронно-дырочной системе, в которой эффективная масса одних частиц (дырок) на порядок больше, чем эффективная масса других (электронов). Тогда можно предположить существование в указанной системе двухступенчатой локализации: сначала происходит локализация значительно более тяжелых дырок, а затем более легких электронов. Подобное предположение подтверждается поведением эффекта Хола и магнитосопротивления, показанном на рис. 3 и 4. Эти рисунки ясно показывают, что, если при понижении температуры от 8 до 1.6 К, поведение холловского сопротивления $\rho_{xy}(B)$ в ТЗН и справа от нее (т.е. когда транспортный отклик полностью определяется электронами) не изменяется, то слева от нее оно принципиальным образом меняется даже при концентрации дырок $P_s = 1.2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$: в холловской эдс практически полностью исчезает дырочный вклад. Очень интересно ведет себя МС: при 8 К оно при $P_s = 1.2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ меняет знак с положительного при 8 К на отрицательный при 1.6 К, свидетельствуя о начале локализации дырок, а в ТЗН оно уже является полностью отрицательным при 8 К, а при 1.6 К на его зависимости от магнитного поля возникает точка перегиба, которую можно интерпретировать как сумму ОМС высокоподвижных электронов и ОМС низкоподвижных дырок: в малых полях видна только ОМС первых, а более сильных, когда ОМС электронов выходит на насыщение, начинает быстро расти ОМС дырок, в результате чего и возникает указанный перегиб.

Проанализируем теперь полученные результаты на основе предположения, что проводимость исследуемой двумерной электронно-дырочной системы с сильным беспорядком является суммой проводимостей электронной (σ_e) и дырочной (σ_h) невзаимодействующих подсистем:

$$\sigma_{e-h} = \sigma_e + \sigma_h. \quad (1)$$

Если выражение (1) справедливо, то в окрестности ТЗН даже при высокой температуре (10 К) основной вклад в проводимость дают электроны, так как $\sigma_e \approx (3 - 4)e^2/h$, а $\sigma_h \ll e^2/h$. Тогда ключевой результат (рис. 2) можно попытаться рассматривать в рамках электронной проводимости. Поскольку

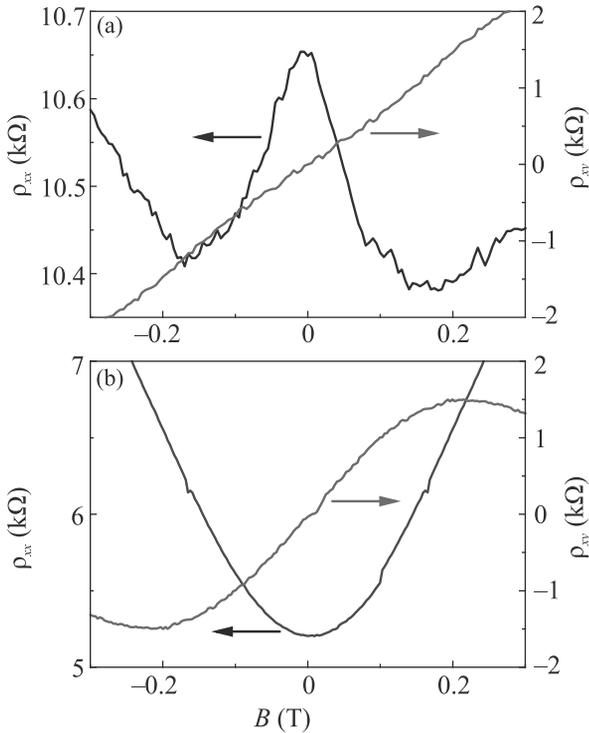


Рис. 3. (Цветной онлайн) Холловское сопротивление $\rho_{xy}(B)$ и магнитосопротивление $\rho_{xx}(B)$ при концентрации дырок $P_s = 1.2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, $V_g = 1.2 \text{ В}$: (а) – при температуре 1.6 К; (б) – при температуре 8 К

ку он, как было отмечено выше, указывает на отсутствие перехода металл-изолятор, то можно провести анализ результатов, приведенных на рис. 2, в рамках скейлинговой модели [2], заменив размер образца температурой, имея в виду тот факт, что при конечной температуре роль характерного размера играет длина фазовой когерентности [24]. Тогда используя температурную зависимость проводимости можно попытаться построить скейлинговую функцию (β), пользуясь температурными зависимостями сопротивления на рис. 2b из выражения [25–27]:

$$\beta = d \ln(g) / d \ln(T) = (T/R)(dR/dT), \quad (2)$$

$g = \sigma / (e^2/h)$. Результат демонстрирует рис. 5, на котором найденная указанным выше способом функция β показана в зависимости от проводимости. Как хорошо видно, ее поведение полностью противоречит поведению, предсказанному в [2] и наблюдавшемуся в [26, 27]: хотя $\beta < 0$ при всех значениях проводимости, она с увеличением g растет по абсолютной величине, а не падает. Такое поведение можно было бы связать с эффектами электрон-электронного взаимодействия. Оценим его силу через параметр Вигнера-Зейтца $r_s = (\pi N_s)^{-1/2} / a^*$, где $a^* = \epsilon_{QW} \hbar^2 / m_n e^2$ –

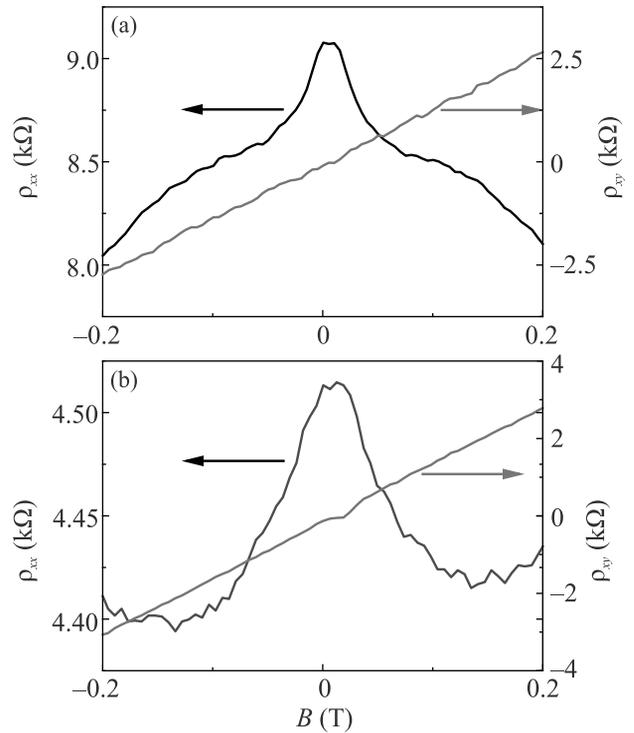


Рис. 4. (Цветной онлайн) Холловское сопротивление $\rho_{xy}(B)$ и магнитосопротивление $\rho_{xx}(B)$ в точке зарядовой нейтральности ($N_s = P_s = 4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$), $V_g = -0.3 \text{ В}$: (а) – при температуре 1.6 К; (б) – при температуре 8 К

боровский радиус электронов в HgTe квантовой яме. Оценка дает величину $r_s < 1$ для электронов в ТЗН и справа от нее, т.е. в диапазоне концентраций $N_s = (4 \cdot 10^{10} - 10^{11}) \text{ см}^{-2}$. Столь малая величина r_s обусловлена большой величиной диэлектрической проницаемости ($\epsilon_{QW} = 15$ в HgTe квантовых ямах), а также значительно меньшей эффективной массой электронов, чем в Si и GaAs. В этом отношении ДЭС в HgTe квантовой яме наиболее близка к случаю невзаимодействующих электронов. Тем не менее, как показывают результаты экспериментального определения функции β , приведенные на рис. 5а, поведение локализации в исследуемой системе не описывается в рамках однопараметрического скейлинга. И здесь необходимо заметить, что при анализе поведения проводимости в максимуме сопротивления и справа от него мы полностью пренебрегли тем фактом, что описанная электронная локализация происходит в области хвоста зоны локализованных дырок. И, возможно, отсутствие однопараметрического скейлинга является следствием того, что флуктуационный потенциал, формируемый примесями и локализованными в этом потенциале дырками приводит

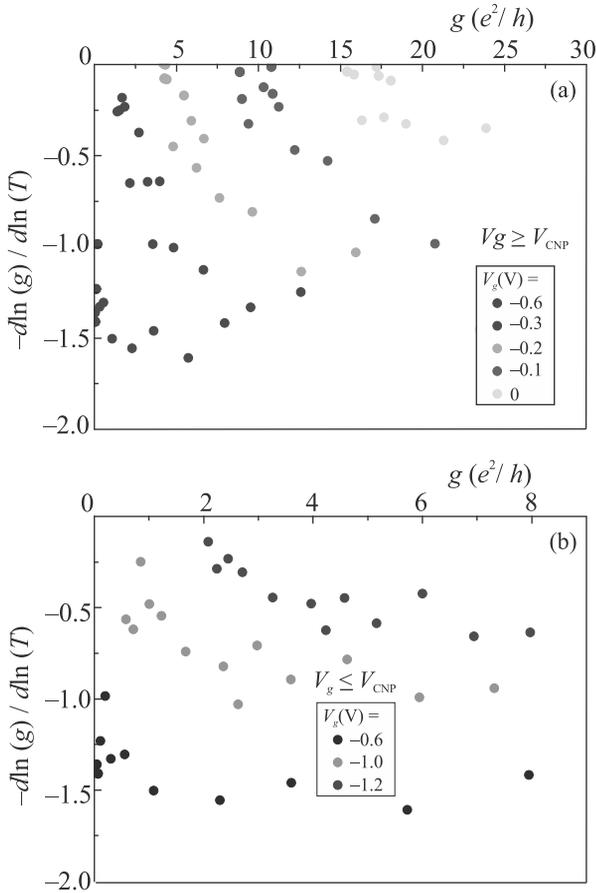


Рис. 5. (Цветной онлайн) Скейлинговая функция $\beta = d \ln(g)/d \ln(T) = (T/R)(dR/dT)$, найденная из температурной зависимости проводимости: (a) – вблизи максимума $\rho_{xx}(V_g)$ и справа от него; (b) – вблизи максимума $\rho_{xx}(V_g)$ и слева от него

к такому поведению электронной локализации, которое уже не описывается однопараметрическим скейлингом.

Поведение проводимости слева от максимума зависимости $\rho_{xx}(V_g)$, когда вкладом дырок уже нельзя пренебрегать, и она определяется одновременным существованием электронов и дырок, оказалось еще более аномальным. Во-первых, функция β , построенная аналогичным образом уже из температурной зависимости проводимости в указанной области затворных напряжений, также ведет себя не в соответствии с предсказанием однопараметрического скейлинга. Во-вторых, при $g \gg 1$ (рис. 6) проводимость ведет себя немонотонным образом, так как сначала она растет при понижении температуры, а только затем начинает уменьшаться, тогда как на правой части зависимости $\rho_{xx}(V_g)$ проводимость при $g \gg 1$ все время растет при понижении температуры примерно по логарифмическому закону (слабая лока-

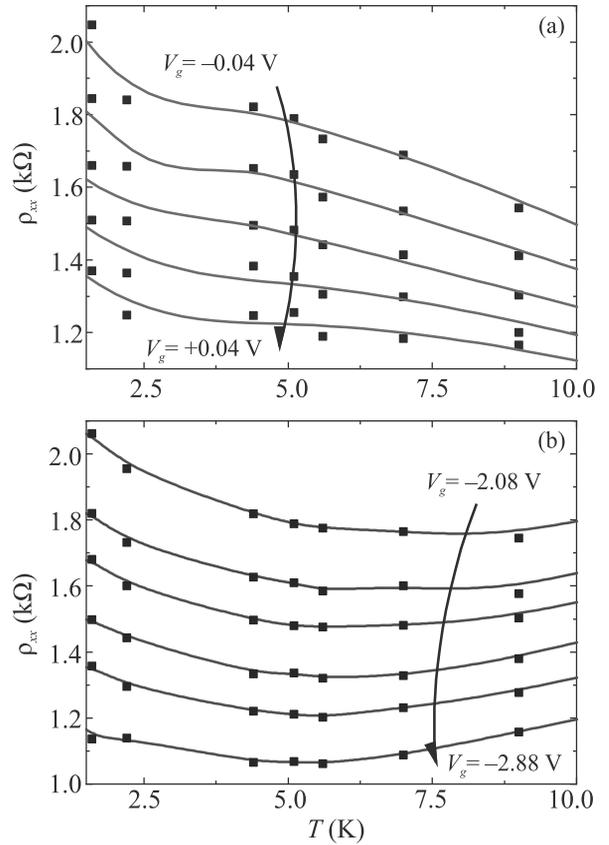


Рис. 6. (Цветной онлайн) Температурные зависимости сопротивления $\rho_{xx}(T)$ справа (a) и слева (b) от ТЗН в области одинаковых значений $g \gg 1$. Сплошные красные и синие линии приведены для наглядности

лизация). Это означает, что поведение системы, когда вкладом дырок в проводимость нельзя пренебречь, носит более сложный характер, обусловленный, скорее всего, тем, что начинают уже влиять эффекты взаимодействия между дырками (у которых параметр r_s на порядок больше, чем у электронов) и между электронами и дырками. Также, возможно, на поведение проводимости могут влиять эффекты спин-орбитального взаимодействия. Хотя следует отметить, что в обсуждаемой области затворных напряжений не наблюдается указывающее на него аномальное положительное или знакопеременное МС (см. рис. 3).

Подводя итог результатам данной работы, можно заключить, что в ней впервые обнаружены эффекты андерсоновской локализации в двумерной двухкомпонентной системе, в которой эффективная масса одних частиц (дырок) на порядок превышает эффективную массу других (электронов). В настоящей работе изложены только первые результаты, показывающие, что поведение локализации в такой си-

стеме носит новый и нетривиальный характер. В-первых, несмотря на малость эффектов взаимодействия, ее поведение не описывается однопараметрическим скейлингом, во-вторых, в ней возникает ранее не рассматриваемая ситуация двухступенчатой локализации, когда требуется учет электронно-электронного и электронно-дырочного взаимодействия, а также взаимодействия между дырками. Очевидно, что дальнейшее как экспериментальное, так и теоретическое исследование обнаруженного явления представляет безусловный интерес.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования (075-15-2020-797(13.1902.21.0024)).

1. P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
2. E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
3. P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985).
4. S. V. Kravchenko, G. V. Kravchenko, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov, and M. D'Iorio, *Phys. Rev. B* **50**, 8039 (1994).
5. Y. Hanein, U. Meirav, D. Shahar, C. C. Li, D. C. Tsui, and H. Shtrikman, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1288 (1998).
6. E. Abrahams, S. V. Kravchenko, and M. P. Sarachik, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 251 (2001).
7. A. Punnoose and A. M. Finkel'stein, *Science* **310**, 289 (2005).
8. А. А. Шашкин, *УФН* **175**, 139 (2005).
9. В. Ф. Гантмахер, В. Т. Догополов, *УФН* **178**, 3 (2008).
10. В. Т. Долгополов, *УФН* **187**, 785 (2017).
11. В. Т. Долгополов, *УФН* **189**, 673 (2019).
12. В. М. Пудалов, М. Е. Гершензон, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 237 (2020).
13. Г. М. Миньков, О. Э. Рут, А. А. Шерстобитов, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов, *Письма в ЖЭТФ* **110**, 274 (2019).
14. З. Д. Квон, М. Л. Савченко, Д. А. Козлов, Е. Б. Ольшанецкий, А. С. Ярошевич, Н. Н. Михайлов, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 174 (2020).
15. Н. Н. Васильев, З. Д. Квон, Н. Н. Михайлов, С. Д. Ганичев, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 463 (2021).
16. З. Д. Квон, Е. Б. Ольшанецкий, Д. А. Козлов, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, *Письма в ЖЭТФ* **87**, 588 (2008).
17. Е. Б. Ольшанецкий, З. Д. Квон, М. В. Энтин, Л. И. Магарилл, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, *Письма в ЖЭТФ* **89**, 338 (2009).
18. E. B. Olshanetsky, Z. D. Kvon, N. N. Mikhailov, E. G. Novik, I. O. Parm, and S. A. Dvoretzky, *Solid State Commun.* **152**, 265 (2012).
19. E. Olshanetsky, Z. D. Kvon, Y. A. Gerasimenko, V. Prudkoglyad, V. M. Pudalov, N. N. Mikhailov, and S. Dvoretzky, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 947 (2013).
20. М. Кнап, J. D. Sau, B. I. Halperin, and E. Demler, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 186801 (2014).
21. V. A. Prudkoglyad, E. B. Olshanetsky, Z. D. Kvon, V. M. Pudalov, N. N. Mikhailov, and S. A. Dvoretzky, *Phys. Rev. B* **98**, 155437 (2018).
22. M. M. Mahmoodian and M. V. Entin, *Phys. Rev. B* **101**, 125415 (2020).
23. J. Gospodaric, A. Shuvaev, N. N. Mikhailov, Z. D. Kvon, E. G. Novik, and A. Pimenov, *PRB*, to be published.
24. B. L. Altshuler, A. G. Aronov, and D. E. Khmel'nitskiy, *J. Phys. C: Sol. St. Phys.* **15**, 7367 (1982).
25. R. Davies, M. Pepper, and M. Kaveh, *J. Phys. C: Sol. St. Phys.* **16**, L285 (1983).
26. Э. И. Заврицкая, И. П. Звягин, *Письма в ЖЭТФ* **41**, 393 (1985).
27. С. И. Дорожкин, Е. Б. Ольшанецкий, З. Д. Квон, Г. М. Гусев, *Письма в ЖЭТФ* **45**, 577 (1987).

Спин-флуктуационный переход в неупорядоченной модели Изинга

Н. А. Богословский, П. В. Петров¹⁾ Н. С. Аверкиев

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

Поступила в редакцию 9 июля 2021 года

После переработки 27 августа 2021 г.

Принята к публикации 27 августа 2021 г.

В работе исследуется модель примесной системы в полупроводниках, состоящая из случайно расположенных в пространстве спинов с водородоподобной зависимостью обменной энергии от расстояния в гамильтониане Изинга. Рассчитаны функция распределения обменной энергии и средний квадрат магнитного момента в зависимости от концентрации. Показано, что при концентрации, близкой к концентрации перехода металл-диэлектрик в полупроводниках, в системе спинов происходит так называемый спин-флуктуационный переход, связанный с изменением среднего квадрата магнитного момента.

DOI: 10.31857/S1234567821180117

В настоящей работе исследуются свойства неупорядоченной модели Изинга с водородоподобной зависимостью обменной энергии от расстояния. Интерес к этой теме вызван, главным образом, публикацией новых экспериментальных данных, полученных при исследовании полупроводниковых гетероструктур [1], компенсированных полупроводников [2, 3], а также материалов с сильными электронными корреляциями [4, 5]. При интерпретации результатов вычислений принципиально важной оказалась идея спин-флуктуационного перехода, недавно предложенная Демишевым [4, 6].

Магнитные свойства модели Изинга для полностью случайно расположенных спинов изучены недостаточно. В основном модель Изинга исследуется на регулярных решетках [7], или на решетках с различным образом введенными фрустрациями (см., например, [8]). По причине сложности прямой задачи часто изучаются нефизичные модели, такие как решетка Бете или спиновое стекло в модели Шеррингтона–Киркпатрика. Одним из основных результатов для модели случайно расположенных спинов до сих пор является численный расчет Бхатта и Ли 1982 г., демонстрирующий отсутствие дальнего антиферромагнитного порядка в системе примесей, взаимодействующих в рамках как гамильтониана Изинга, так и Гайзенберга [9]. Отсутствие дальнего порядка объясняется возникновением так называемой синглетной фазы, в которой близко расположенные примеси связываются в состояния с нулевым полным моментом и перестают взаимодействовать с остальным окружением. В работе [9] было показано, что синглетная фа-

за существует не только при низких концентрациях, но и при концентрациях примесей, намного превосходящих концентрацию перехода металл-диэлектрик в полупроводниках. При таких концентрациях модель прямого водородоподобного обмена неприменима, из чего следовал вывод, что спиновое упорядочение в полупроводниковых системах невозможно.

Главное отличие представленного ниже подхода от работы Бхатта и Ли заключается в использовании более корректной зависимости обменной энергии J как функции расстояния r_{ij} между примесными центрами i и j , вычисленной в работах [10, 11]

$$J(r_{ij}) = \pm J_0 (r_{ij}/a)^{5/2} \exp(-2r_{ij}/a). \quad (1)$$

Неучтенный Бхаттом и Ли степенной префактор в (1) существенно влияет на величину обмена, пренебрежение им недооценивает обмен в $(r/a)^{5/2}$ раз, что на расстоянии 10 боровских радиусов a дает ≈ 300 (см. рис. 1). Кроме того, мы рассматриваем не только антиферромагнитный, но и ферромагнитный вид взаимодействия. В предыдущей работе нами численно исследовалась температурная зависимость магнитной восприимчивости в такой модели с использованием метода Метрополиса при концентрации вблизи перехода металл-диэлектрик [12]. Было показано, что наличие префактора значительно изменяет поведение восприимчивости для ферромагнитного вида взаимодействия. В зависимости восприимчивости от температуры префактор приводил к возникновению максимума, соответствующего наиболее вероятной энергии взаимодействия, т.е. максимуму функции $4\pi(r/a)^2 J(r/a)$. В антиферромагнитном случае влияние префактора на температурную зависимость оказалось незначительным.

¹⁾e-mail: pavel.petrov@gmail.com

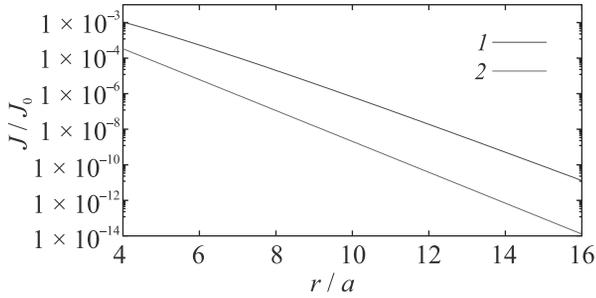


Рис. 1. (Цветной онлайн) Вид функции $J(r/a)$ с учетом (1) и без учета (2) степенного преэкспоненциального множителя

Идея существования спин-флуктуационного перехода была недавно высказана Демишевым на основании анализа экспериментальных данных, полученных методом электронного-парамагнитного резонанса в материалах с сильными электронными корреляциями [4, 6]. Суть ее состоит в том, что параметр, управляющий фазовым переходом, влияет не на средний магнитный момент $\langle S \rangle$, а только на его средний квадрат $\langle S^2 \rangle$. Главное отличие от описаний, основанных на теории фазовых переходов Ландау и разнообразных вариантов ее развития, состоит в том, что средний спин здесь равен нулю по обе стороны от перехода, тогда как изменения происходят только с амплитудой спиновых флуктуаций. Таким образом, в качестве параметра порядка выступает не $\langle S \rangle$, а $\sqrt{\langle S^2 \rangle}$. В моделях с регулярным расположением спинов усреднение обычно производится по элементарной ячейке, магнитной подрешетке, либо, в случае наличия беспорядка, по одной или нескольким координационным сферам. Здесь рассматриваются флуктуации полного спина системы из N спинов случайно расположенных в трехмерном пространстве.

В представленной здесь модели управляющим параметром является концентрация примесных центров. При малой концентрации примесей взаимодействие их незначительно и приводит только к образованию небольшого числа попарно взаимодействующих центров в синглетном состоянии. Амплитуда спиновых флуктуаций в синглетной фазе слабо зависит от концентрации. Согласно [9], магнитная восприимчивость в этой фазе при высоких температурах соответствует закону Кюри, а при понижении температуры отклоняется от него в сторону уменьшения восприимчивости. Как будет показано ниже — при увеличении концентрации примесных центров, в случае ферромагнитного взаимодействия, флуктуации магнитного момента резко возрастают из-за возникновения случайно ориентированных доме-

нов спонтанной намагниченности в местах скопления примесей. В антиферромагнитном случае, наоборот, в процессе перехода происходит уменьшение флуктуаций из-за образования антипараллельно ориентированных пар, которые взаимодействуют друг с другом слабее, нежели случайно ориентированные центры. Таким образом, возникает физическая картина спин-флуктуационного перехода, которую и предлагает Демишев: спонтанное изменение амплитуды флуктуаций намагниченности под воздействием изменения управляющего параметра при том, что сама средняя намагниченность остается равной нулю. Примечательно то, что эта физическая картина возникает в весьма простой модели, параметрами которой являются только безразмерные концентрация na^3 и температура kT/J_0 .

Гамильтониан изучаемой системы имеет вид:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J(r_{ij}) S_i S_j, \quad (2)$$

где $S_{i,j} = \pm 1$ — безразмерные спиновые переменные, соответствующие направлению магнитных моментов примесных центров. Суммирование ведется по всем случайно расположенным спинам примесных атомов, а функция $J(r_{ij})$ определена согласно (1). Аналитические решения для систем с гамильтонианом Изинга могут быть получены только для отдельных случаев, поэтому для исследования подобных задач широко используются приближенные методы. Мы будем использовать так называемый метод эффективного поля [7, 13], широко применяющийся при исследовании спиновых свойств в рамках модели Изинга. В рамках этого метода магнитные свойства спиновой системы вычисляются при помощи функции распределения обменного поля, действующего на случайно взятый спин S_j . При этом в данном случае удобнее оказалось вычислять функцию распределения не поля, а обменной энергии $W(JS)$.

Гамильтониан системы взаимодействующих спинов формально можно переписать в следующем виде:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J(r_{ij}) S_i S_j = \frac{1}{2} \sum_i J_i S_i, \quad (3)$$

где $J_i S_i = S_i \sum_{j \neq i} J(r_{ij}) S_j$ — обменная энергия, представленная в виде суммы взаимодействий спина S_i со всеми остальными спинами. Покажем, что зная функцию распределения обменной энергии $W(JS)$, можно рассчитать магнитную восприимчивость материала.

Рассмотрим локализованный на центре i спин, имеющий модуль магнитного момента μ , и находя-

щийся в слабом, таком, чтобы эффект Зеемана оставался линейным, магнитном поле B . Тогда, используя традиционный термодинамический подход, его средний магнитный момент можно записать как

$$M_i = \mu \tanh \frac{(J_i + \mu B)S_i}{kT}. \quad (4)$$

Магнитная восприимчивость одного спина в зависимости от температуры в этом случае есть

$$\chi_i = \frac{\partial M_i}{\partial B} = \frac{\mu^2}{kT} \cosh^{-2} \frac{(J_i + \mu B)S_i}{kT}. \quad (5)$$

Зная распределение обменной энергии $W(JS)$ для конкретных температуры и магнитного поля, можно получить выражение для магнитной восприимчивости всей системы просто через усреднение по обменной энергии:

$$\chi = \frac{N\mu^2}{kT} \int_{-\infty}^{\infty} W(JS) \cosh^{-2} \frac{(J + \mu B)S}{kT} d(JS), \quad (6)$$

где под N нужно понимать полное число спинов. Поясним немного необычный выбор переменной интегрирования. Традиционно принято описывать систему спинов как две подсистемы со спинами вверх и вниз, и работать с ними отдельно. В нашем случае построение функции распределения в зависимости от JS удобно, так как позволяет объединить эти две подсистемы в одну. Понять, как эта схема соотносится с традиционным описанием, можно, представив себе, что система спинов находится в состоянии минимума энергии, когда переворот спина S_i может только повысить ее на энергию J_i . В этом случае состояния со спинами, ориентированными вверх и вниз, разделятся на две половины. Состояния со спином -1 в координатах JS будут находиться справа от нуля, а энергия для них будет направлена в отрицательную сторону. Состояния со спином $+1$ будут находиться слева от нуля и энергия для них будет как обычно направлена вверх. В точке $JS = 0$ будет находиться в этом случае химический потенциал для обеих подсистем. Можно провести аналогию между функцией $W(JS)$ и электронной плотностью состояний в полупроводнике. В этом случае состояния со спинами ± 1 будут соответствовать электронам и дыркам, которые при нулевой температуре будут располагаться по разные стороны от уровня химического потенциала, и иметь противоположно направленные оси энергии.

В данной работе рассчитывается распределение обменной энергии только для двух случаев: системы полностью неупорядоченных спинов и системы

спинов, находящихся в состоянии минимума обменной энергии. Это связано с большой вычислительной сложностью расчетов для конечных температур. Расчет для неупорядоченного случая весьма прост, это усреднение по системе случайно ориентированных спинов. Для вычисления $W(JS)$ в случае состояния с минимумом энергии нами был разработан эффективно работающий алгоритм минимизации обменной энергии путем последовательного переворота спинов с применением техники параллельного программирования. Число частиц в расчете составляло от 6 до 10 тыс., при этом учитывалось взаимодействие каждого спина с каждым.

Для поиска состояния с минимумом энергии используется метод численного моделирования согласно следующей схеме. Вначале генерируется система случайно расположенных центров со случайно ориентированными спинами. Далее, посредством последовательных переворотов спинов, имеющих в данной конфигурации максимальную обменную энергию, производится минимизация полной обменной энергии системы, вычисленной по формуле (2). Минимизация производится до тех пор, пока такой переворот возможен. В результате система случайно расположенных спинов приводится в так называемое псевдоосновное состояние, которое в подобных системах стекольного типа обычно принимается за основное. Для полученной в итоге процесса минимизации конфигурации спинов производилось вычисление распределения обменной энергии, после чего процесс повторялся $K = 10^4 - 10^6$ раз для заново сгенерированного случайного расположения центров.

Будет уместным кратко сравнить наши вычисления с методикой, использованной в работе Бхатта и Ли. В их расчете, как и у нас, исследовалась система, состоящая из 10 тыс. случайно расположенных спинов. По причине ограниченных возможностей компьютеров того времени ими учитывалось взаимодействие не каждого спина с каждым, а только взаимодействие внутри небольших кластеров из нескольких десятков спинов. Для каждого такого кластера рассчитывался энергетический спектр, после чего оценивалась ширина функции распределения обменной энергии. Пары примесных атомов, для которых обменная энергия превышала температуру, считались перешедшими в синглетное состояние и не дающими вклад в магнитную восприимчивость. Наш подход качественно похож на подход Бхатта и Ли. Разница состоит в том, что во-первых, вместо ширины распределения мы вычисляем все распределение целиком. Во-вторых, вместо простого отбрасывания пар, перешедших в синглетное состояние, мы используем

ем формулу (6), в которой эту роль выполняет до-множение на функцию $\cosh^{-2}(J_i + \mu B)S/kT$. Это колоколообразная функция, ширина которой сужается при понижении температуры, переставая учитывать тем самым состояния с обменной энергией большей, чем kT . Но, как уже говорилось во введении, наиболее существенную разницу с точки зрения физического описания системы составляет учет предэкспоненциального степенного множителя в зависимости $J(r/a)$. Магнитное поле в дальнейшем считается равным нулю, т.е. вычисляется дифференциальная магнитная восприимчивость в слабых полях. Это соответствует обычным экспериментальным условиям при измерении электронного парамагнитного резонанса. На рисунке 2 представлены результаты вы-

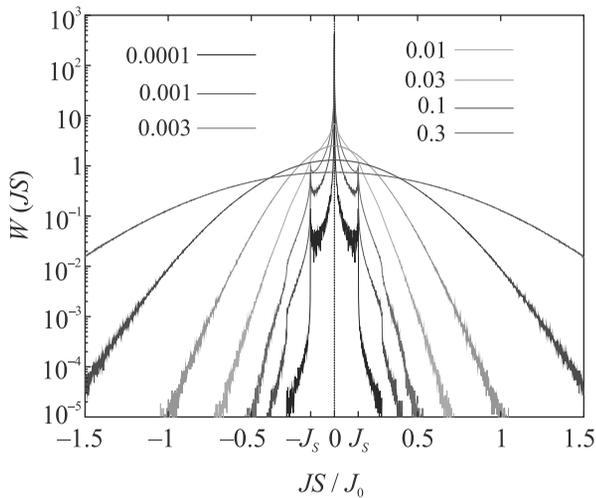


Рис. 2. (Цветной онлайн) Функция распределения обменной энергии $W(JS)$, вычисленная для системы неупорядоченных спинов при различных концентрациях примесных центров. Концентрация указана на рисунке в единицах na^3

числений функции $W(JS)$ для системы неупорядоченных спинов при различных концентрациях. При малых концентрациях функция распределения представляет собой острый максимум вблизи нуля, что объясняется быстрым затуханием функции $J(r/a)$ с расстоянием. Справа и слева от основного в распределении присутствуют боковые максимумы, соответствующие оптимальной энергии взаимодействия. Как было нами уже показано в [12], их энергия соответствует максимуму функции $4\pi(r/a)^2 J(r/a)$, что для показателя степени предэкспоненциального множителя $5/2$ дает для оптимального расстояния значение $r = 5/4a$, а для оптимальной энергии $J_s = J(5/4a) = J_0(5/4)^{5/2} \exp(-2 \cdot 5/4) \approx 0.143J_0$. Примечательно то, что энергия этих максимумов не за-

висит от концентрации. Спиновые состояния, находящиеся в максимумах, – это и есть та самая синглетная фаза Бхатта и Ли, возникающая в результате обменного взаимодействия при малых концентрациях. Количество спинов в синглетной фазе при увеличении концентрации постепенно возрастает, но общий вид функции не изменяется до тех пор, пока концентрация не приблизится к концентрации перехода металл-диэлектрик $na^3 \approx 0.01$.

При подходе концентрации к критической для обменной энергии $J_i S_i$ произвольного спина, являющейся согласно (3) просто суммой последовательности случайных величин, начинают выполняться условия центральной предельной теоремы. В сумме случайных величин накапливается необходимое число слагаемых и общий вид распределения $W(JS)$ становится гауссовым. Дальнейшее увеличение концентрации вида распределения не изменяет и приводит лишь к увеличению его дисперсии, которую легко можно вычислить аналитически, пользуясь тем, что $(J_i S_i)^2 = J_i^2$. Средний квадрат энергии обменного взаимодействия со спином, который находится внутри сферы радиуса R :

$$\sigma^2 = \frac{3}{4\pi R^3} \int_0^R 4\pi r^2 J^2(r) dr = \frac{3J_0^2 a^3}{R^3} \int_0^{R/a} t^7 \exp(-4t) dt. \quad (7)$$

При $R \rightarrow \infty$, интеграл в (7) равен

$$\int_0^{+\infty} t^7 \exp(-4t) dt = \frac{7!}{4^8}. \quad (8)$$

Количество спинов внутри сферы радиуса R равно $N = 4/3\pi R^3 n$, откуда получаем выражение для среднеквадратичного отклонения обменной энергии:

$$\sigma^2 = \frac{7!}{4^7} \pi J_0^2 na^3. \quad (9)$$

Результаты численного моделирования для случая неупорядоченных спинов при высоких концентрациях идеально описываются гауссовым распределением с дисперсией, вычисленной согласно (9). Несложно вычислить и магнитную восприимчивость для системы неупорядоченных спинов с концентрацией, соответствующей этой, как мы будем ее называть, гауссовой фазе. Функция распределения обменной энергии в гауссовой фазе записывается в виде нормального распределения.

$$W(JS) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{J^2}{2\sigma^2}\right). \quad (10)$$

Тогда, в соответствии с (6), магнитная восприимчивость будет равна:

$$\chi = \frac{N\mu^2}{\sqrt{2\pi\sigma kT}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{J^2}{2\sigma^2}\right) \cosh^{-2}\left(\frac{JS}{kT}\right) d(JS). \quad (11)$$

Этот интеграл несложно взять численно, но для понимания того, как устроен ответ, полезно рассмотреть два предельных случая. В случае низких температур основной вклад в магнитную восприимчивость дают состояния с близкой к 0 обменной энергией. Поскольку $J \ll \sigma$,

$$\chi = \frac{N\mu^2}{\sqrt{2\pi\sigma kT}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d(JS)}{\cosh^2(JS/kT)} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{N\mu^2}{\sigma}. \quad (12)$$

Таким образом, при низких температурах магнитная восприимчивость не зависит от температуры и обратно пропорциональна стандартному отклонению обменной энергии σ . При высоких температурах $\cosh^2(JS/kT) \approx 1$, тогда для магнитной восприимчивости получаем

$$\chi = \frac{N\mu^2}{\sqrt{2\pi\sigma kT}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{J^2}{2\sigma^2}\right) d(JS) = \frac{N\mu^2}{kT}. \quad (13)$$

Таким образом, при высоких температурах для магнитной восприимчивости в гауссовой фазе получаем закон Кюри. Следует отметить, что для системы полностью неупорядоченных спинов знак взаимодействия не важен так как ориентация спинов случайна. Но, как будет показано ниже, поведение ферро- и антиферромагнитной системы спинов в состоянии минимума энергии резко различается.

На рисунках 3 и 4 приведены функции $W(JS)$, вычисленные для спиновой системы в состоянии с минимумом энергии для ферромагнитного и антиферромагнитного случаев. При малых концентрациях, т.е. в синглетной фазе, общий вид функции распределения, по сравнению со случаем полностью неупорядоченной системы, изменяется не очень сильно. Из качественных изменений можно отметить лишь появление по обеим сторонам от максимума дополнительных особенностей с энергией, равной $2J_s$, связанных, скорее всего, с образованием трехспиновых комплексов. При больших концентрациях, т.е. в гауссовой фазе, с функцией $W(JS)$ происходят качественные изменения. Распределение в виде сцентрированной на ноль энергии гауссианы распадается на два смещенных в разные стороны максимума, как для ферромагнитного случая, так и для антифер-

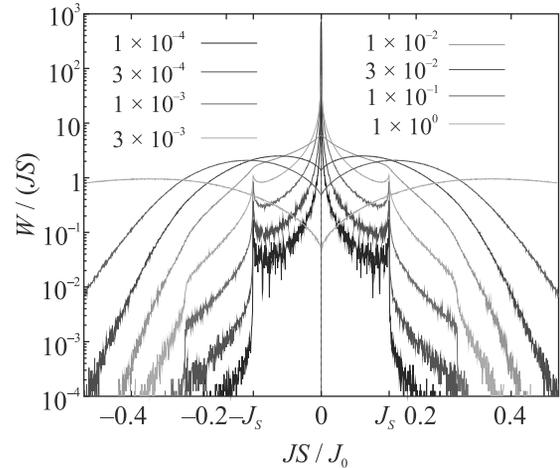


Рис. 3. (Цветной онлайн) Функция $W(JS)$ вычисленная для системы с антиферромагнитным взаимодействием в состоянии минимума энергии при различных концентрациях примесных центров

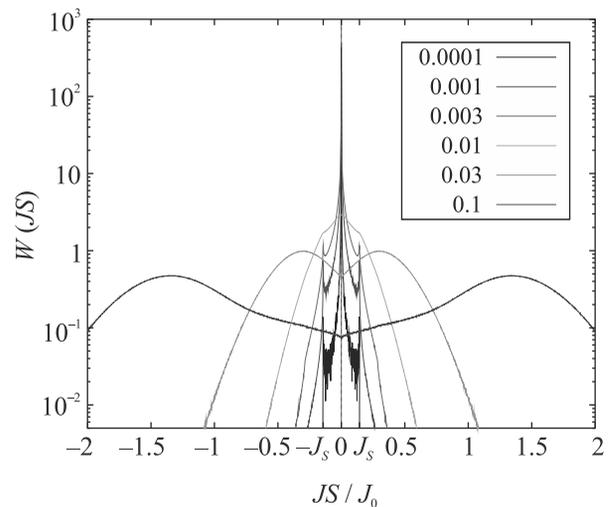


Рис. 4. (Цветной онлайн) Функция $W(JS)$, вычисленная для системы с ферромагнитным взаимодействием в состоянии минимума энергии при различных концентрациях примесных центров

ромагнитного. Зависимость положения этих максимумов от концентрации для разных знаков взаимодействия различная. В случае антиферромагнитного взаимодействия положение максимумов ведет себя схоже со стандартным отклонением σ , т.е. растет как корень из концентрации, в согласии с (9). Несложно установить характер изменения положения максимума обменной энергии и для ферромагнитного случая. Пренебрежем границами между ферромагнитно ориентированными кластерами и предположим, что внутри одного кластера спины ориентированы в одну сторону, т.е., например, $J_i S_i = +1 J_i$. Тогда

флуктуации обменной энергии будут вызваны только случайным расположением спинов, а не их переверотами и среднее значение обменной энергии можно вычислить следующим образом.

$$\begin{aligned}\bar{J} &= \frac{3}{4\pi R^3} \int_0^R 4\pi r^2 J(r) dr = \\ &= \frac{3J_0 a^3}{R^3} \int_0^{R/a} t^{9/2} \exp(-2t) dt.\end{aligned}\quad (14)$$

При $R \rightarrow \infty$ интеграл можно представить как

$$\int_0^{\infty} t^{9/2} \exp(-2t) dt = \frac{\Gamma(11/2)}{2^{11/2}} = \frac{945}{2^{10}} \sqrt{\frac{\pi}{2}}.\quad (15)$$

В интеграле мы рассматривали взаимодействие с одним спином. Учтем то, что внутри сферы радиуса R находится $N = 4/3\pi R^3 n$ спинов, тогда для среднего значения энергии обменного взаимодействия получаем

$$\bar{J} = \frac{945\pi}{2^8} \sqrt{\frac{\pi}{2}} J_0 n a^3.\quad (16)$$

Вычисленные по этой формуле энергии хорошо совпадают с положением максимумов обменной энергии, вычисленных методом численного моделирования. Зависимость положения максимума обменной энергии от концентрации в этом случае — линейная.

Для того, чтобы убедиться в том, что переход от синглетной к гауссовой фазе носит именно спин-флуктуационный характер в рамках той же методики нами были вычислены значения среднеквадратичного отклонения магнитного момента системы в состоянии минимума обменной энергии для ферро- и антиферромагнитного случаев в зависимости от концентрации примесей согласно формуле

$$\sqrt{\langle S^2 \rangle} = \sqrt{\left\langle \left(\sum_N S_i \right)^2 \right\rangle_K}.\quad (17)$$

Индекс K соответствует усреднению по реализациям. Результаты этих вычислений вместе с приведенными ниже подгоночными функциями представлены на рис. 5. В обоих случаях наблюдается ярко выраженная картина изменения амплитуды спиновых флуктуаций при изменении концентрации. Для ферромагнитного случая величина среднеквадратичного отклонения в синглетной фазе немного превышает значение \sqrt{N} , равное среднеквадратичному отклонению для системы неупорядоченных спинов. При переходе в гауссову фазу происходит экспоненциальное $\sqrt{\langle S^2 \rangle} \sim \exp(na^3/n_c a^3)$ увеличение магнитных

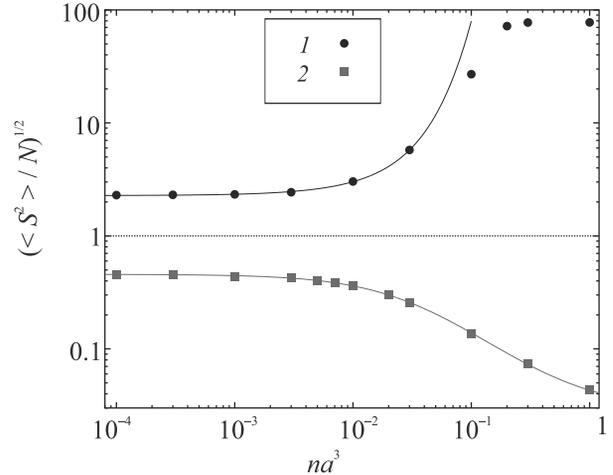


Рис. 5. (Цветной онлайн) Значение среднеквадратичного отклонения магнитного момента $\sqrt{\langle S^2 \rangle}$ системы из N спинов в состоянии минимума энергии для ферромагнитного (1) и антиферромагнитного (2) типов взаимодействия как функция концентрации примесей. Величина $\sqrt{\langle S^2 \rangle}$ отнормирована на ее значение для неупорядоченной системы спинов, равное \sqrt{N}

флуктуаций, ограниченное лишь размерами системы. Для исследуемой системы из 6000 спинов в выбранной нормировке это $N/\sqrt{N} = \sqrt{6000} \approx 77.5$). В антиферромагнитном случае величина среднеквадратичного момента в синглетной фазе немного меньше \sqrt{N} . При переходе в гауссову фазу амплитуда магнитных флуктуаций уменьшается по закону $\sqrt{\langle S^2 \rangle} \sim 1/(1 + na^3/n_c a^3)$. Значение критической концентрации для антиферромагнетика $n_c a^3 \approx 0.035$, а для ферромагнетика $n_c a^3 \approx 0.025$, т.е. по порядку величины совпадает с критической концентрацией перехода металл-диэлектрик. Еще раз отметим, что значение среднего магнитного момента во всех случаях равно нулю и не меняется в течение всего спин-флуктуационного перехода при изменении концентрации как управляющего параметра.

Вычисление магнитной восприимчивости в зависимости от температуры в виде (6) с использованием вычисленных нами функций $W(JS)$ на самом деле не вполне корректно. Для получения точного вида магнитной восприимчивости необходимо знать функцию $W(JS)$ при любой температуре. Вычисления для случая полностью неупорядоченной системы спинов соответствуют бесконечной температуре, тогда как состояние минимума обменной энергии соответствует температуре, равной нулю. Но если предположить, что при температурах, меньших, чем характерная энергия флуктуаций обменной энергии, функция распределения обменного взаимодействия

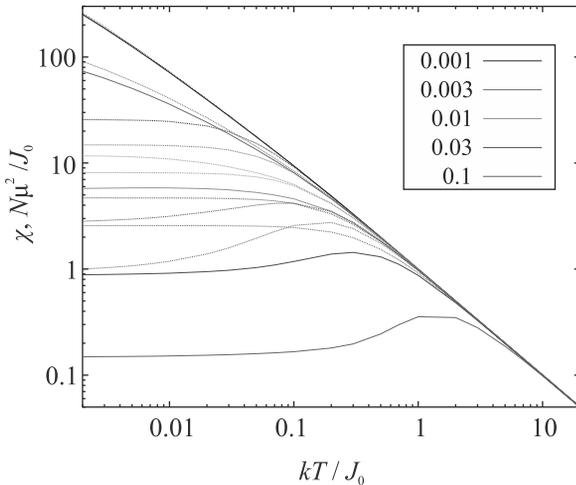


Рис. 6. (Цветной онлайн) Зависимости магнитной восприимчивости, вычисленные для спиновой системы, находящейся в состоянии минимума энергии. Пунктирные линии соответствуют системе с неупорядоченными спинами, штрихованные линии — антиферромагнитное упорядочение, сплошные линии — ферромагнитное. Концентрация в единицах na^3 указана на графике

изменяется слабо, расчет с использованием функции распределения, полученной для состояния в минимуме потенциальной энергии, можно использовать в качестве приближенного описания поведения магнитной восприимчивости.

На рисунке 6 приведены результаты этих вычислений. Как и следовало ожидать, при малых концентрациях, т.е. в синглетной фазе поведение магнитной восприимчивости для обоих знаков обменного взаимодействия качественно согласуется с расчетами, выполненными в работе Бхатта и Ли. В гауссовой фазе магнитная восприимчивость систем обоих знаков взаимодействия имеет максимум, что для неупорядоченных спиновых систем обычно считается признаком фазового перехода. В ферромагнитном случае магнитная восприимчивость заметно меньше, а температура максимума, заметно выше, чем в антиферромагнитном, что связано с большей средней обменной энергией ферромагнитных флуктуаций.

Итак, в работе исследованы магнитные свойства неупорядоченной системы примесных атомов, обменно взаимодействующих в рамках модели Изинга. Обнаружено, что при увеличении концентрации примесных атомов в такой системе происходит, так называемый, спин-флуктуационный переход, т.е. такой фазовый переход, в котором под воздействием управляющего параметра изменяется не средний магнитный момент, а амплитуда флуктуаций магнитного момента. Средний же магнитный момент системы

равен нулю по обе стороны фазового перехода. Такой переход не может быть описан в рамках теории фазовых переходов Ландау или других теорий, являющихся ее развитием. Причиной этого, как нам кажется, является то, что теория Ландау тесно увязана с изменением симметрии системы. Фазовый переход в этой теории происходит из высокосимметричной фазы в фазу пониженной симметрии. Таким образом такая теория применима для систем с относительно высокой степенью симметрии, когда можно четко указать на ее изменение. Рассматриваемая система, состоящая из неупорядоченных в пространстве спинов, симметрична только относительно тождественного преобразования и не меняет эту симметрию при любой ориентации спинов. Однако, как показано в данной работе, если рассматривать в качестве параметра порядка флуктуации магнитного момента, даже в такой неупорядоченной системе можно выделить различные фазовые состояния и указать на фазовый переход между ними. Представляется важным то, что переход в представленной модели происходит при концентрациях, близких к наблюдаемым в экспериментах концентрациях [14]. В этом случае большое значение приобретают детали обменного взаимодействия, выходящие за рамки водородоподобного приближения и связанные с конкретным видом примесных волновых функций [15–17]. Тогда, в зависимости от того, как устроено их обменное взаимодействие на микроскопическом уровне, спиновое упорядочение в полупроводниках может как наступать, так и не наступать. Вопрос о возможности спинового упорядочения с учетом степенного префактора в модели Гайзенберга пока остается открытым.

Работа поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований # 19-02-00283.

1. Н. В. Агринская, Н. Ю. Михайлин, Д. В. Шамшур, А. В. Шумилин, В. И. Козуб, *ЖЭТФ* **159**(5), 1 (2021).
2. A. Zabrodskii, A. Veinger, and P. Semenikhin, *Appl. Magn. Reson.* **51**(4), 327 (2020).
3. A. Zabrodskii, A. Veinger, and P. Semenikhin, *Phys. Status Solidi B* **257**(1), 1900249 (2020).
4. S. V. Demishev, *Appl. Magn. Reson.* **51**, 473 (2020).
5. A. V. Semeno, M. I. Gil'manov, N. E. Sluchanko, N. Yu. Shitsevalova, V. B. Filipov, and S. V. Demishev, *JETP Lett.* **108**(4), 237 (2018).
6. С. В. Демишев, *II Конференция "Квантовые материалы и технологии на нанометровой шкале", Тезисы докладов*, **21**, ИОФ РАН, М. (2020).

7. J. Strečka and M. Jačšcur, *Acta Phys. Slovaca* **65**(4), 235 (2015).
8. S. V. Semkin, V. P. Smagin, and V. I. Lyul'ko, *Phys. Solid State* **62**(8), 1355 (2020).
9. R. N. Bhatt and P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 344 (1982).
10. L. P. Gor'kov and L. P. Pitaevskii, *Sov. Phys. Doklady* **8**, 788 (1964).
11. C. Herring and M. Flicker, *Phys. Rev.* **134**(2A), A362 (1964).
12. N. A. Bogoslovskiy, P. V. Petrov, and N. S. Averkiev, *Phys. Solid State* **61**(11), 2005 (2019).
13. M. Saber, *Chin. J. Phys.* **35**(5), 577 (1997).
14. K. F. Berggren, *Philos. Mag.* **27**(5), 1027 (1973).
15. Н. С. Аверкиев, И. Н. Ясневич, Ю. Т. Ребане, *ФТП* **19**, 96 (1985).
16. Н. С. Аверкиев, А. В. Родина, *ФТТ* **35**, 1051 (1993).
17. Н. С. Аверкиев, С. Ю. Ильинский, *ФТТ* **36**, 503 (1994).

Решение уравнения Шредингера на квантовом компьютере методом Залки–Визнера с учетом квантовых шумов

Ю. И. Богданов¹⁾, Н. А. Богданова, Д. В. Фастовец, В. Ф. Лукичев

Физико-технологический институт им. К. А. Валиева РАН, 117218 Москва, Россия

Поступила в редакцию 10 августа 2021 г.

После переработки 12 августа 2021 г.

Принята к публикации 12 августа 2021 г.

Рассмотрено моделирование квантовых систем на квантовом компьютере с использованием метода Залки–Визнера с учетом квантовых шумов. Эффективность разработанных методов и алгоритмов продемонстрирована на примере решения нестационарного уравнения Шредингера для частицы в потенциале Пешль–Теллера. Выполнено сравнение развитой аналитической теории влияния квантовых шумов на точность моделирования с результатами численных расчетов методом Монте-Карло. Осуществлен прогноз точности решения уравнения Шредингера для многоэлектронной системы в зависимости от числа электронов и для различных уровней шума.

DOI: 10.31857/S1234567821180099

1. Введение. Квантовые компьютеры позволяют достичь экспоненциального ускорения при решении определенных практически значимых задач. Одной из важнейших таких задач является задача моделирования квантовых систем. Необходимость в проведении высокоточного моделирования эволюции квантовых систем различной природы возникает в таких научных областях, как физика [1], квантовая химия [2] и компьютерные технологии [3]. Наиболее прямой способ решения задач в случае квантово-механических систем – это поиск решения нестационарного уравнения Шредингера. Это уравнение, конечно, можно пытаться решать численно с использованием классического компьютера. Однако, в этом случае, для проведения высокоточного моделирования реальных практически важных задач, понадобится экспоненциально большое количество ресурсов (по памяти и времени выполнения). С другой стороны, для моделирования эволюции квантовой системы можно использовать квантовый компьютер. Показано, что квантовый компьютер способен эффективно решать нестационарное уравнение Шредингера при использовании алгоритма Залки–Визнера [4, 5], который является одним из основных методов анализа квантовых систем с использованием квантовых вычислений.

Рассматриваемый алгоритм позволяет использовать ресурсы квантовых вычислений для моделирования эволюции квантовой системы, описываемой произвольным гамильтонианом. Алгоритм Залки–

Визнера активно исследуется различными научными группами. Эффективность данного алгоритма на небольшом числе кубитов была доказана и продемонстрирована численно [6], а также была проведена апробация с использованием облачного квантового процессора IBM [7]. Универсальность данного алгоритма позволяет применять его к самым различным квантовым системам, включая системы многих тел с кулоновским взаимодействием [8] и системы квантовых гармонических осцилляторов [9].

Отметим, что было разработано несколько модификаций данного алгоритма. Например, описана адаптация алгоритма Залки–Визнера к моделированию химических реакций [10]. Особое внимание авторы этой работы уделяют приготовлению необходимого квантового состояния, что является важной проблемой при реализации ряда квантовых алгоритмов. В работе проводится апробация при моделировании небольшого числа атомов (4–5), а также приводятся методы расчета химически значимых наблюдаемых. Другое исследование [11] посвящено модификации алгоритма Залки–Визнера, которая превосходит явную разностную схему по точности, однако требует экспоненциальных затрат по памяти. Разработанный алгоритм позволяет проводить моделирование динамики в реальном времени, что было подтверждено в численных экспериментах.

Основное препятствие на пути развития квантовых компьютеров и квантовых симуляторов связано с влиянием декогерентизации и квантовых шумов на динамику многокубитных квантовых систем [12]. Учет влияния декогерентизации и квантовых

¹⁾e-mail: bogdanov_yurii@inbox.ru

шумов на эффективность работы алгоритма Залки–Визнера представляет собой актуальную и еще не исследованную задачу. Подобные исследования, на наш взгляд, критически важны для практической реализации рассматриваемого квантового алгоритма. Получаемые при этом результаты могут быть использованы для улучшения качества работы алгоритма как на программном, так и на аппаратном уровнях. Данному исследованию алгоритма и посвящена настоящая работа. В разделе 2 дается описание общей идеи метода Залки–Визнера. Важно отметить, что каждый шаг эволюции квантового состояния регистра кубитов связан с применением прямого и обратного преобразования Фурье и, таким образом, точность преобразования Фурье в квантовом регистре лимитирует итоговую точность решения нестационарного уравнения Шредингера. Оценка влияния квантовых шумов на квантовое преобразование Фурье с использованием подхода на основе теории квантовых операций рассмотрена в разделе 3. В разделе 4 представлена апробация разработанных методов и алгоритмов на примере рассмотрения динамики квантовой частицы в потенциале Пешль–Теллера. В разделе 5 представлены выводы по работе.

2. Общая идея метода Залки–Визнера. Рассмотрим для простоты одномерную динамику квантовой частицы. Формальное обобщение на случай многомерной многочастичной системы производится непосредственно. Полное время эволюции t разбивается на достаточное число интервалов n_t . Моделирование осуществляется на отдельном, малом интервале $\Delta t = t/n_t$ и повторяется n_t раз.

Работа алгоритма Залки–Визнера начинается с учета влияния оператора потенциальной энергии в координатном представлении, а затем, посредством преобразования Фурье, производится переход в импульсное представление, в котором обеспечивается учет оператора кинетической энергии, после чего происходит возврат в исходное координатное представление посредством обратного преобразования Фурье. Таким образом, оператор унитарной эволюции в координатном пространстве на малом интервале времени Δt есть:

$$U_{\Delta t} = \text{IQFT} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \Delta t\right) \text{QFT} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} V(x) \Delta t\right). \quad (1)$$

Здесь $\exp\left(-\frac{i}{\hbar} V(x) \Delta t\right)$ – оператор эволюции в координатном пространстве, определяемый потенциалом $V(x)$; QFT (*Quantum Fourier Transform*) – квантовое преобразование Фурье, обеспечивающее переход от координатного представления в импульсное;

$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \Delta t\right)$ – оператор эволюции в импульсном пространстве, определяемый оператором кинетической энергии $\frac{p^2}{2m}$; IQFT (*Inverse Quantum Fourier Transform*) – обратное квантовое преобразование Фурье, обеспечивающее переход от импульсного представления снова в координатное.

Прямое квантовое преобразование Фурье (QFT) волновой функции, обеспечивающее переход от координатного представления к импульсному, есть:

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar} px\right) \psi(x) dx.$$

Обратное квантовое преобразование Фурье (IQFT), обеспечивающее переход от импульсного представления к координатному, есть:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) \tilde{\psi}(p) dp.$$

Наличие квантового регистра из n кубитов обеспечивает $N = 2^n$ точек дискретизации и отвечает эволюции соответствующей дискретизированной квантовой системы в гильбертовом пространстве размерности N .

Представление эволюции в виде (1) является хорошим приближением при достаточно больших n_t в силу формулы Троттера:

$$\lim_{n_t \rightarrow \infty} [\exp(-iAt/n_t) \exp(-iBt/n_t)]^{n_t} = \exp[-i(A+B)t]. \quad (2)$$

Известно, что если операторы A и B не коммутируют, то

$$\exp[-i(A+B)t] \neq \exp(-iAt) \exp(-iBt)$$

при конечных временах t . Однако, в силу формулы Троттера (2), такого рода соотношение выполняется для малых времен Δt . В нашем случае в роли A и B выступают операторы кинетической и потенциальной энергии соответственно. В данной работе были использованы две формы формулы Троттера [12], отличающиеся порядком точности:

$$\begin{aligned} \exp[-i(A+B)\Delta t] &= \\ &= \exp[-iA\Delta t] \exp[-iB\Delta t] + O((\Delta t)^2), \\ \exp[-i(A+B)\Delta t] &= \\ &= \exp[-iA\Delta t/2] \exp[-iB\Delta t] \exp[-iA\Delta t/2] + O((\Delta t)^3). \end{aligned}$$

Первую из этих формул будем называть стандартной, а вторую (более точную) – модифицированной.

3. Влияние квантовых шумов на квантовое преобразование Фурье: подход на основе теории квантовых операций. Идеальная квантовая схема представляет собой последовательный набор унитарных квантовых преобразований $\{U_i\}$. Операции U_i обычно действуют на один, два или, что реже, на три кубита. Для реальных физических систем реализация каждого преобразования U_i подразумевает наличие соответствующего гамильтониана H_i , осуществляющего операцию U_i за время t_i : $U_i = e^{-iH_i t_i/\hbar}$, однако для дальнейшего рассмотрения достаточно ограничиться заданием операторов U_i . Задача моделирования работы квантовой схемы состоит в нахождении итогового состояния системы $U_s \cdot U_{s-1} \cdot \dots \cdot U_2 \cdot U_1 |\psi_0\rangle$ по начальному состоянию $|\psi_0\rangle$.

Для описания открытых квантовых систем, подверженных влиянию квантовых шумов, необходимо использовать формализм матриц плотности. При этом преобразования квантовых состояний расширяются от унитарных до так называемых квантовых операций [13, 14]. Действие произвольной квантовой операции на квантовое состояние в виде матрицы плотности ρ может быть представлено в виде операторной суммы:

$$\varepsilon(\rho) = \sum_i E_i \rho E_i^\dagger,$$

где операторы E_i удовлетворяют условию нормировки $\sum_i E_i^\dagger E_i = I$ (сохранение нормы) и называются операторами Крауса.

В терминах векторов-состояний шум может быть введен при помощи метода Монте-Карло. Например, произвольный однокубитовый вентиль U_{ideal} может быть заменен на зашумленный аналог следующим образом:

$$U = U_{\text{ideal}} \cdot V_{\text{noise}}, \quad (3)$$

$$V_{\text{noise}} = \begin{pmatrix} \cos(e\xi) & \sin(e\xi) \\ -\sin(e\xi) & \cos(e\xi) \end{pmatrix},$$

где ξ – случайная величина с нормальным распределением $N(0, 1)$, а e – уровень ошибки. Такое представление зашумленного преобразования оказывается очень полезным и будет использоваться нами далее. Аналогичным образом может быть представлен зашумленный оператор контролируемого поворота фазы, используемый в квантовом преобразовании Фурье:

$$U_\theta = U_\theta^{\text{ideal}} \cdot V_\theta^{\text{noise}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i(\theta+e\xi)} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где U_θ^{ideal} – идеальный оператор поворота фазы, а V_θ^{noise} – соответствующий ему оператор шума. Для простоты изложения мы характеризуем уровень шума в формулах (3) и (4) одним и тем же параметром e .

Можно показать [15], что зашумляющее преобразование V_{noise} для однокубитовых операторов (3) статистически эквивалентно следующему набору операторов Крауса

$$E_1 = \sqrt{\lambda_1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad E_2 = \sqrt{\lambda_2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix},$$

где

$$\lambda_1 = \frac{1}{2}(1 + \exp(-2e^2)), \quad \lambda_2 = \frac{1}{2}(1 - \exp(-2e^2)). \quad (5)$$

Аналогично, для зашумленного оператора контролируемого сдвига фазы V_θ^{noise} из (4) имеем

$$E_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{P} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$$E_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{1-P} \end{pmatrix},$$

где $P = \exp(-e^2)$.

Пусть начальное состояние системы, поступающей на вход моделируемой схемы, чистое. Тогда соответствующая матрица плотности имеет единичный ранг. Каждый оператор Крауса задает один из альтернативных путей эволюции квантовой системы, в связи с чем каждая квантовая операция увеличивает ранг матрицы плотности в геометрической прогрессии вплоть до максимально возможного ранга $r = 2^n$, где n – число кубитов в системе. Для сокращения числа необходимых вычислительных ресурсов будем на каждом шаге аппроксимировать полученную матрицу плотности матрицей плотности меньшего ранга (сохраняя лишь фиксированное число максимальных собственных значений и обнуляя остальные). Такая аппроксимация сохраняет положительную определенность матрицы плотности; однако ее след при

этом уменьшается, что соответствует уменьшению доли представителей, эволюционирующих по “правильному” пути.

Прямое применение аппроксимации единичным рангом к квантовому преобразованию Фурье ведет к следующей оценке, задающей точность преобразования для случайного состояния [15]:

$$F_{\text{QFT}} = P_H^n P_R^{n(n-1)/8}, \tag{7}$$

где $P_H = \frac{1}{2}(1 + \exp(-2e^2))$, $P_R = \exp(-e^2)$ – вероятности правильной работы преобразований Адамара и условного сдвига фазы соответственно.

Представленная формула использует тот факт, что преобразование Фурье содержит n преобразований Адамара и $n(n - 1)/2$ двухкубитовых фазовых преобразований. При этом, для случайного состояния на входе, равномерно распределенного по мере Хаара, двухкубитовое фазовое преобразование на каждом шаге действует только на четвертую часть от общего числа амплитуд случайного состояния, поэтому двухкубитовый шум порождает показатель степени $n(n - 1)/8$. Данная формула задает довольно грубую оценку для вероятности совпадения.

Рассматриваемая оценка может быть существенно улучшена приведением к главным осям операторов Крауса для вентиля условного сдвига фазы (6). Хорошо известно, что операторы Крауса определены с точностью до широкого унитарного произвола. Путем подбора подходящего унитарного преобразования диагонали матриц становятся ортогональными друг по отношению к другу. Операторы Крауса в новом представлении имеют вид [15]:

$$\tilde{E}_1 = \frac{1}{\sqrt{1+f^2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{P} + f\sqrt{1-P} \end{pmatrix}, \tag{8}$$

$$\tilde{E}_2 = \frac{1}{\sqrt{1+f^2}} \begin{pmatrix} -f & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -f & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -f & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -f\sqrt{P} + \sqrt{1-P} \end{pmatrix},$$

где $P = \exp(-e^2)$, $f = \frac{\sqrt{1+3P-P-1}}{\sqrt{P(1-P)}}$.

Операторы Крауса (6) и (8) унитарно эквивалентны, а следовательно, определяют одну и ту же квантовую операцию. Тогда улучшенная оценка для точности преобразования Фурье случайного состояния есть:

$$F_{\text{QFT}} = P_H^n \tilde{P}_R^{n(n-1)/8}, \tag{9}$$

где $\tilde{P}_R = \frac{(\sqrt{P}+f\sqrt{1-P})^2}{(1+f^2)^4}$.

Развитый приближенный подход позволяет прогнозировать влияние квантовых шумов на точность многокубитовых квантовых схем, которые пока еще не реализованы “в железе” и которые не могут быть промоделированы ни на каких современных или перспективных классических компьютерах.

4. Апробация на основе потенциала Пешль–Теллера. В настоящем разделе представлены результаты численных экспериментов, направленных на демонстрацию корректности приведенных выше формул и методов. Для этого было осуществлено моделирование динамики квантовой частицы, находящейся в потенциале Пешль–Теллера. Данный потенциал задается следующей формулой [16, 17]:

$$V(x) = -\frac{V_0}{\text{ch}^2(x/a)} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{\lambda(\lambda - 1)}{\text{ch}^2(x/a)}. \tag{10}$$

Здесь безразмерный параметр λ характеризует глубину потенциальной ямы. Параметры V_0 и a есть величины, характеризующие глубину потенциальной ямы и ее пространственный масштаб.

Рассматриваемая задача допускает точное квантовомеханическое решение [16, 17]. Ограничимся рассмотрением состояний дискретного спектра (т.е. связанных состояний, отвечающих отрицательной или нулевой энергии). Соответствующие энергетические уровни есть:

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}(\lambda - 1 - n)^2, \tag{11}$$

где $n = 0, 1, \dots, n_{\text{max}}$. Заметим, что связанным состояниям отвечает условие: $n_{\text{max}} \leq \lambda - 1$.

Волновые (ненормированные) функции стационарных состояний, выраженные через гипергеометрическую функцию, есть:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\text{ch}^{\lambda-1-n}(x/a)} \times F \left[-n, 2\lambda - 1 - n, \lambda - n, \frac{1}{2}(1 - \text{th}(x/a)) \right], \tag{12}$$

где $-\infty < x < \infty$.

Другая форма записи (через полиномы Гегенбауэра, являющиеся частной формой полиномов Якоби) имеет вид:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\text{ch}^{\lambda-1-n}(x/a)} C_n^{\lambda-n-\frac{1}{2}}(\text{th}(x/a)). \tag{13}$$

В примерах, представленных ниже, проводится сравнение результатов численных расчетов методом Залки–Визнера с учетом квантовых шумов с

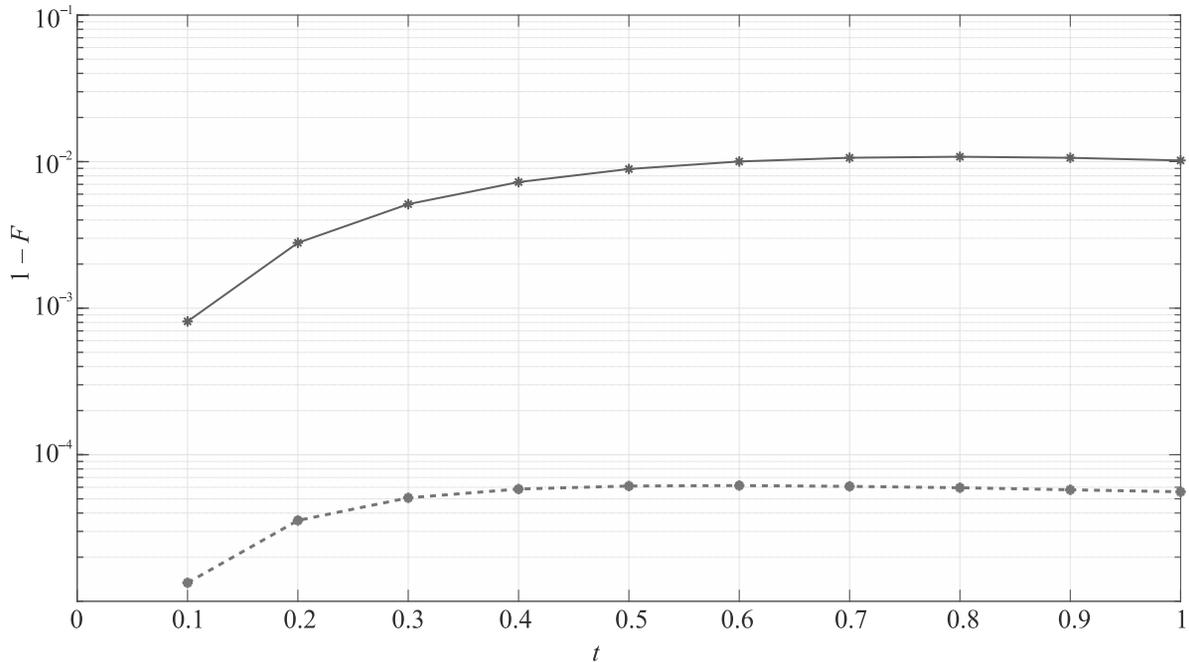


Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость потерь точности от времени эволюции квантового состояния для стандартной (верхняя сплошная кривая) и модифицированной формул Троттера (нижняя штриховая кривая)

точным аналитическим решением нестационарного уравнения Шредингера.

Рассматривалось следующее состояние, представляющее собой суперпозицию нулевой и первой моды (глубина потенциальной ямы и пространственный масштаб были выбраны соответственно равными $\lambda = 4$ и $a = 1$):

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \times \quad (14)$$

$$\times \left[\exp\left(-i\frac{E_0 t}{\hbar}\right) \psi_0(x) + i \exp\left(-i\frac{E_1 t}{\hbar}\right) \psi_1(x) \right].$$

В качестве показателя точности рассматривалась вероятность совпадения F (Fidelity), которая задается формулой $F = |\langle \psi_{\text{noise}} | \psi_{\text{theor}} \rangle|^2$ и характеризует степень соответствия между зашумленной волновой функцией ψ_{noise} , полученной методом Залки–Визнера, и точным (но дискретизованным) решением ψ_{theor} .

На рисунке 1 представлено сравнение стандартной и модифицированной формул Троттера для системы из 7 кубитов при $\Delta t = 0.1$. Видно, что модифицированная формула Троттера в рассматриваемом примере обеспечивает ошибку, которая более чем на 2 порядка ниже, чем ошибка стандартной формулы Троттера.

Рисунок 2 дает наглядное представление об уровне влияния квантовых шумов на точность получения решения уравнения Шредингера на

квантовом вычислителе. Рассматривалась эволюция квантового состояния регистра из 9 кубитов на интервале времени $0 \leq t \leq 1$ с шагом по времени $\Delta t = 0.05$ при уровне шума $e = 0.01$.

Сравнение развитой теории влияния квантовых шумов на точность моделирования с результатами численных расчётов представлено на рис. 3 и 4.

Из рисунка 3 видно, что улучшенная оценка на основе формулы (9) имеет много лучшую точность по сравнению с оценкой на основе (7) и визуально совпадает с численными экспериментами. Рассматривалась эволюция квантового состояния регистра из 7 кубитов на интервале времени $0 \leq t \leq 1$ с шагом по времени $\Delta t = 0.05$ при уровне шума $e = 0.01$, было выполнено 30 экспериментов.

На рисунке 4 видно, что улучшенная оценка дает адекватный прогноз точности для различного числа кубитов в регистре. Рассматривалась эволюция квантового состояния регистров из 7, 8 и 9 кубитов на интервале времени $0 \leq t \leq 1$ с шагом по времени $\Delta t = 0.05$ при уровне шума $e = 0.01$, для каждого регистра было выполнено по 30 экспериментов.

В представленных на рис. 3 и 4 случаях ошибка дискретизации, обусловленная конечным числом кубитов в регистре, оказалась пренебрежимо малой по сравнению с ошибками, вызванными шумами в квантовом преобразовании Фурье. По этой причине уровень точности F оказался более низким для большего числа кубитов в регистре.

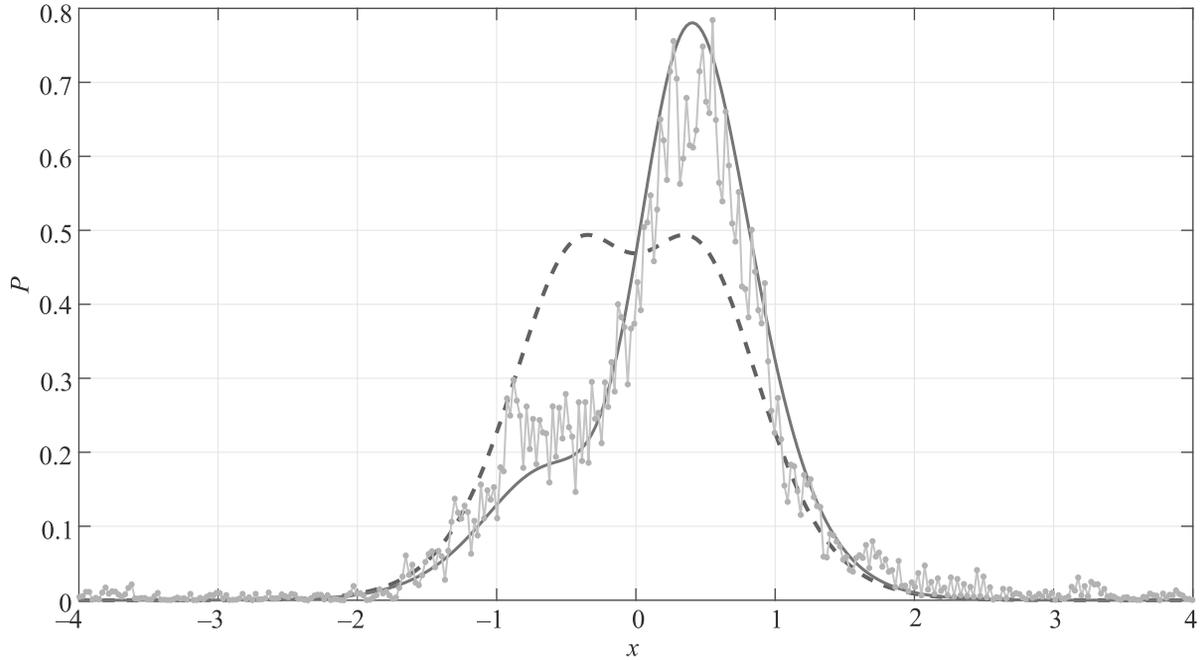


Рис. 2. (Цветной онлайн) Иллюстрация эволюции плотности распределения в координатном представлении. Начальное состояние – штриховая кривая, конечное состояние в момент времени $t = 1$ – сплошная кривая, зашумленное решение Залки–Визнера представлено набором точек

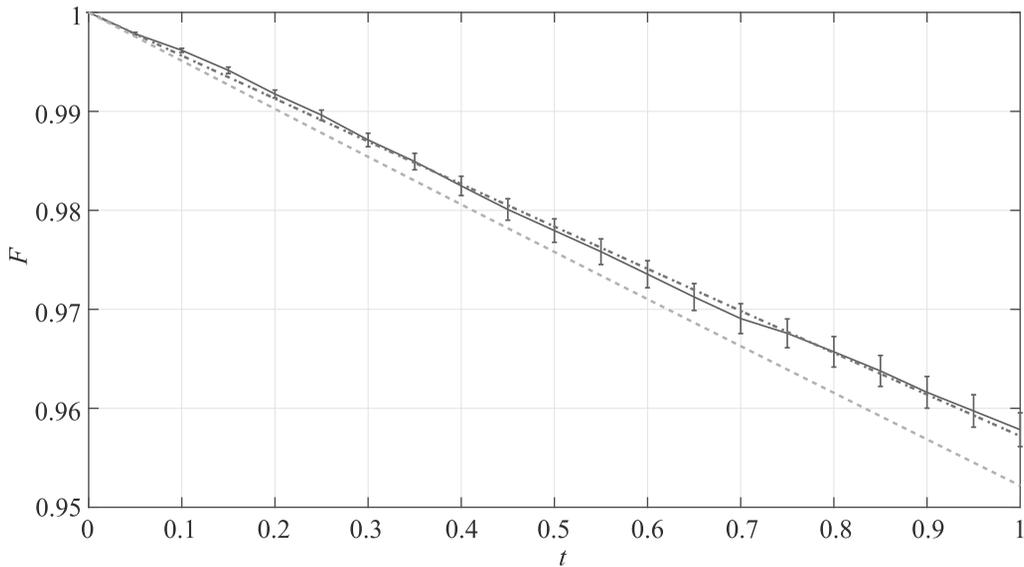


Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость точности алгоритма Залки–Визнера моделирования движения частицы в потенциале Пешль–Теллера от времени эволюции состояния. Исходная теоретическая оценка – штриховая линия, улучшенная оценка – штрих-пунктирная линия, зашумленное численное решение Залки–Визнера – сплошная линия с отмеченными среднеквадратичными ошибками

Теоретические кривые на рисунках 3 и 4 построены по следующей формуле, основанной на формуле (9):

$$F = (F_{\text{QFT}})^{2t/\Delta t}. \tag{15}$$

В формуле (15) величина $t/\Delta t$ представляет собой число шагов по времени, коэффициент 2 в показате-

ле степени связан с тем, что на каждом шаге преобразование Фурье совершается дважды (прямое и обратное преобразование).

На рисунке 5 представлен прогноз точности решения уравнения Шредингера для многоэлектронных систем с различным числом электронов и с уче-

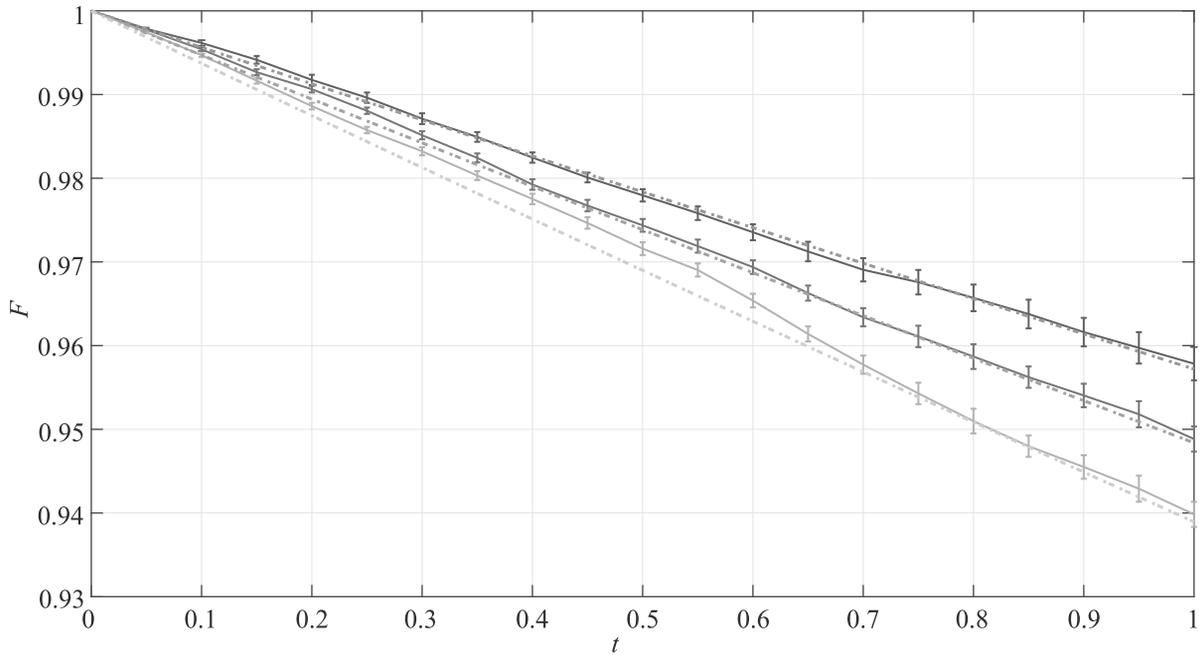


Рис. 4. (Цветной онлайн) Зависимость точности алгоритма Залки–Визнера моделирования движения частицы в потенциале Пешль–Теллера от времени эволюции состояния при использовании различного числа кубитов в квантовом регистре. Зашумленное численное решение Залки–Визнера – сплошные линии с отмеченными среднеквадратичными ошибками, улучшенные теоретические оценки – штриховые линии, кривые сверху вниз отвечают соответственно 7-ми, 8-ми и 9-ти кубитам

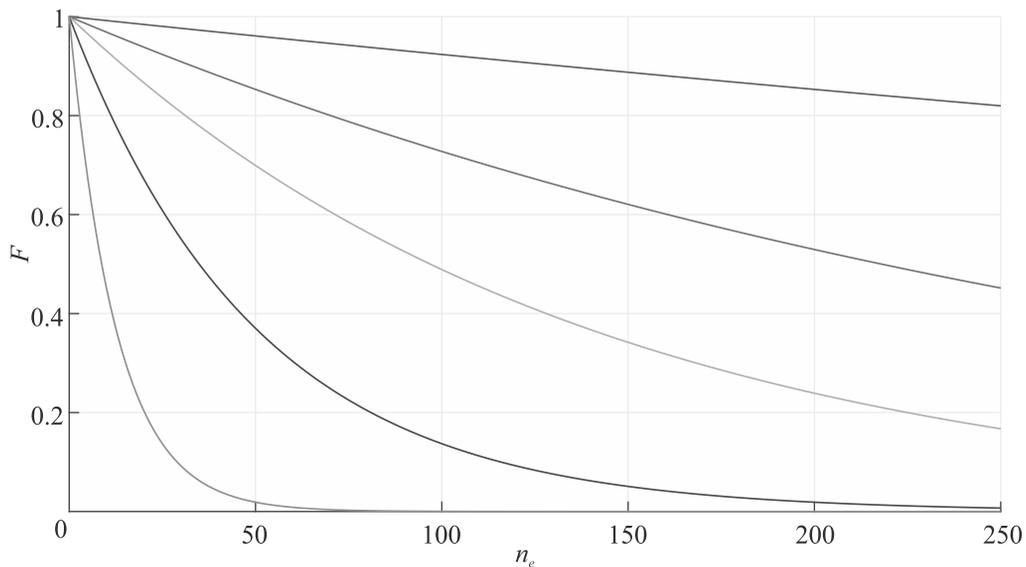


Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость точности моделирования алгоритма Залки–Визнера многоэлектронных систем от числа электронов для различных уровней шума. Кривые сверху вниз отвечают увеличивающимся значениям уровня шума, соответственно, $e = 0.001, 0.002, 0.003, 0.005, 0.01$

том различного уровня шумов. Прогноз получен по формуле (15) при $t = 1$, $\Delta t = 0.1$, считалось что система из n_e электронов задана в $3n_e$ конфигурационном пространстве, при этом на каждую координа-

ту было выделено $n_0 = 8$ кубитов, соответствующее преобразование Фурье каждой координаты содержит в себе n_0 преобразований Адамара и $n_0(n_0 - 1)/2$ преобразований контролируемого фазового сдвига.

Из рисунка 5 видно, что для адекватного моделирования квантовых систем из десятков электронов требуется иметь уровень ошибки порядка $\epsilon = 0.01$ и ниже, а для моделирования систем из сотен электронов нужно обеспечить уровень $\epsilon = 0.001$ и ниже. При этом вероятность ошибки отдельного вентиля должна достигать уровня ϵ^2 , т.е. порядка 10^{-4} – 10^{-6} .

Заметим, что моделирование может оказаться успешным и при относительно невысоких уровнях точности, когда F порядка 0.01 и даже ниже. В этом случае искомый результат моделирования должен достигаться за счет большого объема статистики, получаемого в квантовых измерениях. Процесс отладки экспериментальных и технологических процедур требует широкого использования методов квантовой томографии [18].

Заметим также, что задача моделирования квантовой системы может быть совмещена с проведением квантовых измерений во взаимно-дополнительных координатном и импульсном пространствах в рамках томографического метода Монте-Карло, предложенного в [19].

Реализация алгоритма Залки–Визнера может быть осуществлена на различных платформах, включая ионы в ловушках [20], атомы в ловушках [21, 22] и сверхпроводниковые кубиты [23]. Представленные в настоящем исследовании результаты могут быть использованы для различных экспериментальных реализаций алгоритма на большом числе кубитов в качестве базовой модели оценки итоговой точности квантового алгоритма. Многокубитная реализация рассматриваемого алгоритма позволит находить решения уравнения Шредингера для весьма сложных квантовых систем, радикально расширяя возможности современных аналитических и численных методов решения данного уравнения [24, 25].

В настоящем исследовании мы сосредоточились на анализе влияния шумов в квантовом преобразовании Фурье на точность решения уравнения Шредингера, отвлекаясь от ряда существенных факторов, таких как конечная точность дискретизации, ошибки в фазовых преобразованиях, релятивистские поправки, фермионный характер многоэлектронных систем и др. Анализ влияния этих факторов на точность решения уравнения Шредингера может стать предметом отдельных исследований.

5. Выводы. Разработан подход к моделированию квантовых систем на квантовом компьютере с использованием метода Залки–Визнера с учетом квантовых шумов.

Получены аналитические оценки для точности алгоритма Залки–Визнера, обусловленные ошибками при реализации квантового преобразования Фурье.

Разработанные методы и алгоритмы апробированы на примере решения нестационарного уравнения Шредингера для частицы в потенциале Пешль–Теллера. Продемонстрировано хорошее согласие результатов численного моделирования методом Монте-Карло с аналитическими оценками.

Представлен метод прогнозирования точности решения уравнения Шредингера для многоэлектронных квантовых систем.

Авторы надеются, что результаты выполненного исследования имеют существенное значение для разработки методов моделирования квантовых систем с использованием квантовых компьютеров и симуляторов, что критически важно для решения практически значимых задач в самых различных научных областях.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФТИАН им. К. А. Валиева РАН Минобрнауки РФ по теме # 0066-2019-0005 при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС” (грант # 20-1-1-34-1).

1. R. Somma, G. Ortiz, E. Knill, and J. Gubernatis, *Int. J. of Quant. Inf.* **1**, 189 (2003).
2. I. Kassal, J.D. Whitfield, A. Perdomo-Ortiz, M.-H. Yung, and A. Aspuru-Guzik, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **62**, 185 (2011).
3. J. Diaz, K. Jansen, J.D.P. Rolim, and U. Zwick, *Approximation, Randomization, and Combinatorial Optimization. Algorithms and Techniques. 9th International Workshop on Approximation for Combinatorial Optimization Problems (APPROX 2006) and 10th International Workshop on Randomization and Computation (RANDOM 2006), Proceedings*, Barcelona, Spain (2006).
4. C. Zalka, *Fortschr. Phys.* **46**, 877 (1998); arXiv:quant-ph/9603026.
5. S. Wiesner, arXiv:quant-ph/9603028 (1996).
6. G. Benenti and G. Strini, *Am. J. Phys.* **76**, 657 (2008).
7. J. Abhijith, A. Adedoyin, J. Ambrosiano et al. (Collaboration), arXiv:1804.03719 (2020).
8. Y. Fan, *Int. J. of Quant. Inf.* **10**(05), 1250049 (2012).
9. R. D. Somma, *Quantum Info. Comput.* **16**, 1125 (2016).
10. I. Kassal, S.P. Jordan, P.J. Love, M. Mohseni, and A. Aspuru-Guzik, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **105**, 18681 (2008).
11. Ю. И. Ожигов, *Матем. моделирование* **24**(2), 109 (2012).

12. М. Нильсен, И. Чанг, *Квантовые вычисления и квантовая информация*, Мир, М. (2006), 824 с.
13. А. С. Холево, *Квантовые системы, каналы, информация*, МЦМНО, М. (2014), 311 с.
14. Yu. I. Bogdanov, A. Yu. Chernyavskiy, A. S. Holevo, V. F. Lukichev, and A. A. Orlikovsky, Proc. of SPIE **8700**, 87001A (2013); arXiv: 1207.3313 [quant-ph].
15. Yu. I. Bogdanov, A. Yu. Chernyavskiy, B. I. Bantysh, V. F. Lukichev, A. A. Orlikovsky, I. A. Semenihih, D. V. Fastovets, and A. S. Holevo, Proc. of SPIE **9440**, 94401H (2014); arXiv:1412.2293 [quant-ph].
16. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, М. (1974), 752 с.
17. З. Флюге, *Задачи по квантовой механике*, пер. с англ. Б. А. Лысова, под ред. А. А. Соколова, Мир, М. (1974), т. 1, 341 с.
18. Б. И. Бантыш, А. Ю. Чернявский, Ю. И. Богданов, Письма в ЖЭТФ **111**(9), 615 (2020).
19. Ю. И. Богданов, *Квантовая электроника* **37**(12), 1091 (2007).
20. И. В. Заливако, И. А. Семериков, А. С. Борисенко, М. Д. Аксенов, К. Ю. Хабарова, Н. Н. Колачевский, Письма в ЖЭТФ **114**(2), 53 (2021).
21. V. M. Porozova, L. V. Gerasimov, I. B. Bobrov, S. S. Straupe, S. P. Kulik, and D. V. Kupriyanov, Phys. Rev. A **99**, 043406 (2019).
22. L. V. Gerasimov, R. R. Yusupov, I. B. Bobrov, D. Shchepanovich, E. V. Kovlakov, S. S. Straupe, S. P. Kulik, and D. V. Kupriyanov, Phys. Rev. A **103**, 062426 (2021).
23. И. Н. Москаленко, И. С. Беседин, И. А. Цицилин, Г. С. Мажорин, Н. Н. Абрамов, А. Григорьев, И. А. Родионов, А. А. Доброносорова, Д. О. Москалев, А. А. Пищимова, А. В. Устинов, Письма в ЖЭТФ **110**(8), 569 (2019).
24. А. М. Дюгаев, П. Д. Григорьев, Письма в ЖЭТФ **112**(2), 107 (2020).
25. А. Г. Кудрявцев, Письма в ЖЭТФ **111**(2), 112 (2020).

A statistical model for short-wavelength collective chain fluctuations in a lipid bilayer under a high external electric field

V. E. Zakhvataev¹⁾

Federal Research Center “Krasnoyarsk Scientific Center of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences”,
660036 Krasnoyarsk, Russia

Siberian Federal University, 660041 Krasnoyarsk, Russia

Submitted 8 August 2021
Resubmitted 14 August 2021
Accepted 20 August 2021

DOI: 10.31857/S1234567821180105

We develop a statistical model of short-wavelength number density fluctuations in the hydrophobic region of a lipid bilayer, composed of hydrocarbon lipid chains, under a high (~ 1 V/nm) quasistatic uniform external electric field. The wave vector \mathbf{k} of the number density fluctuations is assumed to be in the plane of the bilayer. We consider wave numbers k up to approximately the position of the peak of the density-density static structure factor $k_{\max} \sim 14$ nm⁻¹.

The hydrophobic region of a lipid bilayer is represented as a classical system of particles. The microscopic particle density is represented as $\rho_{\text{micro}}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$, where $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ are the positions of the particles (their centers of mass). The bound charges form localized groups that belong to individual particles. Using a dipole approximation for these groups of charge, we get for the microscopic charge density $\rho_{\text{micro}}^{(q)}(\mathbf{r}) = -\sum_{i=1}^N \mathbf{d}(\mathbf{r}_i) \cdot \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$, where $\mathbf{d}(\mathbf{r}_i)$ is the electric dipole moment of the particle i , induced by the external field (it is assumed that there are no free electric charges).

Under the external uniform electric field $\mathbf{E}^{(\text{ext})}$, the system remains homogeneous. To derive the static structure factor of the system, we consider an external nonuniform perturbation $\phi(\mathbf{r})$ coupled to the microscopic particle density. The Hamiltonian of the system is given by

$$H(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) = K(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) + W(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) - \sum_{i=1}^N \mathbf{d}(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{E}^{(\text{ext})} + \sum_{i=1}^N \phi(\mathbf{r}_i),$$

where $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N$ are the momenta of the particles, K is the kinetic energy, W is the interparticle potential en-

ergy, and $\sum_{i=1}^N \phi(\mathbf{r}_i) = \int \rho_{\text{micro}}(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ is the potential energy due to the interaction of the particles with $\phi(\mathbf{r})$.

The average number density is defined as $\rho(\mathbf{r}) = \langle \rho_{\text{micro}}(\mathbf{r}) \rangle$, where the bracket denotes an average over a grand canonical ensemble. The grand partition function has the form

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(2\pi mk_B T)^{3N/2}}{h^{3N} N!} \int \exp \left\{ -\frac{1}{k_B T} \times \left[W - \mu N + \sum_{i=1}^N [\phi(\mathbf{r}_i) - \mathbf{d}(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{E}^{(\text{ext})}] \right] \right\} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N,$$

where T is the temperature, μ is the chemical potential in electric field, m is the mass of the particle, k_B is the Boltzmann constant and h is the Planck constant. The average charge density is defined as the ensemble average of the microscopic charge density [1]

$$\rho^{(q)}(\mathbf{r}) = \langle \rho_{\text{micro}}^{(q)}(\mathbf{r}) \rangle. \quad (1)$$

In the quasidelectrostatic approximation, the average value of the internal electric field $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ in the medium can be defined by the relation [1]

$$\text{div}(\mathbf{E} - \mathbf{E}^{(\text{ext})}) = 4\pi \rho^{(q)} \quad (2)$$

The averaging (1) implies that we deal with the averaged in the same sense values of \mathbf{E} through Eq. (2) [1].

The nonpolar lipid chains exhibit a frequency-independent, approximately isotropic, low-value permittivity with a magnitude ~ 2 , which corresponds to their electronic polarization [2]. Since the dominant mechanism of polarization of lipid chains is the electronic polarization, the characteristic distance λ of the decay of the correlations of polarization fluctuations is determined by the length scale of the overlap of electron wave functions ~ 0.05 nm [1]. Therefore we assume that for

¹⁾e-mail: zakhvataev.ve@ksc.krasn.ru

wave numbers $k \leq k_{\max} \approx 14 \text{ nm}^{-1}$, that are smaller than $\lambda^{-1} \sim 20 \text{ nm}^{-1}$, the average electric field in the medium \mathbf{E} can be represented as a sum of its mean value $\mathbf{E}_0 = \text{const}$ and fluctuation $\delta\mathbf{E}$, and one can use the linear approximation in $\delta\mathbf{E}$. We consider the characteristic case $\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_0 = 0$. We show that under the conditions imposed, rapidly varying in space fields, which cause the nonlocal character of the relation between \mathbf{D} and \mathbf{E} , are decoupled from the number density fluctuations.

An expansion of the free energy

$$F(\rho, T, \mathbf{E}) = \langle H \rangle - TS - \frac{1}{4\pi} \int \mathbf{D} \cdot \mathbf{E} d\mathbf{r} - \int \rho(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})d\mathbf{r} + (E^{(\text{ext})})^2/8\pi,$$

where S is the entropy, in terms of number density fluctuations may be written in the form

$$\Delta F = \frac{1}{2} \iint \theta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta\rho(\mathbf{r})\delta\rho(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'d\mathbf{r}.$$

We show that under the imposed restrictions, $\theta(k)$ ($\theta(\mathbf{k}) = \int \theta(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})d\mathbf{r}$) can be approximated as

$$\theta(k) \approx \theta^{(0)}(k) - \left(\frac{\partial^2 \varepsilon(\rho_0)}{\partial \rho^2} \right)_T \frac{E_0^2}{8\pi}, \quad (3)$$

where $\varepsilon = \varepsilon(k = 0)$ is the permittivity of the medium, $\rho = \rho_0$ is the equilibrium number density, and $\theta^{(0)}(k)$ is determined from the static structure factor of the system in the absence of an external electric field. Using the technique given, e.g., in [3], we obtain for the static structure factor

$$S(k, E_0) \approx \frac{k_B T}{\rho_0 \theta^{(0)}(k) - \mathbf{H}}, \quad (4)$$

where $\mathbf{H} = \rho_0 (\partial^2 \varepsilon(\rho_0) / \partial \rho^2)_T E_0^2 / 8\pi$.

On the basis of the developed statistical model, we derive the Brillouin components of the dynamic structure factor of the system from first principles, i.e., from the Liouville equation, in the framework of the Zwanzig-Mori projection operator formalism.

We compare the results of the developed theory with new results of MD simulations on the initiation of lipid bilayer electropores [4] to show a nearly perfect agreement. Thus, on the microscopic level, the model explains the effect revealed in [5].

In order to assess the robustness of the analysis, we set $\theta(k) = \theta^{(0)}(k) + \theta^{(e)}(k)$ instead of Eq. (3) and expand $\theta^{(e)}(k)$ in $(\lambda k)^2$ to obtain

$$S(k, E_0) \approx \frac{k_B T}{\rho_0 \theta^{(0)}(k) - \mathbf{H}(1 - \lambda^2 k^2)}. \quad (5)$$

Comparison of the static structure factor given by Eq. (5) with $\lambda = 0.05 \text{ nm}$ with $S(k, E_0)$ given by Eq. (4) indicates the robustness of our analysis. Thus, one may expect that the presented statistical model could be applied to handle analogous problems for a range of similar soft matter systems such as hydrophobic, low permittivity interior of globular proteins and DNA molecules, as well as nonpolar dielectric fluids.

This work was supported by Russian Foundation for Basic Research, the Government of the Krasnoyarsk Territory, and the Krasnoyarsk Regional Fund of Science (project # 19-41-240003).

This is an excerpt of the article “A statistical model for short-wavelength collective chain fluctuations in a lipid bilayer under a high external electric field”. Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S002136402118003X

1. M. A. Vorotyntsev and A. A. Kornyshev, *Electrostatics of Media with Spatial Dispersion*, Nauka, M. 1993).
2. Z. Salamon and G. Tollin, *Biophys. J.* **80**, 1557 (2001).
3. J.-P. Hansen and I. McDonald, *Theory of Simple Liquids* Academic, New York (1986).
4. P. T. Vernier, Z. A. Levine, M.-C. Ho, S. Xiao, I. Semenov, and A. G. Pakhomov, *J. Memb. Biol.* **248**, 837 (2015).
5. V. E. Zakhvataev, *J. Chem. Phys.* **151**, 234902 (2019).

Текущий авторский указатель томов 111–114 ¹⁾

Abbad A. 112 , 387 (364)	Boukourt A. 111 , 228 (210)	Dzhappuev D. D. 112 , 797 (753)
Abbaoui S. 111 , 228 (210)	Burtebaev N. 111 , 483 (409)	Elsherif O. 111 , 10 (8)
Afashokov Yu. Z. 112 , 797 (753)	Chen J. 112 , 119 (117)	Eltsov V. B. 111 , 462 (389);
AlFiky M. T. 111 , 10 (8)	Cherid S. 111 , 819 (694)	111 , 707 (600)
Alsobhi B. O. 113 , 326 (322)	Chernodubov D. A. 112 , 112 (106)	Esin V. D. 111 , 813 (685);
Andjelkovic L. 113 , 236 (238)	Chu J. H. 113 , 131 (120)	113 , 695 (662)
Aristov D. N. 113 , 729 (689)	Clark J. W. 111 , 86 (96);	Falcon E. 112 , 799 (757)
Aziz Z. 112 , 313 (290)	112 , 700 (657)	Friesen A. V. 111 , 147 (129)
Barash Yu. S. 113 , 695 (662)	Danilov A. N. 111 , 483 (409);	Garifullin I. A. 113 , 210 (194)
Barkalov O. I. 111 , 524 (456)	112 , 499 (463)	Goncharov S. A. 111 , 483 (409);
Baskakov A. O. 111 , 524 (456)	Demyanova A. S. 111 , 483 (409);	112 , 499 (463)
Belyaeva T. L. 111 , 483 (409);	112 , 499 (463)	Gorbacheva E. A. 112 , 797 (753)
112 , 499 (463)	Deviatov E. V. 111 , 813 (685);	Gurov Yu. B. 111 , 483 (409)
Benatmane S. 111 , 819 (694)	Deviatov E. V. 113 , 390 (389);	Haid S. 112 , 387 (364)
Bendeddouche Z. 111 , 228 (210)	113 , 695 (662)	Hamed A. M. 111 , 10 (8)
Benstaali W. 112 , 313 (290);	Dmitriev A. P. 113 , 132 (127)	He X. 112 , 172 (157)
112 , 387 (364)	Dmitriev S. V. 111 , 483 (409)	Houari M. 112 , 313 (290);
Bentata S. 112 , 313 (290);	Dmitriev V. V. 112 , 820 (780)	112 , 387 (364)
112 , 387 (364)	Dolinina D. A. 111 , 303 (268);	Inyushkin A. V. 112 , 112 (106)
Boroun G. R. 114 , 3 ()	112 , 79 (71)	Iorsh I. V. 114 , 154 ()
Bouadjemi B. 112 , 313 (290);	Doumi B. 112 , 617 (568)	Ioselevich A. S. 114 , 41 ()
112 , 387 (364)	Dzaparova I. M. 112 , 797 (753)	Irkhin V. Yu. 111 , 242 (230)

¹⁾В скобках указаны номера страниц английского издания для вып. 111(1)–113(12).

- Iskrenovic P. **113**, 236 (238)
- Jansitov D. **111**, 483 (409)
- Japaridze G. S. **112**, 700 (657)
- Jin G. **111**, 301 (264)
- Kachorovskii V. Yu. **113**, 729 (689)
- Kacimi S. **111**, 228 (210)
- Kadiri A. **111**, 228 (210)
- Kalinovsky Yu. L. **111**, 147 (129)
- Kamashev A. A. **113**, 210 (194)
- Kamenshchik A. Yu. **111**, 343 (306);
111, 485 (416)
- Karpikov I. S. **112**, 797 (753)
- Khadzhiev M. M. **112**, 797 (753)
- Khlebnikov S. V. **111**, 483 (409)
- Khodel V. A. **111**, 86 (96)
- Klimenko N. F. **112**, 797 (753)
- Kochurin E. **112**, 799 (757)
- Kolesnikov N. N. **111**, 813 (685);
113, 390 (389);
113, 695 (662)
- Kolganov N. **111**, 623 (519)
- Kolodny S. A. **114**, 154 ()
- Kompaniets L. A. **112**, 482 (444)
- Korotin M. A. **114**, 346 ()
- Kotikov A. V. **111**, 59 (67)
- Kozin V. K. **114**, 154 ()
- Kudzhaev A. U. **112**, 797 (753)
- Kukovitsky E. **113**, 265 (273)
- Kurenya A. N. **112**, 797 (753)
- Kutuzov M. S. **112**, 820 (780)
- Lantri T. **112**, 313 (290);
112, 387 (364)
- Lebed A. G. **111**, 249 (239);
113, 731 (701)
- Leevik Y. S. **112**, 700 (657)
- Lidvansky A. S. **112**, 797 (753)
- Likhovid N. A. **114**, 4 ()
- Li L. **112**, 119 (117)
- Louko J. **111**, 483 (409)
- Luchkin V. N. **113**, 727 (681)
- Luo M. **112**, 68 (58)
- L'vov V. S. **111**, 462 (389);
111, 707 (600)
- Lyubutina M. V. **111**, 524 (456)
- Lyubutin I. S. **111**, 524 (456)
- Mantsevich V. N. **113**, 727 (681)
- Maslova N. S. **113**, 727 (681)
- Maslov V. A. **111**, 483 (409)
- Matouguia M. **112**, 387 (364)
- Matougui M. **112**, 313 (290)
- Mavrogordatos Th. K. **112**, 304 (274)
- Medvedev S. A. **111**, 524 (456)
- Mikhailova O. I. **112**, 797 (753)
- Milenkovic M. R. **113**, 236 (238)
- Mitkin P. G. **113**, 446 (433)
- Mokaddem A. **112**, 617 (568)
- Morozov An. **111**, 623 (519)
- Msezane A. Z. **112**, 700 (657)
- Naryshkin Yu. G. **113**, 221 (213)
- Naumov P. G. **111**, 524 (456)
- Nikolic A. S. **113**, 236 (238)
- Niyazov R. A. **113**, 729 (689)
- Ogarkova Yu. L. **111**, 524 (456)
- Ogloblin A. A. **111**, 483 (409);
112, 499 (463)
- Orlova N. N. **113**, 390 (389)
- Panov A. V. **111**, 32 (36)
- Pantuev V. S. **114**, 4 ()
- Penionzhkevich Yu. E. **111**, 483 (409)
- Peshcherenko N. S. **114**, 41 ()
- Petkov V. B. **112**, 797 (753)
- Pikalov A. **113**, 274 (285)

- Remigio A. S. **113**, 587 (563)
- Remil G. **112**, 313 (290)
- Ricard G. **112**, 799 (757)
- Romanenko V. S. **112**, 797 (753)
- Roy A. M. **112**, 187 (173);
113, 263 (265)
- Rubtsov G. I. **112**, 797 (753)
- Ryshkov N. S. **113**, 390 (389)
- Sakhin V. **113**, 265 (273)
- Semenov A. N. **111**, 50 (55)
- Sepper O. **111**, 249 (239)
- Sergeev V. M. **111**, 483 (409)
- Shabara R. M. **113**, 326 (322)
- Shaginyan V. R. **112**, 700 (657)
- Shalin A. S. **111**, 303 (268);
112, 79 (71)
- Shen Y. H. **112**, 68 (58)
- Shreter Yu. G. **112**, 112 (106)
- Simonov Yu. A. **113**, 589 (568)
- Skryabin Yu. N. **111**, 242 (230)
- Sobolev Yu. G. **111**, 483 (409)
- Soldatov A. A. **112**, 820 (780)
- Solovyev I. V. **112**, 686 (642)
- Sonin E. B. **111**, 705 (598)
- Starastin V. I. **111**, 483 (409);
112, 499 (463)
- Starchikov S. S. **111**, 524 (456)
- Streltsov S. V. **112**, 686 (642)
- Subbotin A. V. **111**, 50 (55)
- Suljagic M. **113**, 236 (238)
- Surovtsev E. V. **112**, 820 (780)
- Tadger A. **112**, 617 (568)
- Talanov Yu. **113**, 265 (273)
- Taldenkov A. N. **112**, 112 (106)
- Tan Q. **111**, 301 (264);
112, 172 (157)
- 112**, 172 (157)
- Teitel'baum G. **113**, 265 (273)
- Timonina A. V. **111**, 813 (685);
113, 390 (389);
113, 695 (662)
- Toneev V. D. **111**, 147 (129)
- Troitsky S. V. **112**, 797 (753)
- Tronconi A. **111**, 485 (416)
- Trzaska W. H. **111**, 483 (409);
112, 499 (463)
- Tyurin G. P. **111**, 483 (409)
- Unatlov I. B. **112**, 797 (753)
- Ushakov A. V. **112**, 686 (642)
- Vardanyan T. **111**, 343 (306)
- Venturi G. **111**, 485 (416)
- Volovik G. E. **111**, 441 (368);
111, 689 (582);
112, 539 (505);
113, 546 (538);
113, 624 (602);
114, 273 ()
- Voronenkov V. V. **112**, 112 (106)
- Wang H. **111**, 301 (264);
112, 172 (157)
- Xu Y. E. **113**, 131 (120)
- Yanin A. F. **112**, 797 (753)
- Yudin A. N. **112**, 820 (780)
- Yulin A. V. **111**, 303 (268);
112, 79 (71)
- Zainullina V. M. **114**, 346 ()
- Zakharov B. G. **112**, 435 (393);
112, 723 (681)
- Zakharov V. I. **113**, 446 (433)
- Zakhvataev V. E. **112**, 482 (444)
- Zaoui A. **111**, 228 (210)
- Zarembo K. **111**, 173 (157)
- Zaslavskii O. B. **111**, 300 (260);

- 113, 789 ()
- Zhezher Ya. V. **112**, 797 (753)
- Zhuravleva K. V. **112**, 797 (753)
- Zitouni A. **112**, 313 (290)
- Zubarev N. **112**, 799 (757)
- Zubkov M. A. **113**, 448 (445)
- Zverev M. V. **111**, 86 (96)
- Авдеев М. В. **111**, 154 (139)
- Аверкиев Н. С. **113**, 52 (47)
- Авосопянц Г. В. **111**, 646 (543)
- Агасян Н. О. **111**, 219 (201)
- Агафонцев Д. С. **114**, 67 ()
- Азаревич А. Н. **112**, 451 (413);
113, 533 (526)
- Айдакина Н. А. **113**, 96 (86)
- Акмаев М. А. **112**, 650 (607)
- Акопян Л. А. **112**, 626 (585)
- Аксенов М. Д. **114**, 53 ()
- Аксенов С. В. **111**, 321 (286)
- Алексеев В. А. **114**, 60 ()
- Алексенский А. Е. **111**, 375 (338)
- Алешкин В. Я. **112**, 541 (508)
- Альшиц В. И. **112**, 127 (127);
113, 678 (646)
- Аминев Д. Ф. **112**, 501 (471)
- Амусья М. Я. **111**, 536 (472)
- Амусья М. Я. **111**, 12 (18);
Амусья М. Я. **112**, 233 (219);
112, 709 (673)
- Андреев А. А. **112**, 598 (550)
- Андреева М. А. **113**, 175 (162)
- Андреев И. В. **113**, 740 (713)
- Андрианов Е. С. **112**, 725 (688);
114, 43 ()
- Андрюшечкин Б. В. **111**, 697 (591)
- Аникин А. А. **114**, 212 ()
- Анисимов А. Н. **112**, 813 (774);
114, 323 ()
- Антипина Л. Ю. **111**, 244 (235)
- Антоненко Д. С. **112**, 466 (428)
- Антонов Н. Н. **111**, 291 (251)
- Антропов А. С. **112**, 334 (310)
- Аплеснин С. С. **112**, 680 (636)
- Арбузов А. Б. **112**, 493 (457)
- Арбузова Т. И. **111**, 186 (172)
- Аристова И. М. **113**, 189 (176)
- Аристов В. Ю. **113**, 189 (176)
- Аронин Кобелев А. С. Н. П. **113**,
341 (345)
- Артемов В. В. **112**, 374 (352)
- Артемьев А. А. **112**, 291 (263)
- Артюх А. А. **111**, 93 (109);
111, 469 (397)
- Архипенко М. В. **113**, 763 (733)
- Архипов М. В. **111**, 586 (484);
Архипов М. В. **111**, 794 (668);
Архипов М. В. **113**, 237 (242);
Архипов М. В. **114**, 156 ();
114, 298 ()
- Архипов Р. М. **111**, 586 (484);
Архипов Р. М. **111**, 794 (668);
Архипов Р. М. **113**, 237 (242);
Архипов Р. М. **113**, 636 (611);
Архипов Р. М. **114**, 156 ();
114, 298 ()
- Асадчиков В. Е. **111**, 597 (489);
Асадчиков В. Е. **113**, 161 (149);
113, 175 (162)
- Астахов Г. В. **114**, 323 ()
- Афанасьев А. Е. **111**, 757 (608)
- Афанасьева Е. Ю. **111**, 520 (452)
- Афанасьев В. П. **111**, 230 (218)
- Афонин А. Г. **113**, 223 (226)

- Афонин Г. В. **111**, 691 (586)
- Ахматханов А. Р. **112**, 644 (602)
- Ашитков С. И. **113**, 84 (75);
113, 311 (308)
- Бабенко П. Ю. **114**, 13 ()
- Бабиченко В. С. **112**, 618 (577)
- Бабунц Р. А. **112**, 813 (774)
- Бабушкин И. **114**, 298 ()
- Багаев В. С. **112**, 160 (145);
114, 96 ()
- Баева Э. М. **111**, 88 (104)
- Бакаров А. К. **112**, 54 (45)
- Бакаров А. К. s **112**, 475 (437)
- Бакшеев Д. Г. **112**, 196 (186);
113, 328 (331)
- Балаев Д. А. **111**, 197 (183)
- Балакин Д. А. **113**, 590 (572)
- Балацкий Д. В. **113**, 267 (279)
- Балдин А. А. **111**, 291 (251)
- Балтенков А. С. **111**, 12 (18);
111, 536 (472)
- Балькин В. И. **111**, 757 (608)
- Банников М. И. **111**, 166 (151);
- Банников М. И. **112**, 263 (246);
- 113**, 548 (542)
- Бантыш Б. И. **111**, 615 (512)
- Барабанов А. Л. **112**, 343 (323)
- Баранов В. Т. **113**, 223 (226)
- Баранов П. Г. **112**, 813 (774);
114, 323 ()
- Барецки Б. **111**, 674 (568);
- Барецки Б. **112**, 45 (37);
112, 275 (257)
- Баркалова А. С. **112**, 88 (84)
- Барнов Е. В. **113**, 223 (226)
- Барсукова М. Г. **111**, 40 (46)
- Барышников К. А. **111**, 820 (703)
- Баулин Р. А. **113**, 175 (162)
- Бахтизин Р. З. **111**, 396 (357)
- Башаров А. М. **111**, 632 (532);
111, 798 (672)
- Баюков О. А. **113**, 267 (279)
- Бекиров А. Р. **112**, 361 (341)
- Белавин А. **112**, 388 (370)
- Белинский А. В. **113**, 590 (572)
- Белов Н. К. **111**, 305 (273)
- Белогорлов А. А. **113**, 378 (378)
- Белозеров Е. И. **112**, 516 (485)
- Белоплотов Д. В. **113**, 133 (129)
- Белотелов В. И. **111**, 52 (62);
- Белотелов В. И. **112**, 314 (299);
- Белотелов В. И. **112**, 749 (710);
112, 759 (720)
- Белых В. В. **112**, 650 (607)
- Белых С. Ф. **111**, 531 (467)
- Бельская Н. А. **113**, 267 (279);
114, 89 ()
- Бельтюков Я. М. **112**, 547 (513)
- Бен Хамида Я. **112**, 743 (705)
- Березуцкий А. Г. **111**, 335 (299)
- Бессас Д. **113**, 175 (162)
- Бибичева С. А. **114**, 147 ()
- Бишлер Л. **111**, 591 (494)
- Блошкин А. А. **113**, 501 (498)
- Бовкун Л. С. **112**, 541 (508)
- Богацкая А. В. **111**, 443 (371)
- Богач А. В. **112**, 451 (413);
113, 533 (526)
- Богданова Н. А. **111**, 646 (543)
- Богданов Ю. И. **111**, 615 (512);
111, 646 (543)
- Боднарчук Я. В. **113**, 797 (769)
- Большиннов В. В. **112**, 743 (705)

- Бондаревская А. С. **113**, 52 (47)
- Бордонский Г. С. **111**, 311 (278)
- Борисенко А. С. **114**, 53 ();
114, 291 ()
- Борисова С. Д. **114**, 82 ()
- Борман В. Д. **113**, 378 (378)
- Бочкарев С. Г. **114**, 233 ()
- Бочкин Г. А. **112**, 754 (715)
- Бояринцев Э. Л. **111**, 335 (299)
- Брагута В. В. **112**, 9 (6)
- Бражкин В. В. **112**, 787 (745)
- Бреев И. Д. **112**, 813 (774);
114, 323 ()
- Бритвич Г. И. **113**, 223 (226)
- Брысев А. П. **111**, 464 (392)
- Бугров А. Н. **113**, 385 (384)
- Буздин А. И. **113**, 38 (34);
113, 102 (92)
- Бузмаков А. В. **113**, 161 (149)
- Бузовкин А. Б. **111**, 509 (442)
- Булатов М. Ф. **111**, 674 (568)
- Бункин А. Ф. **111**, 464 (392);
112, 437 (399);
113, 435 (423);
- 113**, 763 (733)
- Буньков Ю. М. **111**, 52 (62);
112, 101 (95);
112, 314 (299);
112, 749 (710)
- Буриков С. А. **111**, 625 (525)
- Буримов Н. И. **112**, 644 (602)
- Бутенко А. В. **113**, 784 (752)
- Быков А. А. **112**, 54 (45);
112, 475 (437)
- Быченков В. Ю. **114**, 233 ()
- Бюхнер Б. **111**, 388 (350)
- Вагизов Ф. Г. **111**, 181 (167)
- Вайшнене Л. А. **112**, 343 (323)
- Валуев К. А. **113**, 68 (61)
- Вальков В. В. **111**, 772 (647)
- Ванчо П. **112**, 328 (305)
- Ваньков А. Б. **112**, 62 (53);
113, 112 (102)
- Варлачев В. А. **113**, 229 (231)
- Варнаков С. Н. **114**, 192 ()
- Вартанян Т. А. **114**, 60 ()
- Васильев С. Г. **112**, 754 (715)
- Васильев А. Н. **113**, 450 (454)
- Васильева О. Ф. **111**, 579 (477)
- Васильев В. В. **111**, 579 (477)
- Васильев Н. Н. **113**, 463 (466)
- Васильев О. А. **111**, 435 (363)
- Вахрушев В. О. **113**, 468 (471)
- Введенский Н. В. **112**, 81 (77)
- Вдовин Е. Е. **113**, 605 (586)
- Вейшторг И. П. **114**, 323 ()
- Векман А. В. **111**, 767 (643)
- Великанов Д. А. **111**, 197 (183)
- Веневцев И. Д. **112**, 240 (225)
- Вергелес С. С. **111**, 509 (442)
- Ветошко П. М. **111**, 52 (62);
112, 314 (299);
112, 749 (710)
- Вивек Кумар Сингх **111**, 591 (494)
- Викторов В. А. **111**, 291 (251)
- Вильшанская Е. В. **113**, 92 (82)
- Виноградов А. П. **112**, 725 (688)
- Винокур В. М. **114**, 72 ()
- Вишнякова Г. А. **114**, 291 ()
- Владимирова Г. А. **111**, 223 (205)
- Власенко В. А. **111**, 475 (403);
112, 822 (786)

- Горчаков А. В. **114**, 304 ()
- Горайнов С. В. **111**, 230 (218)
- Горячук И. О. **111**, 789 (663)
- Градусов В. А. **114**, 6 ()
- Грановский А. Б. **113**, 527 (521)
- Гресь В. Н. **111**, 291 (251)
- Григорьев П. Д. **112**, 107 (101)
- Григорьев Т. **111**, 591 (494)
- Гришаков К. С. **113**, 182 (169);
114, 172 ()
- Гришаков К. С. **112**, 674 (630)
- Гришин М. Я. **111**, 464 (392);
112, 437 (399)
- Громилов С. А. **113**, 267 (279)
- Грызунова Н. Н. **114**, 333 ()
- Губайдуллин А. Р. **111**, 763 (639)
- Гудков В. В. **113**, 52 (47)
- Гунбина А. А. **111**, 641 (539)
- Гуров Ю. В. **113**, 147 (135)
- Гурулев А. А. **111**, 311 (278)
- Гусаков Е. З. **114**, 167 ()
- Гусев А. И. **111**, 190 (176);
- Гусев А. И. **113**, 733 (706);
114, 185 ()
- Гусева Ю. А. **113**, 248 (252)
- Гусев Г. М. **111**, 107 (121)
- Гусев Н. С. **111**, 370 (333);
111, 815 (690)
- Гусихин П. А. **111**, 316 (282);
113, 740 (713)
- Гуськов С. Ю. **111**, 149 (135)
- Гущин М. Е. **113**, 96 (86)
- Давыдов М. А. **112**, 437 (399);
Давыдов М. А. **113**, 435 (423);
113, 763 (733)
- Данилов М. В. **112**, 484 (452)
- Данилов П. А. **112**, 579 (533);
Данилов П. А. **113**, 299 (297);
Данилов П. А. **113**, 495 (493);
Данилов П. А. **113**, 650 (622);
114, 147 ()
- Данилов С. Н. **113**, 548 (542)
- Дворецкая Е. В. **113**, 825 (794)
- Дворецкий С. А. **111**, 682 (575);
Дворецкий С. А. **111**, 750 (633);
Дворецкий С. А. **112**, 263 (246);
Дворецкий С. А. **112**, 541 (508);
Дворецкий С. А. **113**, 399 (402);
- Двурученский А. В. **113**, 58 (52);
113, 501 (498)
- Дегтяренко Н. Н. **112**, 674 (630)
- Делев В. А. **113**, 26 (23)
- Демин В. А. **111**, 469 (397);
Демин В. А. **112**, 328 (305);
112, 379 (357)
- Демишев С. В. **112**, 451 (413);
113, 533 (526)
- Демьянов Б. Ф. **111**, 767 (643)
- Деребезов И. А. **114**, 72 ()
- Дехтярь М. Л. **113**, 768 ()
- Дзедзашвили Д. М. **114**, 339 ()
- Димитриева С. Е. **112**, 501 (471)
- Дмитриев А. А. **112**, 54 (45)
- Доленко Т. А. **111**, 625 (525)
- Долженко Д. Е. **112**, 263 (246);
113, 548 (542)
- Дормидонов А. Е. **113**, 817 (787)
- Дорожкин С. И. **111**, 668 (562);
113, 697 (670)
- Доронин И. В. **112**, 725 (688)
- Дорофенко А. В. **113**, 527 (521)

- Дричко И. Л. **112**, 54 (45)
- Дровосеков А. Б. **112**, 88 (84)
- Дроздов М. Н. **111**, 531 (467)
- Дружинин А. В. **112**, 45 (37)
- Дубиков А. В. **112**, 644 (602)
- Дубинин С. С. **114**, 24 ()
- Дудкин Г. Н. **113**, 229 (231)
- Дулебо А. И. **112**, 650 (607)
- Дураков Д. Е. **114**, 72 ()
- Дьячкова И. Г. **111**, 597 (489);
113, 161 (149)
- Дюгаев А. М. **112**, 107 (101)
- Евдокимов С. В. **113**, 291 (289)
- Европейцев Е. А. **113**, 507 (504)
- Еганова Е. М. **113**, 84 (75)
- Егоров С. В. **112**, 743 (705)
- Егранов А. В. **113**, 52 (47)
- Екимов Е. А. **112**, 17 (13)
- Екомасов Е. Г. **111**, 209 (193);
112, 357 (337)
- Ельцов К. Н. **111**, 697 (591)
- Емельянов А. В. **112**, 379 (357)
- Еремин Б. **112**, 388 (370)
- Еремин Е. В. **114**, 89 ()
- Еремин М. В. **114**, 31 ()
- Есин А. А. **112**, 644 (602)
- Ефимов М. А. **111**, 335 (299)
- Жаднов Н. О. **114**, 291 ()
- Жаров А. А. **112**, 73 (65)
- Жаров А. А. мл. **112**, 73 (65)
- Жарова Н. А. **112**, 73 (65)
- Жаховский В. В. **113**, 84 (75);
113, 311 (308)
- Жевстовских И. В. **113**, 52 (47)
- Желтиков А. М. **113**, 3 (1)
- Желтиков А. М. **112**, 22 (17);
113, 304 (301)
- Жигаadlo Н. Д. **112**, 523 (491)
- Жиляева Е. И. **112**, 623 (582)
- Жмерик В. Н. **113**, 507 (504)
- Жолудев М. С. **111**, 682 (575);
Жолудев М. С. **112**, 541 (508);
113, 399 (402)
- Жукова М. О. **113**, 237 (242)
- Журавлев А. С. **112**, 516 (485)
- Задиранов Ю. М. **113**, 248 (252)
- Задорожная Л. А. **112**, 240 (225)
- Зайцев-Зотов С. В. **111**, 45 (50);
- Зайцев-Зотов С. В. **112**, 93 (88);
Зайцев-Зотов С. В. **112**, 367 (346);
114, 36 ()
- Заколдаев Р. А. **113**, 495 (493);
113, 650 (622)
- Заливако И. В. **112**, 626 (585);
Заливако И. В. **114**, 53 ();
114, 291 ()
- Залозная Е. Д. **113**, 817 (787)
- Залялотдинов Т. А. **114**, 212 ()
- Зарезин А. М. **111**, 316 (282);
113, 740 (713)
- Зарецкий Н. П. **111**, 149 (135)
- Захаров Ю. П. **111**, 335 (299)
- Зверев В. Н. **112**, 623 (582)
- Зегря А. Г. **114**, 263 ()
- Зегря Г. Г. **112**, 807 (769);
114, 263 ()
- Зеленер Б. Б. **113**, 92 (82)
- Зеленер Б. В. **113**, 92 (82)
- Зинган А. П. **111**, 579 (477)
- Зиновьева А. Ф. **113**, 58 (52)
- Зиновьев А. Н. **114**, 13 ()
- Зиновьев В. А. **113**, 58 (52)

- Зиняков Т. А. **111**, 65 (76)
- Зиятдинова М. З. **112**, 774 (734);
114, 228 ()
- Золотов Д. А. **111**, 597 (489);
113, 161 (149)
- Золотько А. С. **113**, 495 (493)
- Зубарева О. В. **113**, 370 (370)
- Зубарев Н. М. **113**, 256 (259);
113, 370 (370)
- Зудин И. Ю. **113**, 96 (86)
- Зыбцев С. Г. **112**, 93 (88);
114, 36 ()
- Зябловский А. А. **112**, 725 (688);
114, 43 ()
- Иванов К. Е. **111**, 487 (422)
- Иванькова Е. М. **113**, 385 (384)
- Ивахненко С. А. **111**, 597 (489)
- Ивченко Е. Л. **113**, 10 (7)
- Игнагов А. И. **113**, 84 (75)
- Игнатъева Д. О. **112**, 759 (720)
- Иешкин А. Е. **111**, 531 (467)
- Изучеев В. И. **113**, 291 (289)
- Изюров В. И. **114**, 24 ()
- Иконников А. В. **111**, 682 (575);
- Иконников А. В. **112**, 541 (508);
- Иконников А. В. **113**, 399 (402);
113, 548 (542)
- Ильичев Л. В. **113**, 212 (207)
- Илюшин М. А. **111**, 291 (251)
- Иногамов Н. А. **113**, 84 (75);
113, 311 (308)
- Ионин А. А. **112**, 579 (533);
- Ионин А. А. **113**, 299 (297);
- Ионин А. А. **113**, 365 (365);
113, 495 (493)
- Иоселевич А. С. **113**, 854 (819)
- Иоселевич П. А. **113**, 661 (631)
- Исхаков Р. С. **111**, 197 (183)
- Каган М. Ю. **111**, 321 (286)
- Казак Н. В. **113**, 267 (279);
114, 89 ()
- Казачков А. С. **112**, 263 (246);
113, 548 (542)
- Казей З. А. **112**, 189 (180)
- Кайсин Б. Д. **112**, 62 (53)
- Калитеевский М. А. **111**, 763 (639)
- Калиш А. Н. **112**, 759 (720)
- Кандидов В. П. **113**, 817 (787)
- Каневский В. М. **112**, 240 (225)
- Капустин А. А. **111**, 668 (562);
113, 697 (670)
- Караштин Е. А. **112**, 121 (122)
- Кардакова А. И. **111**, 88 (104)
- Карелина Л. Н. **112**, 743 (705)
- Каримов Д. Н. **113**, 175 (162)
- Карки Д. **112**, 759 (720)
- Карманов Д. Е. **111**, 435 (363)
- Карпова А. А. **114**, 263 ()
- Касахара Й. **114**, 18 ()
- Катаев А. Л. **111**, 789 (663)
- Катамадзе К. Г. **111**, 646 (543)
- Катин К. П. **113**, 182 (169);
114, 172 ()
- Кашин А. М. **112**, 531 (498)
- Кашкаров П. К. **112**, 379 (357)
- Квашнин А. Г. **111**, 380 (343)
- Квашнин Д. Г. **111**, 244 (235);
112, 328 (305)
- Квашнин Д. Г. **111**, 743 (627);
- Квон З. Д. **111**, 107 (121);
- Квон З. Д. **112**, 174 (161);
- Квон З. Д. **113**, 328 (331);

- Квон З. Д. **113**, 463 (466);
114, 114 ()
- Кецко В. А. **112**, 680 (636)
- Кившарь Ю. **112**, 658 (615)
- Кильмаметов А. Р. **111**, 674 (568);
112, 45 (37)
- Кириенко В. В. **113**, 501 (498)
- Кирпичев В. Е. **112**, 38 (31)
- Кирпиченкова Н. В. **112**, 114 (112)
- Кирпиченков В. Я. **112**, 114 (112)
- Кисленко В. А. **114**, 311 ()
- Кисленко С. А. **114**, 311 ()
- Китаева Г. Х. **112**, 297 (269)
- Киямов А. Г. **113**, 450 (454)
- Кленов Н. В. **111**, 443 (371)
- Климко Г. В. **113**, 248 (252)
- Клопотов Р. В. **111**, 464 (392)
- Клочкова Н. В. **111**, 723 (603)
- Книжник А. А. **111**, 305 (273)
- Князев Г. А. **112**, 314 (299);
112, 749 (710)
- Князев Ю. В. **113**, 267 (279)
- Кобелев Н. П. **111**, 691 (586);
- Кобелев Н. П. **111**, 806 (679);
- 113**, 751 (723)
- Ковалев А. И. **113**, 468 (471)
- Ковалев И. М. **111**, 435 (363)
- Ковалев М. С. **113**, 365 (365);
114, 147 ()
- Ковалевский В. В. **111**, 230 (218)
- Коваленко С. Л. **111**, 697 (591)
- Ковальчук О. Е. **112**, 579 (533)
- Ковражкин Р. А. **111**, 223 (205)
- Кожаев М. А. **112**, 759 (720)
- Козлов Д. А. **112**, 174 (161)
- Козлов Д. В. **111**, 682 (575);
113, 399 (402)
- Колачевский Н. Н. **112**, 626 (585);
114, 291 ()
- Колачевский Н. Н. **114**, 53 ()
- Колесников С. В. **111**, 101 (116)
- Колмычек И. А. **111**, 370 (333)
- Колобов А. В. **112**, 501 (471)
- Колоколов И. В. **111**, 509 (442)
- Колотинский Д. А. **113**, 514 (510)
- Комаров П. С. **113**, 311 (308)
- Комельков А. С. **112**, 774 (734)
- Комиссарова М. В. **111**, 355 (320)
- Компанец В. О. **111**, 27 (31);
113, 365 (365);
113, 723 (677);
113, 817 (787)
- Компанец В. О. **113**, 365 (365);
- Компанец В. О. **113**, 723 (677);
113, 817 (787)
- Конарев П. В. **112**, 632 (591)
- Кондорский А. Д. **112**, 736 (699)
- Кондратьев В. И. **113**, 809 (763)
- Кондратюк Е. С. **113**, 291 (289)
- Кон И. А. **111**, 45 (50);
112, 93 (88)
- Консежо К. **112**, 541 (508)
- Константинова Е. А. **112**, 562 (527)
- Константинов Д. **112**, 101 (95)
- Кончаков Р. А. **111**, 806 (679);
113, 341 (345)
- Конюх Д. А. **112**, 547 (513)
- Копасов А. А. **113**, 38 (34)
- Копица Г. П. **113**, 385 (384)
- Коплак О. В. **113**, 825 (794)
- Коробейщиков Н. Г. **111**, 531 (467);
114, 304 ()
- Коробков С. В. **113**, 96 (86)
- Коробцев С. В. **111**, 305 (273)
- Коровушкин М. М. **114**, 339 ()

- Королев Д. В. **113**, 825 (794)
- Коротеев Г. А. **111**, 723 (603)
- Коршунов М. М. **113**, 63 (57)
- Косарева О. Г. **111**, 27 (31)
- Косач А. А. **112**, 114 (112)
- Костин В. А. **112**, 81 (77)
- Когова О. Д. **111**, 625 (525)
- Котов А. Ю. **112**, 9 (6)
- Коханчик Л. С. **113**, 797 (769)
- Кох К. А. **113**, 683 (651)
- Кочаровская Е. Р. **113**, 655 (626)
- Кочергин И. В. **112**, 291 (263)
- Кочиев М. В. **112**, 650 (607)
- Крайнов И. В. **111**, 820 (703)
- Красиков К. М. **112**, 451 (413);
113, 533 (526)
- Красин Г. К. **114**, 147 ()
- Краснорусский В. Н. **113**, 533 (526)
- Крейнес Н. М. **112**, 88 (84)
- Кретова М. А. **111**, 806 (679)
- Кривенков В. А. **112**, 584 (537)
- Кривобок В. С. **112**, 160 (145);
114, 96 ()
- Кривобок В. С. **112**, 501 (471);
114, 96 ()
- Кригель М. Й. **111**, 674 (568)
- Криштопенко С. С. **112**, 541 (508)
- Кройчук М. К. **112**, 730 (693)
- Крюкова А. Е. **112**, 632 (591)
- Крюкова И. С. **112**, 584 (537)
- Крючков Д. С. **114**, 291 ()
- Кугель К. И. **112**, 693 (651);
112, 764 (725)
- Кудасов Ю. Б. **113**, 168 (155)
- Кудеяров К. С. **114**, 291 ()
- Кудрявцев А. Г. **111**, 112 (126);
113, 406 (409)
- Кудрявцев О. С. **112**, 17 (13)
- Кудряшов И. А. **111**, 435 (363)
- Кудряшов С. И. **112**, 579 (533);
113, 299 (297);
113, 365 (365);
113, 495 (493);
113, 650 (622);
114, 147 ()
- Кузмиачев А. Н. **112**, 314 (299);
112, 749 (710)
- Кузмичёв А. Н. **111**, 52 (62)
- Кузнецов А. В. **113**, 533 (526)
- Кузнецов В. А. **112**, 516 (485)
- Кузнецов Е. А. **114**, 67 ()
- Кузнецов К. А. **112**, 297 (269)
- Кузнецов С. В. **111**, 625 (525)
- Кузьмичева Т. Е. **111**, 388 (350);
112, 523 (491);
112, 822 (786)
- Кузьмичев С. А. **111**, 388 (350);
112, 523 (491);
112, 822 (786)
- Кукушки И. В. **114**, 328 ()
- Кукушкин В. И. **112**, 38 (31)
- Кукушкин И. В. **111**, 316 (282);
112, 38 (31);
112, 62 (53);
112, 516 (485);
113, 112 (102);
113, 689 (657);
113, 740 (713)
- Кулева Н. А. **112**, 603 (555)
- Кулик Л. В. **112**, 516 (485);
113, 58 (52)
- Куликов А. Г. **112**, 374 (352)

- Кумамото А. **114**, 18 ()
- Куницына Е. И. **113**, 825 (794)
- Кунцевич А. Ю. **111**, 166 (151);
- Кунцевич А. Ю. **111**, 750 (633);
- 112**, 650 (607)
- Курганов А. А. **111**, 435 (363)
- Кутлин А. Г. **113**, 38 (34)
- Кутузов А. С. **111**, 154 (139)
- Кучинский Э. З. **112**, 603 (555)
- Кучугов П. А. **111**, 149 (135)
- Кытина Е. В. **112**, 562 (527)
- Ладыгина В. П. **111**, 197 (183)
- Лапушкин С. В. **113**, 147 (135)
- Ларюшин И. Д. **112**, 81 (77)
- Латышев А. В. **113**, 328 (331);
- 114**, 114 ()
- Лахманский К. Е. **112**, 626 (585)
- Лебедев В. В. **111**, 509 (442)
- Леви М. **112**, 759 (720)
- Левин В. М. **113**, 68 (61)
- Левченко А. А. **111**, 653 (549)
- Левченко А. О. **112**, 579 (533)
- Леднев В. Н. **111**, 464 (392)
- Лемзяков С. А. **111**, 641 (539)
- Леонидов А. В. **113**, 620 (599)
- Леонова Т. И. **113**, 147 (135)
- Леонтьев А. А. **112**, 297 (269)
- Лерер А. М. **112**, 152 (138)
- Лисянский А. А. **112**, 725 (688)
- Литасов К. Д. **111**, 160 (145);
- 111**, 230 (218)
- Литвинов А. Н. **113**, 791 (757)
- Лихачев К. В. **114**, 323 ()
- Лобанов И. С. **113**, 223 (226);
- 113**, 833 (801)
- Лозин О. И. **112**, 114 (112)
- Ломоносова Т. А. **113**, 320 (317)
- Лукичев В. Ф. **111**, 646 (543)
- Лукьянчук Б. С. **112**, 361 (341)
- Любимов В. Н. **112**, 127 (127)
- Любовская Р. Н. **112**, 623 (582)
- Любовский Р. Б. **112**, 623 (582)
- Любутин И. С. **112**, 374 (352)
- Лютостанский Ю. С. **111**, 723 (603)
- Лядов Н. М. **113**, 450 (454)
- Лященко С. А. **114**, 192 ()
- Магарилл Л. И. **114**, 78 ()
- Мазилкин А. А. **111**, 674 (568);
- 112**, 45 (37)
- Мазилкин И. А. **111**, 514 (447);
- 112**, 275 (257)
- Мазурицкий М. И. **112**, 152 (138)
- Маишеев В. А. **112**, 3 (1)
- Майдыковский А. И. **111**, 370 (333)
- Майзлах А. А. **114**, 36 ()
- Майлыбаев А. А. **114**, 67 ()
- Макаров А. С. **111**, 691 (586);
- Макаров А. С. **113**, 341 (345);
- 113**, 751 (723)
- Макаров Г. Н. **111**, 361 (325);
- 112**, 226 (213)
- Максимова О. А. **114**, 192 ()
- Максимищев А. В. **113**, 523 (518)
- Макушина В. А. **112**, 774 (734)
- Мальцев Е. И. **111**, 475 (403)
- Мамин Г. В. **111**, 52 (62)
- Мамрашев А. А. **111**, 75 (85)
- Мареев Е. И. **112**, 780 (739)
- Марк Г. **112**, 328 (305)
- Маркевич С. А. **113**, 486 (487)
- Марговицкий В. П. **111**, 166 (151);
- Марговицкий В. П. **112**, 501 (471);

- 114**, 147 ()
 Маслаков К. И. **111**, 487 (422)
 Маслов М. М. **113**, 182 (169);
114, 172 ()
 Массалимов Б. И. **111**, 475 (403)
 Масюгин А. Н. **112**, 680 (636)
 Ма Х. **111**, 501 (434)
 Махмудиан М. М. **112**, 246 (230)
 Мацукатова А. Н. **112**, 379 (357)
 Машко А. М. **111**, 757 (608)
 Медведев Д. Д. **111**, 305 (273)
 Медриш И. В. **111**, 160 (145)
 Межов-Деглин Л. П. **111**, 653 (549)
 Мейлахс А. П. **111**, 375 (338)
 Мейстерсон А. А. **111**, 757 (608)
 Мельников А. С. **113**, 38 (34);
113, 102 (92)
 Меньшиков Л. И. **113**, 523 (518)
 Меньшиков П. Л. **113**, 523 (518)
 Месяц Г. А. **113**, 256 (259);
113, 370 (370)
 Мешков И. Н. **113**, 784 (752)
 Мигдал К. П. **113**, 299 (297)
 Микушкин В. М. **112**, 801 (764)
- Мильштейн А. И. **111**, 215 (197);
112, 352 (332)
 Минакова В. Е. **112**, 367 (346)
 Минеев В. П. **111**, 833 (715)
 Миннегалиев М. М. **113**, 3 (1)
 Миннеханов А. А. **112**, 379 (357);
112, 562 (527)
 Миролобов М. А. **113**, 553 (547)
 Миронов А. **111**, 591 (494);
113, 757 (728)
 Миронов А. Ю. **114**, 72 ()
 Миронов С. В. **113**, 38 (34);
113, 102 (92)
 Мирошниченко И. Б. **111**, 335 (299)
 Митрофанов А. В. **112**, 22 (17);
113, 304 (301)
 Михайлов Н. Н. **111**, 107 (121);
 Михайлов Н. Н. **111**, 682 (575);
 Михайлов Н. Н. **111**, 750 (633);
 Михайлов Н. Н. **112**, 174 (161);
 Михайлов Н. Н. **112**, 263 (246);
 Михайлов Н. Н. **112**, 541 (508);
 Михайлов Н. Н. **113**, 399 (402);
 Михайлов Н. Н. **113**, 463 (466);
- 113**, 548 (542)
 Михальков Ю. М. **112**, 774 (734)
 Мицкан В. А. **114**, 339 ()
 Мишняков В. **113**, 757 (728)
 Могилевский М. М. **114**, 18 ()
 Могиленец Ю. А. **112**, 374 (352)
 Моисеев С. А. **111**, 602 (500);
113, 3 (1)
 Моисеенко И. Л. **114**, 18 ()
 Молодец А. М. **111**, 838 (720)
 Молодцова О. В. **113**, 189 (176)
 Молотков С. Н. **111**, 608 (506);
 Молотков С. Н. **111**, 778 (653);
112, 401 (383)
 Моргунов Р. Б. **113**, 825 (794)
 Морозов А. **111**, 591 (494);
113, 757 (728)
 Морозова Е. Н. **112**, 38 (31)
 Морозов Ан. **111**, 591 (494)
 Морозов И. В. **111**, 388 (350)
 Морозов К. М. **111**, 763 (639)
 Морозов С. В. **111**, 682 (575);
113, 399 (402)
 Мороков Е. С. **113**, 68 (61)

- Мохов Е. Н. **112**, 813 (774);
114, 323 ()
- Мошкина Е. М. **114**, 89 ()
- Музыченко Д. А. **111**, 396 (357)
- Муравьев В. М. **111**, 316 (282);
113, 740 (713)
- Мурзина Т. В. **111**, 370 (333)
- Муслимов А. Э. **112**, 240 (225)
- Мусорин А. И. **111**, 40 (46)
- Мутыгуллина А. А. **114**, 221 ()
- Мяконых А. В. **111**, 531 (467)
- Набиева Л. Я. **114**, 221 ()
- Набиев И. Р. **112**, 584 (537)
- Нагалюк С. С. **114**, 323 ()
- Надолинский А. М. **111**, 61 (72)
- Назаров М. М. **113**, 304 (301)
- Найденов М. Н. **112**, 147 (133)
- Науменко Г. А. **111**, 295 (255)
- Наумов С. В. **111**, 186 (172);
114, 179 ()
- Некоркин В. И. **113**, 415 (418)
- Некрасов А. Н. **111**, 674 (568)
- Некрасов И. А. **113**, 63 (57);
- 113**, 126 (115)
- Ненашев А. В. **113**, 58 (52)
- Неронов А. **113**, 77 (69)
- Нестеров А. И. **112**, 268 (250)
- Нефедов Ю. А. **113**, 689 (657);
114, 328 ()
- Нечаев Б. А. **113**, 229 (231)
- Нечаев Д. В. **113**, 507 (504)
- Никитина А. М. **112**, 367 (346)
- Никифорова П. М. **111**, 443 (371)
- Николаева И. А. **111**, 27 (31)
- Николаев В. С. **113**, 514 (510)
- Николаев И. В. **114**, 304 ()
- Николаев И. Д. **111**, 682 (575)
- Николаев Н. Н. **111**, 215 (197);
112, 352 (332)
- Николаев С. В. **112**, 268 (250)
- Николаев С. Н. **112**, 88 (84);
112, 160 (145);
112, 501 (471);
114, 96 ()
- Никонов С. А. **114**, 36 ()
- Номоконов Д. В. **112**, 475 (437)
- Норман Г. Э. **111**, 175 (162);
- 111**, 251 (245)
- Носов А. П. **114**, 24 ()
- Нурмухаметов А. Р. **114**, 31 ()
- Овчинникова Т. М. **112**, 258 (241)
- Овчинников С. Г. **112**, 258 (241);
112, 268 (250);
114, 89 ();
114, 192 ()
- Оглобличев В. В. **114**, 24 ()
- Олейничук Е. А. **113**, 650 (622);
114, 147 ()
- Ольшанецкий Е. Б. **112**, 174 (161)
- Онищенко Е. Е. **112**, 501 (471);
114, 96 ()
- Орешкин А. И. **111**, 396 (357)
- Орешкин С. И. **111**, 396 (357)
- Орлинский С. Б. **111**, 52 (62)
- Орлита М. **112**, 541 (508)
- Орлов А. О. **111**, 311 (278)
- Орлов А. П. **112**, 93 (88)
- Орлов Ю. С. **112**, 258 (241);
112, 268 (250)
- Осипенко А. П. **111**, 723 (603)
- Осипов А. А. **113**, 410 (413)

- Ошурко В. Б. **113**, 435 (423);
113, 763 (733)
- Павлова А. А. **113**, 385 (384)
- Павлова Т. В. **111**, 697 (591)
- Павлов Н. С. **113**, 63 (57);
113, 126 (115)
- Павлов С. В. **114**, 311 ()
- Палий А. В. **113**, 825 (794)
- Панкрац А. И. **111**, 197 (183)
- Панов А. Д. **111**, 435 (363)
- Панов В. И. **111**, 396 (357)
- Панов Н. А. **111**, 27 (31)
- Паршиков А. Н. **113**, 311 (308)
- Пастор А. А. **114**, 60 ()
- Пастухов В. П. **114**, 242 ()
- Пахомов А. В. **113**, 237 (242);
114, 156 ();
114, 298 ()
- Пацаева С. В. **111**, 625 (525)
- Пашенькин И. Ю. **111**, 815 (690)
- Пеленович В. О. **111**, 531 (467)
- Пеньков Ф. М. **113**, 229 (231)
- Перваков К. С. **111**, 475 (403);
112, 822 (786)
- Первишко А. А. **111**, 328 (293)
- Перминов Н. С. **111**, 602 (500)
- Пермякова И. Е. **113**, 468 (471)
- Пермяков Д. В. **113**, 809 (763)
- Першина Е. А. **113**, 84 (75)
- Першин С. М. **111**, 464 (392);
112, 437 (399);
113, 435 (423);
113, 763 (733)
- Песоцкий С. И. **112**, 623 (582)
- Петин А. Н. **111**, 361 (325);
112, 226 (213)
- Петржик Е. А. **113**, 678 (646)
- Петрова А. Е. **114**, 318 ()
- Петров А. Г. **112**, 165 (150)
- Петров И. Д. **111**, 61 (72)
- Петров М. И. **113**, 553 (547)
- Петров Ю. В. **113**, 311 (308)
- Петросян А. С. **111**, 65 (76)
- Петруша С. В. **111**, 88 (104)
- Петухов М. Н. **111**, 396 (357)
- Пех П. Л. **111**, 80 (90)
- Пивоваров А. А. **112**, 493 (457);
113, 777 (745);
- 114**, 199 ()
- Пидгайко Д. А. **113**, 809 (763)
- Пикалов А. М. **113**, 527 (521)
- Пиршин И. В. **112**, 774 (734)
- Пискунов Ю. В. **114**, 24 ()
- Платонов К. Ю. **112**, 598 (550)
- Побойко И. В. **112**, 251 (234)
- Подливаев А. И. **111**, 728 (613);
113, 182 (169);
114, 172 ()
- Подорожный Д. М. **111**, 435 (363)
- Покровский В. Я. **114**, 36 ()
- Полицук Б. В. **113**, 291 (289)
- Полицук И. Я. **112**, 618 (577)
- Полников В. Г. **111**, 501 (434)
- Полуэктов И. В. **113**, 223 (226)
- Попель С. И. **113**, 440 (428)
- Попов А. М. **111**, 443 (371)
- Попов А. Ю. **114**, 167 ()
- Попов Е. Н. **111**, 846 (727)
- Попов З. И. **111**, 743 (627)
- Попов К. Е. **111**, 295 (255)
- Пополитова Д. В. **112**, 702 (666)
- Попруженко С. В. **113**, 320 (317)

- Посух В. Г. **111**, 335 (299)
- Потапкин Б. В. **111**, 305 (273)
- Потемкин Ф. В. **112**, 508 (478);
112, 780 (739)
- Потемски М. **112**, 541 (508)
- Поткина М. Н. **113**, 833 (801)
- Поторочин Д. В. **113**, 189 (176)
- Потылицын А. П. **111**, 295 (255)
- Пресняков И. А. **111**, 487 (422)
- Пройдакова В. Ю. **111**, 625 (525)
- Протасова С. Г. **112**, 45 (37)
- Прохоров В. Е. **112**, 591 (543)
- Прошин Ю. Н. **111**, 154 (139)
- Прудковский П. А. **111**, 494 (428)
- Прудковский П. А. **114**, 204 ()
- Прудкогляд А. Ф. **111**, 291 (251)
- Пручкина А. А. **114**, 96 ()
- Пряников Д. С. **111**, 291 (251)
- Пугачев М. В. **112**, 650 (607)
- Пудалов В. М. **111**, 237 (225)
- Пунегов В. И. **111**, 448 (376)
- Пухов А. А. **112**, 725 (688)
- Пушкин А. В. **112**, 508 (478)
- Разова А. А. **113**, 399 (402)
- Рамадеви П. **111**, 591 (494)
- Ратников П. В. **111**, 80 (90)
- Раттенбахер Д. **112**, 17 (13)
- Рафайя Д. **111**, 674 (568)
- Рахлин М. В. **112**, 17 (13);
113, 248 (252)
- Рахманов А. Л. **112**, 693 (651);
112, 764 (725)
- Рашков Р. **113**, 757 (728)
- Резников М. **111**, 750 (633)
- Решетников С. Ф. **113**, 223 (226)
- Решетов В. А. **111**, 846 (727)
- Ривнюк А. С. **113**, 299 (297);
113, 650 (622)
- Рогов В. В. **111**, 815 (690)
- Родин А. О. **111**, 514 (447)
- Родный П. А. **112**, 240 (225)
- Родякина Е. Е. **113**, 328 (331)
- Родякина Е. Е. **114**, 114 ()
- Роечко А. А. **112**, 9 (6)
- Рожков А. В. **112**, 693 (651);
112, 764 (725)
- Рожко М. В. **112**, 22 (17);
113, 304 (301)
- Розанов Н. Н. **111**, 586 (484);
111, 794 (668);
113, 157 (145);
113, 237 (242);
114, 156 ();
114, 298 ()
- Розенбаум В. М. **112**, 341 (316);
113, 768 ()
- Романовский В. А. **111**, 291 (251)
- Романцова Т. В. **114**, 18 ()
- Ромашевский С. А. **113**, 84 (75);
113, 311 (308)
- Ромшин А. М. **112**, 17 (13)
- Рошин Б. С. **113**, 175 (162)
- Рубан В. П. **111**, 455 (383);
112, 554 (520);
113, 539 (532);
113, 848 (814)
- Руденко В. В. **113**, 267 (279)
- Руднев В. А. **114**, 6 ()
- Руменских М. С. **111**, 335 (299)
- Румянцев Б. В. **112**, 780 (739)
- Румянцев В. В. **111**, 682 (575);
113, 399 (402)

- Рунов В. В. **113**, 385 (384)
- Сагатова Д. Н. **111**, 160 (145) **112**, 357 (337)
- Рупасов А. Е. **112**, 579 (533); Сагатов Н. Е. **111**, 160 (145) Салимов Т. Р. **112**, 357 (337)
- Рупасов А. Е. **113**, 495 (493); Садаков А. В. **111**, 475 (403) Сальников С. Г. **111**, 215 (197);
113, 650 (622) Садовников С. И. **112**, 203 (193); **112**, 352 (332)
- Русина Г. Г. **114**, 82 () Садовников С. И. **113**, 733 (706); Самойлов Р. М. **112**, 211 (199);
- Рутьков Е. В. **111**, 520 (452); **114**, 185 () **112**, 487 (455)
- 113**, 595 (576) Садовский М. В. **111**, 203 (188); Самосват Д. М. **112**, 807 (769)
- Руффенах С. **112**, 541 (508) Садовский М. В. **112**, 603 (555); Самохвалов А. В. **113**, 38 (34);
- Рыбальченко Г. В. **111**, 166 (151) **113**, 600 (581) **113**, 102 (92)
- Рыжкин И. А. **112**, 531 (498); Садовский С. А. **113**, 291 (289) Самохвалов П. С. **112**, 584 (537)
- 113**, 457 (461) Садыков А. Ф. **114**, 24 () Самусев А. К. **113**, 553 (547);
- Рыжкин М. И. **112**, 531 (498); Сазонов С. В. **111**, 355 (320); **113**, 809 (763)
- 113**, 457 (461) Сазонов С. В. **112**, 30 (24); Самцевич А. И. **111**, 380 (343)
- Рыжкова Д. А. **113**, 669 (638) Сазонов С. В. **112**, 306 (283); Сандлер В. А. **113**, 348 (352)
- Рыльков В. В. **112**, 88 (84); Сазонов С. В. **113**, 612 (592); Сандомирский Ю. Е. **112**, 3 (1);
- 112**, 379 (357) Сазонов С. В. **114**, 102 (); **113**, 223 (226)
- Рябова Л. И. **112**, 263 (246); **114**, 160 () Сандуковский В. Г. **113**, 147 (135)
- 113**, 548 (542) Сайтов И. М. **111**, 175 (162) Сандуляну Ш. В. **112**, 165 (150)
- Рябчук С. В. **112**, 22 (17) Сайко А. П. **113**, 486 (487) Санина В. А. **111**, 826 (709)
- Рязанов В. В. **112**, 743 (705) Сайфутдинова А. А. **112**, 443 (405) Сапожников М. В. **111**, 815 (690)
- Саакян С. А. **113**, 92 (82) Сайфутдинов А. И. **112**, 443 (405) Сараева И. Н. **113**, 365 (365)
- Савин Д. А. **113**, 223 (226) Салахов М. Х. **114**, 221 () Саргсян А. **113**, 629 (605)
- Савченков Е. Н. **112**, 644 (602) Салецкий А. М. **111**, 101 (116) Саркисян Д. **113**, 629 (605)
- Савченко М. Л. **112**, 174 (161) Салимов Р. К. **111**, 209 (193); Сарманова О. Э. **111**, 625 (525)

- Сарычев М. Н. **113**, 52 (47)
- Сасвати Дхара **111**, 591 (494)
- Сатунин С. Н. **112**, 667 (623)
- Саутенков В. А. **113**, 92 (82)
- Сафин Т. Р. **111**, 52 (62)
- Сбойчаков А. О. **112**, 693 (651);
112, 764 (725)
- Селиванов Ю. Г. **111**, 166 (151)
- Семак А. А. **111**, 291 (251)
- Семенцов Д. И. **111**, 735 (619)
- Семериков И. А. **114**, 53 ()
- Семикоз Д. **113**, 77 (69)
- Сенков В. М. **112**, 774 (734);
114, 228 ()
- Сергеев А. С. **113**, 655 (626)
- Сердобинцев П. Ю. **114**, 60 ()
- Серебров А. П. **112**, 211 (199);
112, 487 (455)
- Серебрянников Е. Е. **112**, 22 (17);
113, 304 (301)
- Серов Ю. М. **113**, 507 (504)
- Сидоренков А. В. **111**, 101 (116)
- Сидоров-Бирюков Д. А. **112**,
22 (17);
113, 304 (301)
- Силин А. П. **111**, 80 (90)
- Синев И. С. **113**, 809 (763)
- Синицын В. В. **112**, 531 (498)
- Сираев Ф. М. **111**, 154 (139)
- Ситников А. В. **112**, 88 (84)
- Ситников М. Н. **112**, 680 (636)
- Скворцов М. А. **112**, 394 (376);
112, 466 (428)
- Скоморохов А. М. **114**, 323 ()
- Скробова Н. А. **112**, 484 (452)
- Слепцов А. **111**, 591 (494)
- Слободчиков А. А. **113**, 63 (57)
- Словинский И. С. **112**, 508 (478)
- Случанко Н. Е. **112**, 451 (413);
113, 533 (526)
- Смаглюк Д. С. **113**, 223 (226)
- Смаев М. П. **113**, 495 (493)
- Смет Ю. Х. **111**, 668 (562);
113, 697 (670)
- Смирнов М. А. **113**, 3 (1)
- Смирнов А. В. **112**, 774 (734)
- Смирнова М. Н. **112**, 680 (636)
- Смирнов Д. В. **114**, 242 ()
- Смирнов И. Ю. **112**, 54 (45)
- Смирнов Н. А. **112**, 579 (533);
113, 650 (622)
- Смольников А. Г. **114**, 24 ()
- Смыслов Р. Ю. **113**, 385 (384)
- Снегирев В. В. **112**, 189 (180)
- Снегирев Н. И. **112**, 374 (352)
- Соболевский О. А. **111**, 475 (403)
- Соколова В. В. **113**, 365 (365)
- Соколов И. М. **113**, 791 (757)
- Солин Н. И. **114**, 179 ()
- Соловьев В. В. **112**, 38 (31)
- Соловьев Д. А. **114**, 212 ()
- Соловьев Л. А. **114**, 89 ()
- Солодовников И. П. **111**, 291 (251)
- Соломонов Ю. С. **114**, 263 ()
- Солтамов В. А. **112**, 813 (774)
- Сорокин А. О. **111**, 34 (41)
- Сорокин Д. А. **113**, 133 (129)
- Сороко В. А. **111**, 469 (397)
- Стаховский И. Р. **112**, 830 (793)
- Стегайлов В. В. **113**, 392 (396)
- Степанов Н. А. **112**, 394 (376)
- Стишов С. М. **114**, 318 ()
- Столяренко М. С. **112**, 189 (180)

- Столяр С. В. **111**, 197 (183)
- Страумал А. Б. **111**, 514 (447);
112, 275 (257)
- Страумал Б. Б. **111**, 674 (568);
112, 45 (37);
112, 275 (257)
- Стриковский А. В. **113**, 96 (86)
- Стругацкий М. Б. **112**, 374 (352)
- Струлева Е. В. **113**, 311 (308)
- Стрыгин И. С. **112**, 475 (437)
- Суворов Э. В. **113**, 161 (149)
- Султанов В. Д. **112**, 297 (269)
- Супрун Е. М. **111**, 597 (489)
- Суриков В. Т. **113**, 52 (47)
- Суханова Е. В. **111**, 743 (627)
- Сухих А. С. **113**, 267 (279)
- Сухорукова О. С. **112**, 458 (420)
- Сушков О. П. **112**, 196 (186)
- Сцепуро Н. Г. **114**, 147 ()
- Сыресин Е. М. **113**, 784 (752)
- Табачкова Н. Ю. **114**, 36 ()
- Тагиров М. С. **111**, 52 (62)
- Таланов Ю. И. **113**, 450 (454)
- Талочкин А. Б. **113**, 683 (651)
- Тарасенко А. С. **112**, 458 (420)
- Тарасенко В. Ф. **113**, 133 (129)
- Тарасенко С. В. **111**, 345 (311);
113, 475 (477)
- Тарасов М. А. **111**, 641 (539)
- Татаринцев А. А. **111**, 531 (467)
- Татарский Д. А. **111**, 815 (690)
- Телькушев М. В. **113**, 147 (135)
- Тепл Ф. **112**, 541 (508)
- Терехов В. И. **111**, 291 (251);
113, 223 (226)
- Терешонок М. В. **111**, 443 (371)
- Терещенко О. Е. **113**, 683 (651)
- Тетерин А. Ю. **111**, 487 (422)
- Тетерин Ю. А. **111**, 487 (422)
- Тимеркаев Б. А. **112**, 443 (405)
- Тимофеев А. В. **113**, 514 (510)
- Титова Н. А. **111**, 88 (104)
- Тихонова О. В. **112**, 702 (666)
- Тихонов В. Н. **111**, 723 (603)
- Ткаченко В. А. **112**, 196 (186);
114, 114 ()
- Ткаченко В. А. **113**, 328 (331);
114, 114 ()
- Ткаченко О. А. **112**, 196 (186);
113, 328 (331);
114, 114 ()
- Толордава Э. Р. **113**, 365 (365)
- Толстихина И. Ю. **113**, 784 (752)
- Толстогузов А. Б. **111**, 531 (467)
- Томилин В. А. **113**, 212 (207)
- Тонкаев П. **112**, 658 (615)
- Тоноян А. **113**, 629 (605)
- Торопов А. А. **112**, 17 (13);
113, 248 (252);
113, 507 (504)
- Торунова С. А. **112**, 623 (582)
- Тофтул И. Д. **113**, 553 (547)
- Трахтенберг Л. И. **112**, 341 (316);
113, 768 ()
- Тронин И. В. **113**, 378 (378)
- Трошков С. И. **113**, 248 (252)
- Трубилко А. И. **111**, 632 (532);
111, 798 (672)
- Трусов Г. В. **112**, 562 (527)
- Тсучия Ф. **114**, 18 ()
- Тузиков А. В. **113**, 784 (752)
- Тупиков Е. В. **111**, 750 (633)

- Турундаевский А. Н. **111**, 435 (363)
- Турьянский А. Г. **112**, 774 (734);
114, 228 ()
- Уаман Светикова Т. А. **111**, 682 (575);
113, 399 (402)
- Уздин В. М. **113**, 833 (801)
- Уланов В. А. **113**, 52 (47)
- Уманский В. **111**, 668 (562);
113, 697 (670)
- Устинов Н. В. **112**, 30 (24)
- Уткин Д. Е. **113**, 501 (498)
- Уханов М. Н. **111**, 291 (251)
- Фабричная О. Б. **111**, 674 (568)
- Фадин В. С. **111**, 3 (1)
- Фазлиахметов А. Н. **111**, 723 (603)
- Федорова А. В. **112**, 754 (715)
- Федоров А. Н. **112**, 437 (399);
Федоров А. Н. **113**, 435 (423);
113, 763 (733)
- Федоров В. В. **112**, 639 (597)
- Федоров И. Д. **113**, 392 (396)
- Федоров М. В. **114**, 311 ()
- Федоров П. П. **111**, 625 (525)
- Федорук Г. Г. **113**, 486 (487)
- Федотов А. Б. **112**, 22 (17);
113, 304 (301)
- Федотова Я. В. **112**, 38 (31)
- Федотов И. В. **113**, 3 (1)
- Федюхин Л. А. **114**, 304 ()
- Федянин А. А. **111**, 40 (46);
Федянин А. А. **112**, 361 (341);
112, 730 (693)
- Фейгельман М. В. **112**, 251 (234)
- Фельдман Э. Б. **112**, 754 (715)
- Феокистов А. **113**, 385 (384)
- Филатов С. В. **111**, 653 (549)
- Филипов В. Б. **113**, 533 (526)
- Филипович М. **113**, 229 (231)
- Филиппов А. В. **113**, 229 (231);
113, 784 (752)
- Филиппов В. Б. **112**, 451 (413)
- Фильченков С. Е. **113**, 655 (626)
- Фишман Р. И. **112**, 774 (734)
- Флейта Д. Ю. **111**, 251 (245)
- Флусова Д. С. **113**, 229 (231)
- Фомин И. А. **114**, 269 ()
- Фортов В. Е. **113**, 92 (82)
- Форш П. А. **112**, 379 (357)
- Фраерман А. А. **111**, 815 (690);
113, 353 (356)
- Франк А. Г. **112**, 667 (623)
- Фрейман В. М. **114**, 263 ()
- Фу Д. **111**, 531 (467)
- Хабарова К. Ю. **112**, 626 (585);
Хабарова К. Ю. **114**, 53 ();
114, 291 ()
- Хайдуков З. В. **113**, 21 (18)
- Ханин Ю. Н. **113**, 605 (586)
- Ханнанов Б. Х. **111**, 826 (709)
- Харинцев С. С. **113**, 152 (140)
- Харитонов А. В. **113**, 152 (140)
- Харлов Ю. В. **113**, 291 (289)
- Хисамеева А. Р. **113**, 689 (657);
114, 328 ()
- Хмельницкий Р. А. **112**, 579 (533)
- Ходжибагян Г. Г. **113**, 784 (752)
- Холин А. А. **112**, 314 (299)
- Хоник В. А. **111**, 691 (586);
Хоник В. А. **111**, 806 (679);
Хоник В. А. **113**, 341 (345);
113, 751 (723)
- Хоперский А. Н. **111**, 61 (72)

- Хорошилов А. Л. **112**, 451 (413);
113, 533 (526)
- Хохлов В. А. **113**, 84 (75);
113, 311 (308)
- Хохлов Д. А. **112**, 764 (725)
- Хохлов Д. Р. **112**, 263 (246);
113, 548 (542)
- Храпай В. С. **111**, 88 (104)
- Цветков А. Ю. **111**, 166 (151)
- Цзиао Ц. Ч. **111**, 691 (586);
113, 751 (723)
- Цой К. В. **111**, 514 (447);
112, 275 (257)
- Цыганков П. А. **113**, 311 (308)
- Цымбаленко В. Л. **113**, 33 (30)
- Цыпкин А. Н. **113**, 237 (242)
- Цяо Ф. **111**, 501 (434)
- Чайка А. Н. **113**, 189 (176)
- Чайков Л. Л. **113**, 435 (423)
- Чанг Ш. **111**, 501 (434)
- Чаплик А. В. **112**, 246 (230);
114, 78 ()
- Чаповский П. Л. **111**, 75 (85)
- Чареев Д. А. **113**, 450 (454)
- Чекалин С. В. **111**, 27 (31);
113, 365 (365);
113, 723 (677);
113, 817 (787)
- Чен С. М. **114**, 250 ()
- Ченцов С. И. **112**, 501 (471);
114, 96 ()
- Чернозатонский Л. А. **111**,
93 (109);
Чернозатонский Л. А. **111**,
244 (235);
Чернозатонский Л. А. **111**,
469 (397);
112, 328 (305)
- Чернопицкий М. А. **112**, 160 (145)
- Чернышева Л. В. **111**, 12 (18);
Чернышева Л. В. **112**, 233 (219);
112, 709 (673)
- Чернышев Б. А. **113**, 147 (135)
- Чернышов А. А. **114**, 18 ()
- Чернявский А. Ю. **111**, 615 (512)
- Черняк А. М. **111**, 40 (46)
- Чесноков М. Ю. **112**, 3 (1);
113, 223 (226)
- Чесноков Ю. А. **112**, 3 (1);
113, 223 (226)
- Чибранов А. А. **111**, 335 (299)
- Чиглинцев Э. О. **114**, 291 ()
- Чижевский Е. Г. **111**, 166 (151)
- Чижов М. В. **112**, 147 (133)
- Чирков П. Н. **113**, 223 (226)
- Чичков В. И. **112**, 743 (705)
- Чугунин Д. В. **114**, 18 ()
- Чукланов Д. А. **113**, 661 (631)
- Чулков Е. В. **114**, 82 ()
- Чумаков А. И. **113**, 175 (162)
- Чумаков Д. К. **113**, 229 (231)
- Чупраков С. А. **114**, 24 ()
- Шавров В. Г. **111**, 345 (311);
113, 475 (477)
- Шавров В. Г. **112**, 458 (420);
113, 475 (477)
- Шайхисламов И. Ф. **111**, 335 (299)
- Шакуров Г. С. **113**, 52 (47)
- Шангараев А. А. **113**, 291 (289)
- Шандаров С. М. **112**, 644 (602);
113, 797 (769)
- Шапиро Д. Д. **112**, 639 (597)
- Шапочкина И. В. **112**, 341 (316);
113, 768 ()
- Шараева А. Е. **112**, 644 (602)

- Шарыпов К. А. **113**, 370 (370)
- Шахмурагов Р. Н. **111**, 181 (167)
- Шашков Е. В. **112**, 774 (734);
114, 263 ()
- Шевелев М. В. **111**, 295 (255)
- Шевелько В. П. **113**, 784 (752)
- Шельгина С. Н. **113**, 365 (365)
- Шергин А. П. **114**, 13 ()
- Шилов Г. В. **111**, 838 (720)
- Шиманский С. С. **111**, 291 (251)
- Шипило Д. Е. **111**, 27 (31)
- Ширделхавар А. **114**, 221 ()
- Ширяев А. А. **111**, 597 (489)
- Шицевалова Н. Ю. **112**, 451 (413);
113, 533 (526)
- Шишков В. Ю. **114**, 43 ()
- Шкарин А. Б. **112**, 17 (13)
- Шкитов Д. А. **111**, 295 (255)
- Шкляев А. А. **113**, 58 (52)
- Шкляев В. А. **113**, 133 (129)
- Шорохов А. С. **111**, 40 (46);
112, 730 (693)
- Шпак В. Г. **113**, 370 (370)
- Шпатаковская Г. В. **111**, 526 (463)
- Шубина Т. В. **113**, 248 (252);
113, 507 (504)
- Шувалов Е. Н. **113**, 229 (231)
- Шунайлов С. А. **113**, 370 (370)
- Шур В. Я. **112**, 644 (602)
- Шустин М. С. **113**, 267 (279)
- Шутый А. М. **111**, 735 (619)
- Щапин Д. С. **113**, 415 (418)
- Щеголев А. Е. **111**, 443 (371)
- Щепетильников А. В. **113**,
689 (657);
114, 328 ()
- Юсупов Р. А. **111**, 641 (539)
- Ягупов С. В. **112**, 374 (352)
- Язынин И. А. **112**, 3 (1)
- Якимов А. И. **113**, 501 (498)
- Яковлева В. В. **114**, 323 ()
- Яковлев И. А. **114**, 192 ()
- Яковлев С. Л. **114**, 6 ()
- Якушкин Е. Д. **113**, 348 (352)
- Яландин М. И. **113**, 370 (370)
- Янович А. А. **112**, 3 (1);
113, 223 (226)
- Янушкевич К. И. **112**, 680 (636)
- Яревский Е. А. **114**, 6 ()
- Яржемский В. Г. **111**, 487 (422)
- Ярославцев Р. Н. **111**, 197 (183)
- Ярошевич А. С. **113**, 328 (331)
- Ярошевич А. С. **111**, 107 (121);
Ярошевич А. С. **112**, 174 (161);
114, 114 ()
- Ясников И. С. **114**, 333 ()

Информация для авторов

Журнал “Письма в ЖЭТФ” (и его англоязычная версия “JETP Letters”) публикует:

- Краткие оригинальные статьи, требующие срочной публикации и представляющие общий интерес для широкого круга читателей-физиков. К категории срочных публикаций относятся первые наблюдения новых физических явлений и теоретические работы, содержащие принципиально новые результаты.
- Миниобзоры на наиболее актуальные “горячие” темы, по результатам недавних исследований выполненных авторами.
- Краткие комментарии к статьям, появившимся ранее в нашем журнале.

“Письма в ЖЭТФ” является двуязычным журналом, принимая и публикуя статьи на русском и на английском языках¹⁾. Все статьи на английском языке, принятые к публикации, направляются на лингвистическую экспертизу. Если английский текст признается недостаточно ясным, то редакция оставляет за собой право попросить авторов улучшить качество языка или представить для опубликования русскую версию статьи.

В “JETP Letters” все статьи публикуются на английском языке. Авторы принятых к печати статей могут (и это приветствуется), сразу же после извещения о принятии, прислать в редакцию предлагаемый ими самостоятельный перевод своей русскоязычной статьи на англ. язык. Наличие такого перевода, хотя и не гарантирует его безусловное принятие переводчиками Издателя, но зачастую облегчает авторам взаимодействие с ними. Перевод русских и редактирование английских статей осуществляется в издательстве МАИК “Наука/Интерпериодика”. Русская и англоязычная версии должны быть идентичны, поскольку статья, опубликованная в обеих версиях, является одной публикацией. Хотя английская версия окончательно редактируется на месяц позже русской, в ней не должно быть дополнительных ссылок, рисунков, формул и т.п., и все утверждения должны быть одинаковы.

Размер оригинальной статьи, как правило, не должен превышать 7 страниц русского издания (двухколоночный формат, соответствующий стилевому файлу), включая 5–6 рисунков. Размер миниобзора, как правило, не должен превышать 12 страниц, включая 8–10 рисунков. Типичный размер комментария и ответа на комментарий – до 1 стр.

Образец статьи²⁾, с использованием стилевого файла jetpl.cls (кодировка UTF-8³⁾, кодировка KOI8-R⁴⁾).

Статьи в редакцию можно направлять

- по электронной почте letters@kapitza.ras.ru – направлять текст в формате TeX, LaTeX (для статей на русском языке допускается MS Word), рисунки в формате PostScript (.ps), EncapsulatedPostScript (.eps) или PaintBrush (.psx), каждый рисунок отдельным файлом. Необходимо также приложить pdf файл статьи с встроеными рисунками.
- по почте по адресу: 117334 Москва, ул. Косыгина 2, “Письма в ЖЭТФ” – два экземпляра статьи с рисунками на отдельных страницах (для полутоновых рисунков еще один дополнительный экземпляр).

К рукописи нужно приложить электронный адрес (e-mail) и почтовый адрес с индексом, фамилию, полное имя и отчество того автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номера его служебного и домашнего телефонов; для статей на английском языке – дополнительно CD диск или флеш карту с текстом в формате LATEX; для статей из России и других стран СНГ, в случае необходимости, может быть представлено направление от учреждения, которое будет фигурировать в титуле статьи как основное.

¹⁾<http://www.jetpletters.ru/ru/info.shtml#sub1>

²⁾<http://www.jetpletters.ru/tex/utf8/example.tex>

³⁾<http://www.jetpletters.ru/tex/utf8/jetpl.cls>

⁴⁾<http://www.jetpletters.ru/tex/koi/jetpl.cls>

Представленные в редакцию рукописи предварительно рассматриваются Редакторами. Не все рукописи направляются на отзыв рецензентам. Редколлегия на основании заключения Редактора может отклонить статьи, которые явно не соответствуют правилам и не подходят для журнала. С другой стороны, ни одна статья не принимается в печать без отзыва рецензентов или членов Редколлегии.

Решение о публикации или отклонении статей принимается на заседании редколлегии по представлению члена редколлегии по соответствующему разделу, с учетом мнения рецензентов. Основанием для отклонения статьи может быть ее недостаточная актуальность, отсутствие существенного продвижения по сравнению с другими публикациями в этой области, слишком специальная тематика и др. Рецензии на отклоненные статьи могут и не посылаться авторам. Авторы могут прислать отклоненную статью на повторное рассмотрение, сопроводив ее аргументированным разъяснительным письмом. В этом случае статья будет направлена на дополнительное рецензирование.

В связи с требованиями издателя и распространителя журнала “JETP Letters”, наш журнал “Письма в ЖЭТФ” с середины 2016 года лишен возможность публиковать полные тексты статей, исходно написанных на английском языке. Чтобы выполнить это требование, но не лишать российских читателей части информации, редакцией журнала принято следующее решение: для статей, представленных на английском языке и удовлетворяющих всем требованиям журнала, публиковать в “Письмах в ЖЭТФ” расширенные аннотации на английском языке (объемом не более 1–2 стр. журнального текста, или 5600–11200 знаков текста, включая один рисунок и список литературы). В конце аннотации будет приведена ссылка на полный текст статьи в журнале “JETP Letters”.

Оформление рукописи

Первая страница рукописи должна выглядеть следующим образом.

ЗАГЛАВИЕ

Инициалы и фамилии авторов

Обязательно — *Учреждения, где работают авторы (включая город и почтовый индекс; e-mail одного из авторов)*

Дата поступления

Текст аннотации

Далее следует основной текст.

Фамилии иностранных авторов пишутся в русской транскрипции, но в сноске дополнительно указывается оригинальная транскрипция. Названия мест работы за рубежом пишутся по-английски.

Обращаем внимание авторов статей на русском языке на то, что перевод фамилий с русского языка на английский производится по жестким правилам (см. Письма в ЖЭТФ, т. 58, вып. 8, с. 699). Если авторы по каким-то причинам предпочитают иную транскрипцию своей фамилии, об этом следует написать на отдельном листе. Поскольку аннотации сейчас распространяются и отдельно от статей (базы данных, системы – On-line. и т.п.), текст аннотации должен быть самодостаточным: без ссылок на список литературы, с понятными обозначениями, без аббревиатур.

Сокращения словосочетаний должны даваться заглавными буквами (без точек) и поясняться при первом их употреблении. В тексте подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье.

Цитируемая литература должна даваться общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой, например, [1]. Литература дается в порядке упоминания в статье. Для журнальных статей указываются сначала инициалы, затем фамилии всех авторов, название журнала, номер тома (полужирным шрифтом), первая страница и год в круглых скобках. В случае, если цитируемая статья имеет более 4-х авторов, то только 3 первых должны быть перечислены явно, например

1. A. V. Ivanov, V. G. Petrov, I. M. Sergeev et al., JETP **71**, 161 (1990).

Для книг надо указывать инициалы и фамилии всех авторов, полное название книги, издатель, год, том, номер издания, часть, глава, страница (если ссылка на переводное издание, то обязательно в скобках нужно указать данные оригинала), например

2. L. M. Blinov, *Structure and Properties of Liquid Crystals*, Springer, Heidelberg (2011).

Цитирование двух или более произведений под одним номером, одного и того же произведения под разными номерами не допускается.

В обозначениях и индексах не должно быть русских букв. Например, следует писать P_{opt} , а не $P_{\text{опт}}$.

В десятичных дробях вместо запятой нужно использовать точку. Векторы должны выделяться в тексте статьи полужирным шрифтом (без стрелки над ними).

Поскольку рисунки переносятся без изменений из “Писем в ЖЭТФ” в “JETP Letters” все надписи на рисунках должны быть только на английском языке. Авторы, использующих при подготовке рисунков компьютерную графику, просим придерживаться следующих рекомендаций: графики делать в рамке; штрихи на осях направлять внутрь; по возможности использовать шрифт Times; высота цифр и строчных букв должна быть в пределах (3–4) % от максимального размера (высоты или ширины) рисунков, это относится и к цифрам на осях вставки; единицы измерения на осях графиков приводить в скобках. При подготовке рисунка имейте в виду, что, как правило, ширина рисунка при печати не превышает 82 мм; в исключительных случаях рисунок размещается на всей ширине листа (до 160 мм).

Рисунки публикуются “on-line” в цвете. На авторов возлагается обязанность проверить, что цветные рисунки читаемы, достаточно контрастны и в черно-белом печатном варианте. Образцы оформления статьи и рисунков, а также стилевой файл можно найти на WWW-странице “Писем в ЖЭТФ” (<http://www.jetpletters.ru/>).

Дополнительный материал

Журнал “Письма в ЖЭТФ” предоставляет авторам возможность публикации **Дополнительного материала**. **Дополнительный материал**, относящийся к статье, помещается на сайт одновременно с публикацией статьи в журнале. В **Дополнительный материал** помещаются сведения, существенные для узкого круга специалистов (например, детали сложных вычислений или мелкие детали экспериментальной техники), но не являющиеся критичными для понимания статьи широким кругом читателей журнала. **Дополнительный материал** не может быть использован для преодоления ограничения статьи по объему.

Объем дополнительного материала не должен превышать 4 страниц текста, с включением не более 4 рисунков.

В дополнительный материал нельзя включать:

- Дополнительный список литературы
- Сведения о вкладе авторов в работу
- Благодарности
- Комментарии, отклики или поправки.

Как прислать Дополнительный материал в редакцию

Дополнительный материал принимается **на английском языке** в виде TeX, doc и eps файлов одновременно со статьей по электронной почте по адресу letters@kapitza.ras.ru и рассматривается редакционной коллегией и рецензентами в совокупности со статьей. Файлы **Дополнительного материала** могут быть посланы в виде нескольких сообщений или могут быть включены в одно сообщение. В качестве темы этих сообщений должно быть указано “Дополнительный материал”. В письме должно также быть приведено название статьи, фамилия первого автора и перечень всех прилагаемых файлов.

Правила оформления файлов Дополнительного материала и процедура рассмотрения

Правила оформления файла **Дополнительного материала** совпадают с правилами оформления основной статьи. В заголовке должно быть написано “Дополнительный материал к статье {название статьи}”. Рисунки предпочтительны в цвете. Редакцией и рецензентами **Дополнительный материал** рассматривается как часть статьи и отдельно не рецензируется. За качество рисунков и качество английского языка **Дополнительного материала** ответственность ложится на авторов.

Ссылка на Дополнительный материал в статье

В статье адрес **Дополнительного материала** приводится в последней ссылке списка литературы в следующем виде:

See Supplemental Material at {для принятой к печати статьи ссылка будет введена редакцией}

Или в русском тексте

См. Дополнительный материал по адресу {для принятой к печати статьи ссылка будет введена редакцией}.

Право на воспроизведение

Дополнительный материал не является отдельным субъектом авторского права и входит в соглашение, подписанное автором для основного текста статьи. Любое воспроизведение **Дополнительного материала** должно подчиняться тем же правилам, что и текст основной статьи.

Комментарии в журнале “Письма в ЖЭТФ”

Журнал “Письма в ЖЭТФ” публикует краткие комментарии на ранее опубликованные в нем статьи. Авторы оригинальной статьи, на которую написан комментарий, могут на него ответить. Если и комментарий и ответ на него обоснованы и интересны, они принимаются в печать и публикуются в одном номере журнала. Отсутствие ответа авторов комментируемой статьи не является основанием для чрезмерной задержки или отказа в публикации комментария – если комментарий соответствует установленным критериям, он будет опубликован независимо от того, получен на него ответ авторов комментируемой работы или нет. Редакция не принимает комментарии, написанные кем-либо из авторов статьи. Комментарии и ответы ограничены по объему одной журнальной страницей (включая рисунки), аннотация не требуется. При желании авторы могут разместить на сайте журнала дополнительный материал, руководствуясь общими правилами (см. соответствующий раздел)⁵⁾.

Комментарий должен быть направлен на исправление или критику конкретной статьи. В первом абзаце комментария необходимо дать четкую ссылку на комментируемую статью, а также на то ее утверждение, которое комментируется. Комментарий должен касаться существа комментируемой статьи (не формы или стиля изложения) и быть непосредственно связанным с ней, а не просто содержать обсуждение общей темы. Формат комментария не предназначен для использования как инструмент для публикации дополнений к уже опубликованным статьям, он не предназначен также для установления приоритета или исправления библиографических неточностей. Критические замечания должны быть написаны в коллегиальном тоне; полемические комментарии отклоняются без рецензирования. Ответ авторов, чтобы быть пригодным для публикации, также должен быть написан в коллегиальном стиле и свободен от полемики.

Каждый комментарий отправляется авторам оригинальной статьи, у которых запрашиваются ответы на следующие вопросы:

1. Может ли комментарий быть опубликован без ответа?
2. Будет ли прислан ответ на комментарий для одновременной публикации?
3. Не кажется ли авторам, что комментарий слабо связан с оригинальной статьей? (В этом случае требуется подробная аргументация).

Автор оригинальной статьи не является анонимным рецензентом по отношению к комментарию. Редакция оставляет за собой право обратиться к анонимному рецензенту — независимому эксперту, у которого может быть запрошено мнение о комментарии и об ответе авторов. Авторам комментария рекомендуется вначале отправить свой комментарий первому автору комментируемой статьи для прямого ответа, однако редакция не рассматривает такой шаг в качестве обязательного. Ответ авторов комментируемой статьи будет предоставлен авторам комментария до публикации, однако последовавший за этим существенный пересмотр комментария будет интерпретирован как знак его ошибочности и может послужить причиной отказа в его публикации. Редакция не рассматривает комментарии на ответ авторов.

⁵⁾<http://www.jetpletters.ru/ru/supp.shtml>

Миниобзоры

Журнал «Письма в ЖЭТФ» в течение последних 10 лет в порядке опыта публиковал «заказные» мини-обзоры по результатам избранных законченных проектов РФФИ и РНФ. Как показало время, такие обзоры пользуются популярностью и активно читаются. В связи с этим редколлегия журнала решила расширить данную практику и, начиная с июля 2020 г., принимает к рассмотрению миниобзоры не только заказные, но и представленные самими авторами в инициативном порядке.

Правила оформления рукописей, касающиеся статей и обзоров – см. на

<http://www.jetpletters.ru/ru/info.shtml>

Миниобзор, как и регулярная статья, будет рецензироваться, обсуждаться членами редколлегии и будет приниматься к публикации только в случае его соответствия требованиям, предъявляемым к статьям.

Содержание
Том 114, выпуск 5
Оптика, лазерная физика

Кудеяров К.С., Головизин А.А., Борисенко А.С., Жаднов Н.О., Заливако И.В., Крючков Д.С., Чиглинцев Э.О., Вишнякова Г.А., Хабарова К.Ю., Колачевский Н.Н. Сличение трех ультрастабильных лазеров через фемтосекундную гребенку частот 291

Архипов Р.М., Архипов М.В., Бабушкин И., Пахомов А.В., Розанов Н.Н. Особенности возбуждения квантовых систем малоцикловыми аттосекундными световыми импульсами – интерференция площадей огибающей и электрической площади импульса 298

Федюхин Л.А., Горчаков А.В., Коробейщиков Н.Г., Николаев И.В. Прецизионное измерение оптических характеристик приповерхностного слоя твердых тел 304

Конденсированное состояние

Кисленко В.А., Павлов С.В., Федоров М.В., Кисленко С.А. Новые аспекты увеличения емкости графена путем внедрения дефектов в водных электролитах и ионных жидкостях 311

Стишов С.М., Петрова А.Е. Спиновые флуктуации и отрицательная теплоемкость (Миниобзор) 318

Бреев И.Д., Лихачев К.В., Яковлева В.В., Вейшторг И.П., Скоморохов А.М., Нагалюк С.С., Мохов Е.Н., Астахов Г.В., Баранов П.Г., Анисимов А.Н. Влияние механических напряжений на расщепление спиновых подуровней в 4H-SiC 323

Хисамеева А.Р., Щепетильников А.В., Нефедов Ю.А., Кукушки И.В. Наблюдение индуцированных микроволновым излучением осцилляций магнетосопротивления в ZnO/Mg_xZn_{1-x}O гетеропереходе бесконтактной методикой 328

Ясников И.С., Грызунова Н.Н. О причинах формирования и стабильности однокомпонентных микрокристаллов электролитического происхождения с фуллереноподобным габитусом усеченного икосаэдра 333

Мицкан В.А., Коровушкин М.М., Дзедзисашвили Д.М. Реализация концепции спинового полярона в купратных сверхпроводниках на основе диаграммной техники 339

Zainullina V.M., Korotin M.A. Influence of cation impurities and both cation and anion nonstoichiometry on aluminum oxide energy gap width 346

Содержание

Том 114, выпуск 6

Поля, частицы, ядра

Demyanova A.S., Danilov A.N., Dmitriev S.V., **Ogloblin A.A.**, Starastin V.I., Goncharov S.A., Janseitov D.M. Search for exotic states in ^{13}C 351

Волков М.К., Пивоваров А.А. Вычисление ширины распада $\tau \rightarrow K^- K^0 \nu_\tau$ в расширенной модели НИЛ с оценкой вклада от взаимодействия каонов в конечном состоянии 353

Оптика, лазерная физика

Yan R.-Y., Feng Z.-B. Population transfer in a nitrogen-vacancy spin qutrit via shortcuts to adiabaticity with simplified drivings 358

Сафронов К.Р., Бессонов В.О., Федянин А.А. Оптимизация многослойных фотонных структур с помощью искусственных нейронных сетей для получения заданного оптического отклика .. 360

Конденсированное состояние

Zhang M., Song F., Liang S. Facile fabrication of Cu_2O thin film with high Seebeck coefficient 365

Ханин Ю.Н., Вдовин Е.Е., Морозов С.В. Сильное влияние длины световой волны на квантовые осцилляции фототока и их резонансно-туннельная природа в GaAs/AlAs $p-i-n$ структурах . 366

Нечаев Ю.С., Денисов Е.А., Шурыгина Н.А., Черетаева А.О., Костикова Е.К., Давыдов С.Ю. О физике и атомных механизмах интеркаляции молекулярного водорода в графитовые нановолокна 372

Квон З.Д., Ольшанецкий Е.Б., Дрофа М.А., Михайлов Н.Н. Андерсоновская локализация в двумерной электронно-дырочной системе 377

Богословский Н.А., Петров П.В., Аверкиев Н.С. Спин-флуктуационный переход в неупорядоченной модели Изинга 383

Квантовая информатика

Богданов Ю.И., Богданова Н.А., Фастовец Д.В., Лукичев В.Ф. Решение уравнения Шредингера на квантовом компьютере методом Залки–Визнера с учетом квантовых шумов 391

Биофизика

Zakhvataev V.E. A statistical model for short-wavelength collective chain fluctuations in a lipid bilayer under a high external electric field 400

Текущий авторский указатель томов 111–114 402

Информация для авторов	425
------------------------------	-----