

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД

МОСКВА

ТОМ 159, ВЫПУСК 6

ИЮНЬ 2021

РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

- Отклик высших гармоник интенсивного когерентного электромагнитного поля на изменение топологии поверхности Ферми в графеноподобных наносистемах Авчян Б. Р., Казарян А. Г., Саргсян К. А., Седракян Х. В. 1003
- Ван-дер-ваальсово притяжение атомов водорода Ишханян А. М., Крайнов В. П. 1013

ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА

- Построение теней черных дыр. Аналитическая теория Чернов С. В. 1018

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

- Модификация электронной структуры квазисвободного графена при адсорбции и интеркаляции атомов Mn . . . Гогина А. А., Рыбкин А. Г., Шикин А. М., Тарасов А. В., Петацца Л., Ди Санто Г., Елисеев И. А., Лебедев С. П., Давыдов В. Ю., Климовских И. И. 1028

**ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ
В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ**

- Влияние замороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в трехмерной модели Поттса Муртазаев А. К., Бабаев А. Б. 1041

© Российская академия наук, 2021

© Редколлегия журнала ЖЭТФ (составитель), 2021

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Вращательная дипольная плазмонная мода в наноразмерных полупроводниковых частицах	Герчиков Л. Г., Ипатов А. Н.	1047
Безмассовые электронные возбуждения в графене в окрестности кулоновских примесей	Бреев А. И., Гитман Д. М.	1070

СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА,
ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ

Гидромагнитные неустойчивости в неоднородно вращающемся слое электропроводящей наножидкости	Копп М. И., Тур А. В., Яновский В. В.	1090
Квазиизэнтропическое сжатие неидеальной плазмы дейтерия и его смеси с гелием в области давлений до 250 ГПа	Мочалов М. А., Илькаев Р. И., Фортов В. Е., Ерунов С. В., Аринин В. А., Бликов А. О., Огородников В. А., Рыжков А. В., Комраков В. А., Куделькин В. Г., Максимкин И. П., Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Левашов П. Р., Минаков Д. В., Парамонов М. А.	1118
Алфавитный указатель тома 159 за 2021 г.		1134
Предметный указатель тома 159 за 2021 г.		1141

ОТКЛИК ВЫСШИХ ГАРМОНИК ИНТЕНСИВНОГО КОГЕРЕНТНОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ИЗМЕНЕНИЕ ТОПОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ В ГРАФЕНОПОДОБНЫХ НАНОСИСТЕМАХ

Б. Р. Авчян, А. Г. Казарян, К. А. Саргсян, Х. В. Седражян*

*Центр физики сильных полей, Ереванский государственный университет
0025, Ереван, Армения*

Поступила в редакцию 10 января 2021 г.,
после переработки 1 февраля 2021 г.
Принята к публикации 5 февраля 2021 г.

Исследован отклик высших гармоник лазерного поля на изменение топологии поверхности Ферми в графеноподобных наносистемах в процессе генерации. Использована микроскопическая нелинейная квантовая теория взаимодействия интенсивного когерентного электромагнитного излучения с такими системами вблизи критического уровня Ферми. Численно решено уравнение Лиувилля–фон Неймана для матрицы плотности в режиме многофотонного возбуждения. Полученные результаты показывают, что высшие гармоники чувствительны к изменению топологии поверхности Ферми, что может быть использовано для определения энергии Ферми в таких системах.

DOI: 10.31857/S0044451021060018

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее десятилетие большой интерес представляет создание интенсивных перестраиваемых нанолазеров и умножителей частоты в графеноподобных наносистемах [1–3]. Используются особые нелинейно-оптические свойства графеноподобных наноструктур, возникающие в результате нелинейного отклика таких материалов на внешнее электромагнитное излучение. Задача сводится к исследованию процесса нелинейного взаимодействия света с наносистемой, в которой происходит многофотонное явление — генерация высших гармоник (ГВГ) [4–6]. Все больше внимания уделяется рассмотрению ГВГ в кристаллах [7–13] и двумерных (2D) наноструктурах, таких как графен и его производные [7–30], гексагональный нитрид бора [31] и дихалькогениды переходных металлов [32, 33]. В настоящее время мы наблюдаем рождение новой развивающейся области исследований непертурбативных оптических явлений в наноструктурированных

материалах, таких как графеноподобные квантовые точки или замкнуто-выпуклые фуллерены [34].

В связи с этими проблемами представляет интерес определение энергии Ферми электронов в низкоразмерных наноструктурах [35]. Мы будем рассматривать переходы Лифшица с энергией фотона, много меньшей, чем так называемая энергия Лифшица, когда энергия фотона равна энергии Ферми электрона. Во время перехода Лифшица происходит фрагментация односвязной линии Ферми на четыре отдельные части [36–39]. Используя это свойство, можно теоретически оценить энергию Ферми в графене, состоящем из двух сложенных слоев, А и В (далее АВ-графен). Это позволяет исследовать влияние топологии поверхности Ферми на ГВГ в графеноподобной наноструктуре.

В качестве примера такой структуры можно предложить систему двухслойного графена. Она представляет особую систему, в которой топология зонной структуры может быть выбрана и изменена. Нелинейный когерентный отклик в АВ-графене под действием интенсивного электромагнитного излучения приводит к модификации квазиэнергетического спектра, индукции поляризованных токов долин [40, 41], а также к нелинейно-оптическим эффектам третьего и пятого порядков [42–45]. Двухслой-

* E-mail: amarkos@ysu.am

ный АВ-графен — хорошо настраиваемый материал. Можно настроить энергию Ферми с помощью внешних возмущений, таких как поперечное электрическое поле или деформация [46–52].

В настоящей статье с помощью разработанного ранее численного моделирования [26–28] и микроскопической нелинейной квантовой теории взаимодействия АВ-графена с линейно поляризованной электромагнитной волной рассматривается процесс генерации гармоник. Численно решается уравнение Лиувилля–фон Неймана для ГВГ в режиме многофотонного возбуждения вблизи точек Дирака зоны Бриллюэна. Полученные результаты показывают, что изменение топологии поверхности Ферми влияет на высшие гармоники. Последнее может быть использовано для определения энергии Ферми в таких системах при ГВГ волны накачки с эффективным выходом в терагерцевой (ТГц) и субТГц-областях спектра при температурах графена выше криогенных.

Работа организована следующим образом. В разд. 2 численно решена система уравнений для одночастичной матрицы плотности в режиме многофотонного взаимодействия. В разд. 3 исследуется влияние изменения топологии поверхности Ферми на генерацию высших гармоник при низкоэнергетическом переходе в графеноподобной наноструктуре. Выводы приведены в разд. 4.

2. ОСНОВНАЯ МОДЕЛЬ И ТЕОРИЯ

Рассмотрим влияние топологии поверхности Ферми при генерации высоких гармоник в графеноподобной наноструктуре на примере АВ-графена. В данной статье мы используем результаты микроскопической нелинейной квантовой теории взаимодействия когерентного электромагнитного излучения с двухслойным графеном, развитую в работах [26–28]. Предположим, что линейно поляризованная плоская электромагнитная волна с несущей частотой ω и медленно меняющейся амплитудой $E_0 f(t)$ электрического поля распространяется в направлении, перпендикулярном плоскости xy слоев графена и имеет вид

$$\mathbf{E}(t) = E_0 f(t) \mathbf{e} \cos \omega t, \quad (1)$$

где \mathbf{e} — вектор поляризации. Медленно меняющаяся огибающая волны накачки равна

$$f(t) = \begin{cases} \sin^2(\pi t / \mathcal{T}_p), & 0 \leq t \leq \mathcal{T}_p, \\ 0, & \mathcal{T}_p < t < 0, \end{cases}, \quad (2)$$

где $\mathcal{T}_p = 40\pi / \omega$ — длительность импульса.

Эффективный одночастичный гамильтониан [36, 49, 50] низкоэнергетических возбуждений $|\varepsilon| < < \gamma_1 \simeq 0.39$ эВ в окрестности точек Дирака K_ζ , в АВ-графене может быть представлен формулой

$$\hat{H}_{AB} = \begin{pmatrix} 0 & v_3 \zeta \hat{\pi}_\zeta - \frac{\hat{\pi}_\zeta^2}{2m} \\ v_3 \zeta \hat{\pi}_\zeta - \frac{\hat{\pi}_\zeta^2}{2m} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где $\hat{\pi}_\zeta = \hat{p}_x + i\zeta \hat{p}_y$, $\hat{\mathbf{p}} = \{\hat{p}_x, \hat{p}_y\}$ — оператор импульса электрона, $\zeta = \pm 1$ — квантовое число долины. Член $v_3 = \sqrt{3}a\gamma_3/2\hbar$ в гамильтониане (3) связан с межслоевым переходом $\gamma_3 = 0.32$ эВ ($a \approx 0.246$ нм — расстояние между ближайшими А-слоями), вызывает тригональное искривление в зонной дисперсии. Следующий член в уравнении (3) дает пару параболических изолиний $\varepsilon = \pm p^2/2m$, где $m = \gamma_1/2v_F^2$ — эффективная масса, $\gamma_1 \simeq 0.39$ эВ, v_F — скорость Ферми в однослойном графене. Функции собственных состояний $|\mathbf{n}\rangle$ гамильтониана (3) определяются комбинированным квантовым числом $\mathbf{n} = \{\sigma, \mathbf{p}\}$. Здесь σ — индекс зоны: для зоны проводимости $\sigma = 1$, для валентной зоны $\sigma = -1$. Таким образом, имеем

$$|\mathbf{n}\rangle = |\sigma, \mathbf{p}\rangle \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right), \quad (4)$$

где

$$|\sigma, \mathbf{p}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\mathcal{E}(\mathbf{n})}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{n})} \Upsilon(\mathbf{p}) \end{pmatrix} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right) \quad (5)$$

— спиноры, соответствующие энергиям

$$\mathcal{E}(\mathbf{n}) = \sigma |\Upsilon(\mathbf{p})|. \quad (6)$$

В уравнении (5)

$$\Upsilon(\mathbf{p}) = -\frac{p^2}{2m} e^{2i\zeta\vartheta} + \zeta v_3 p e^{-i\zeta\vartheta}, \quad (7)$$

и $\vartheta = \arctg(p_y/p_x)$.

Гамильтониан взаимодействия представим в виде

$$\hat{\mathcal{V}} = \begin{pmatrix} e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t) & 0 \\ 0 & e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t) \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где e — элементарный заряд. Для микроскопической теории нелинейного взаимодействия двухслойного графена с сильным полем излучения необходимо решить основное уравнение для матрицы плотности ρ_{mn} :

$$i\hbar \frac{\partial \rho_{mn}}{\partial t} = (\mathcal{E}(m) - \mathcal{E}(n))\rho_{mn} + \sum_l \left[\langle m | \hat{\mathcal{V}} | l \rangle \rho_{ln} - \rho_{ml} \langle l | \hat{\mathcal{V}} | n \rangle \right] - i\hbar \gamma_{mn} \left(\rho_{mn} - \rho_{mn}^{(0)} \right), \quad (9)$$

где $\rho_{mn}^{(0)}$ — матрица плотности в равновесии и γ_{mn} — вероятность релаксации. Для $\rho_{mn}^{(0)}$ мы предполагаем распределение Ферми–Дирака:

$$\rho_{mn}^{(0)} = n_F(n) \delta_{mn},$$

где

$$n_F(n) \equiv n_F(\sigma, \mathbf{p}) = \left[1 + \exp\left(\frac{\mathcal{E}(n) - \mu}{k_B T}\right) \right]^{-1}. \quad (10)$$

Здесь μ — химический потенциал, k_B — постоянная Больцмана и T — абсолютная температура.

С учетом гамильтониана (8), основное уравнение для матрицы плотности (9) сводится к уравнению для $\rho_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{p}, t)$:

$$\rho_{mn}(t) \equiv \rho(\sigma, \mathbf{p}; \sigma', \mathbf{p}', t) \equiv \rho_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{p}, t) \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'},$$

где $\delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ — символ Кронекера.

Таким образом, имеем

$$i\hbar \frac{\partial \rho_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{p}, t)}{\partial t} - i\hbar e \mathbf{E}(t) \frac{\partial \rho_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} = (\sigma - \sigma') \times \left[|\Upsilon(\mathbf{p})| - i\hbar \gamma_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{p}) \left(\rho_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{p}, t) - \rho_{\sigma, \sigma'}^{(0)}(\mathbf{p}) \right) \right] + \mathbf{E}(t) \left[\mathbf{D}_t(\sigma, \mathbf{p}) \rho_{-\sigma, \sigma'}(\mathbf{p}, t) - \mathbf{D}_t(-\sigma', \mathbf{p}) \times \rho_{\sigma, -\sigma'}(\mathbf{p}, t) \right], \quad (11)$$

где

$$\mathbf{D}_t(\sigma, \mathbf{p}) = \hbar e \langle \sigma, \mathbf{p} | i \partial_{\mathbf{p}} | -\sigma, \mathbf{p} \rangle \quad (12)$$

— дипольный момент перехода. В соответствии с работами [26–28] составляющими дипольного момента перехода являются

$$D_{tx}(\mathbf{p}) = -\frac{e\hbar}{2\mathcal{E}^2(1, \mathbf{p})} \times \left[\left(\frac{p^2}{2m} - m v_3^2 \right) \frac{\zeta p_y}{m} + \frac{v_3}{m} p_x p_y \right], \quad (13)$$

$$D_{ty}(\mathbf{p}) = -\frac{e\hbar}{2\mathcal{E}^2(1, \mathbf{p})} \times \left[\left(-\frac{p^2}{2m} + m v_3^2 \right) \frac{\zeta p_x}{m} + \frac{v_3}{2m} (p_x^2 - p_y^2) \right]. \quad (14)$$

В уравнении (11) недиагональными элементами являются межзональная поляризация $\rho_{1, -1}(\mathbf{p}, t) = \mathcal{P}(\mathbf{p}, t)$ и ее комплексно-сопряженная величина

$\rho_{-1, 1}(\mathbf{p}, t) = \mathcal{P}^*(\mathbf{p}, t)$, а диагональные элементы представляют собой функции распределения частиц для зоны проводимости, $N_c(\mathbf{p}, t) = \rho_{1, 1}(\mathbf{p}, t)$, и валентной зоны, $N_v(\mathbf{p}, t) = \rho_{-1, -1}(\mathbf{p}, t)$. Релаксацию определим членом $\gamma_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{p}) = \Gamma(\mu, T)$, зависящим от химического потенциала и температуры. Как показано в работах [53, 54], для энергий $\mu \ll \ll \gamma_1 = 0.39$ эВ доминирующим механизмом релаксации будет электрон-фононная связь через продольные акустические фононы. В низкотемпературном пределе $k_B T \ll 2(c_{ph}/v_F) \sqrt{\mu \gamma_1}$, где $c_{ph} \simeq 2 \cdot 10^6$ см/с — скорость продольного акустического фонона, скорость релаксации оценивается как [54]

$$\Gamma(\mu, T) \simeq \frac{\pi D^2 k_B^2 T^2}{8 \rho_m \hbar^3 c_{ph}^3 v_F} \sqrt{\frac{\gamma_1}{\mu}}. \quad (15)$$

Здесь $D \simeq 20$ эВ — постоянная электрон-фононного взаимодействия, $\rho_m \simeq 15 \cdot 10^{-8}$ г/см² — плотность массы двухслойного графена. Принимая во внимание уравнение (11), нам необходимо решить замкнутую систему дифференциальных уравнений для этих величин:

$$i\hbar \frac{\partial N_c(\mathbf{p}, t)}{\partial t} - i\hbar e \mathbf{E}(t) \frac{\partial N_c(\mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{E}(t) \mathbf{D}_t(\mathbf{p}) \mathcal{P}^*(\mathbf{p}, t) - \mathbf{E}(t) \mathbf{D}_t^*(\mathbf{p}) \mathcal{P}(\mathbf{p}, t) - i\hbar \Gamma(\mu, T) (N_c(\mathbf{p}, t) - n_F(1, \mathbf{p})), \quad (16)$$

$$i\hbar \frac{\partial N_v(\mathbf{p}, t)}{\partial t} - i\hbar e \mathbf{E}(t) \frac{\partial N_v(\mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} = -\mathbf{E}(t) \mathbf{D}_t(\mathbf{p}) \mathcal{P}^*(\mathbf{p}, t) + \mathbf{E}(t) \mathbf{D}_t^*(\mathbf{p}) \mathcal{P}(\mathbf{p}, t) - i\hbar \Gamma(\mu, T) (N_v(\mathbf{p}, t) - n_F(-1, \mathbf{p})), \quad (17)$$

$$i\hbar \frac{\partial \mathcal{P}(\mathbf{p}, t)}{\partial t} - i\hbar e \mathbf{E}(t) \frac{\partial \mathcal{P}(\mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} = [2|\Upsilon(\mathbf{p})| - i\hbar \Gamma(\mu, T)] \mathcal{P}(\mathbf{p}, t) + \mathbf{E}(t) \mathbf{D}_t(\mathbf{p}) [N_v(\mathbf{p}, t) - N_c(\mathbf{p}, t)]. \quad (18)$$

Оптическое возбуждение импульсом когерентного излучения вызывает переходы в море Ферми–Дирака, в результате чего возникает поверхностный ток. Оператор плотности тока задается формулой

$$g_{\zeta} = -2e \langle \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) | \hat{\mathbf{v}}_{\zeta} | \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (19)$$

Для эффективного 2×2 -гамильтониана (3) оператор скорости $\hat{\mathbf{v}}_{\zeta} = \partial \hat{H} / \partial \hat{\mathbf{p}}$ имеет вид

$$\hat{v}_{\zeta x} = \zeta \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{m} (\zeta \hat{p}_x - i \hat{p}_y) + v_3 \\ -\frac{1}{m} (\zeta \hat{p}_x + i \hat{p}_y) + v_3 & 0 \end{pmatrix}, \quad (20)$$

$$\hat{v}_{\zeta y} = i \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{m} (\zeta \hat{p}_x - i \hat{p}_y) + v_3 \\ -\frac{1}{m} (\zeta \hat{p}_x + i \hat{p}_y) - v_3 & 0 \end{pmatrix}, \quad (21)$$

а при ГВГ в АВ-графене внутризонная скорость $\mathbf{V}(\mathbf{p})$ дается формулой

$$\mathbf{V}(\mathbf{p}) = \frac{1}{\mathcal{E}(1, \mathbf{p})} \left(v_3 \mathbf{p} - 3\zeta \frac{v_3 p}{2m} \mathbf{p} \cos 3\vartheta + 3\zeta \frac{v_3 p^3}{2m} \sin 3\vartheta \frac{\partial \vartheta}{\partial \mathbf{p}} + 2 \frac{\mathbf{p}^3}{(2m)^2} \right). \quad (22)$$

Используя уравнения (5)–(7) и (3), плотность тока для долины ζ мы можем записать в виде

$$\mathbf{g}_{\zeta}(t) = -\frac{2e}{(2\pi\hbar)^2} \int d\mathbf{p} \left\{ \frac{2i}{\hbar} \mathcal{E}(1, \mathbf{p}) \times \right. \\ \left. \times [\mathbf{D}_t(\mathbf{p}) \mathcal{P}^*(\mathbf{p}, t) - \mathbf{D}_t^*(\mathbf{p}) \mathcal{P}(\mathbf{p}, t)] + \mathbf{V}(\mathbf{p}) (N_c(\mathbf{p}, t) - N_v(\mathbf{p}, t)) \right\}. \quad (23)$$

В уравнении (23) первое слагаемое описывает ГВГ, возникающую в результате рекомбинации ускоренных электронно-дырочных пар. Второй член — это внутризонный ток, который обусловлен внутризонными высшими гармониками и генерируется в результате независимого движения частиц в своих соответствующих зонах. Мы изучаем многофотонный режим, поэтому вклад обоих механизмов существен. Полный ток может быть получен суммированием по ζ :

$$g_x = g_{1,x} + g_{-1,x}, \quad (24)$$

$$g_y = g_{1,y} + g_{-1,y}. \quad (25)$$

Ниже мы исследуем нелинейный отклик двухслойного графена в процессе ГВГ под действием лазерного поля в многофотонном режиме с параметром интенсивности $\chi \gtrsim 1$ и субТГц-частотами $\omega = 0.4\text{--}0.9$ мэВ/ħ.

3. ВЛИЯНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ТОПОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ НА ГВГ ПРИ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ ПЕРЕХОДЕ В ГРАФЕНОПОДОБНОЙ НАНОСТРУКТУРЕ

В этом разделе исследуем влияние изменения топологии поверхности Ферми на ГВГ при низкоэнер-

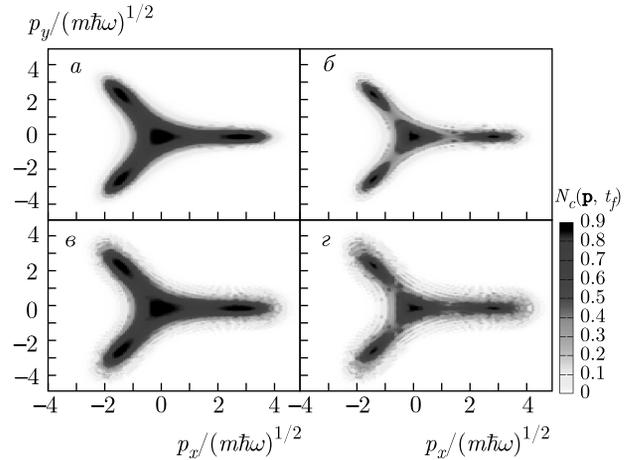


Рис. 1. (В цвете онлайн) Функция распределения частиц $N_c(\mathbf{p}, t_f)$ (в относительных единицах) после взаимодействия в момент $t = 40\pi/\omega$ в зависимости от безразмерных компонент импульса. Поле линейно поляризовано вдоль оси y . Представлено фотоиспускание при переходе Лифшица ($\hbar\omega = 0.9\mathcal{E}_L$) для высокой $\mathcal{E}_F = 1.4\mathcal{E}_L$ (а, в) и низкой $\mathcal{E}_F = 0.7\mathcal{E}_L \simeq \mu$ (б, д) энергий. Параметр $k_B T/\hbar\omega = 0.4$, безразмерный параметр интенсивности $\chi = 0.5$ (а, б) и $\chi = 1$ (в, д) для долины с индексом $\zeta = -1$

гетическом переходе в графеноподобной наноструктуре. Взаимодействие частицы с когерентной волной с низкой энергией фотона в ТГц- или субТГц-областях ($\hbar\omega \ll \mathcal{E}_L = 1$ мэВ, где \mathcal{E}_L — энергия Лифшица), характеризуется безразмерным параметром интенсивности χ [16]:

$$\chi = eE_0 v_3 / \hbar\omega^2. \quad (26)$$

Среднюю интенсивность волны [30] можно представить как

$$I_\chi = \chi^2 \cdot 1.96 \cdot 10^{13} \text{ Вт/см}^2 (\hbar\omega/\text{эВ})^4.$$

Параметр интенсивности χ имеет порядок единицы для многофотонного процесса ГВГ. В частности, для фотонов с энергиями 0.4–0.9 мэВ режим многофотонного взаимодействия может быть реализован при интенсивностях $I_\chi = 1\text{--}10^2$ Вт/см². Отметим, что современные фотонные ТГц- и субТГц-источники (с энергиями 0.4–1.24 мэВ) включают квантовые каскадные лазеры [55, 56].

На примере двухслойного графена, рассмотрим нелинейный отклик графеноподобной наноструктуры в процессе ГВГ при многофотонном возбуждении при переходе Лифшица. Система уравнений (16)–(18) аналитически не решается. Для численно-

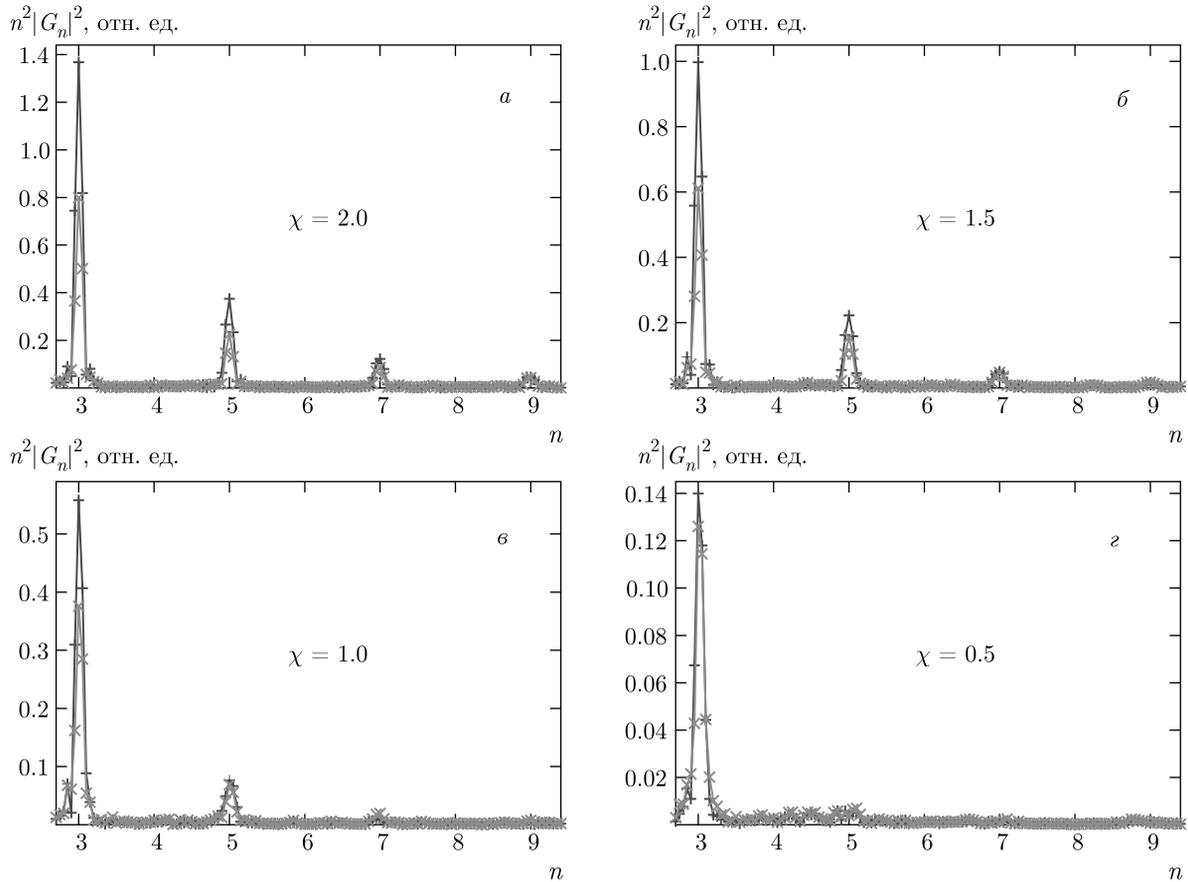


Рис. 2. (В цвете онлайн) Вероятности испускания гармоник в двухслойном графене при переходе Лифшица в зависимости от номера гармоники для разных параметров интенсивности χ и энергий Ферми $\mathcal{E}_F = 0.7\mathcal{E}_L$ (косые крестики) и $\mathcal{E}_F = 1.4\mathcal{E}_L$ (прямые крестики). Параметр $k_B T / \hbar\omega = 0.4$. Волна накачки с энергией фотона $\hbar\omega = 0.9\mathcal{E}_L$ линейно поляризована

го решения выполнено стандартное преобразование и замена переменных на новые, t и

$$\tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{p} - \mathbf{p}_E(t), \quad \mathbf{p}_E(t) = -e \int_0^t \mathbf{E}(t') dt',$$

где $\mathbf{p}_E(t)$ — классический импульс, переданный волновым полем. Преобразуем уравнения с частными производными в обыкновенные. Интегрирование уравнений (16)–(18) выполняется на однородной сетке из 10^4 точек $(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y)$ со стандартным алгоритмом Рунге–Кутты четвертого порядка. В качестве максимального импульса принято значение $\tilde{p}_{max} / \sqrt{m\hbar\omega} = 5$. Скорость релаксации $\Gamma(\mu, T)$ определяется формулой (15).

Нелинейное возбуждение моря Ферми показано на рис. 1 при переходе Лифшица ($\hbar\omega = 0.9\mathcal{E}_L$) при параметрах интенсивности $\chi = 0.5$ и $\chi = 1$. Функция распределения частиц $N_c(\mathbf{p}, t_f)$ после воздей-

ствия импульса длительностью $T_p \approx 90$ пс показана при высокой ($\mathcal{E}_F = 1.4\mathcal{E}_L$) и низкой ($\mathcal{E}_F = 0.7\mathcal{E}_L$) энергиях Ферми. Предполагается, что волна накачки линейно поляризована вдоль оси y . Как видно из рис. 1б,г для $\mathcal{E}_F < \mathcal{E}_L$ и $\hbar\omega < \mathcal{E}_L$ две соприкасающиеся параболы преобразуются в четыре отдельных «кармана». Итак, возбужденные искаженные изолинии дают возможность оценить значение $\mathcal{E}_F \simeq \mu$ в случае фотона низкой энергии $\hbar\omega = 0.7\mathcal{E}_L$.

Отметим, что при параметре интенсивности $\chi > 1$ количество изолиний увеличивается. Отчетливо видно многофотонное и сильноанизотропное возбуждение моря Ферми–Дирака вдали от точек Дирака. В частности, линии возбуждения искривлены в направлении вектора поляризации волны. Это указывает на то, что созданные пары частица–дырка ускоряются в волновом поле. Таким образом, при исследовании спектра излучения представляют интерес высшие порядки гармоник. Проясняются

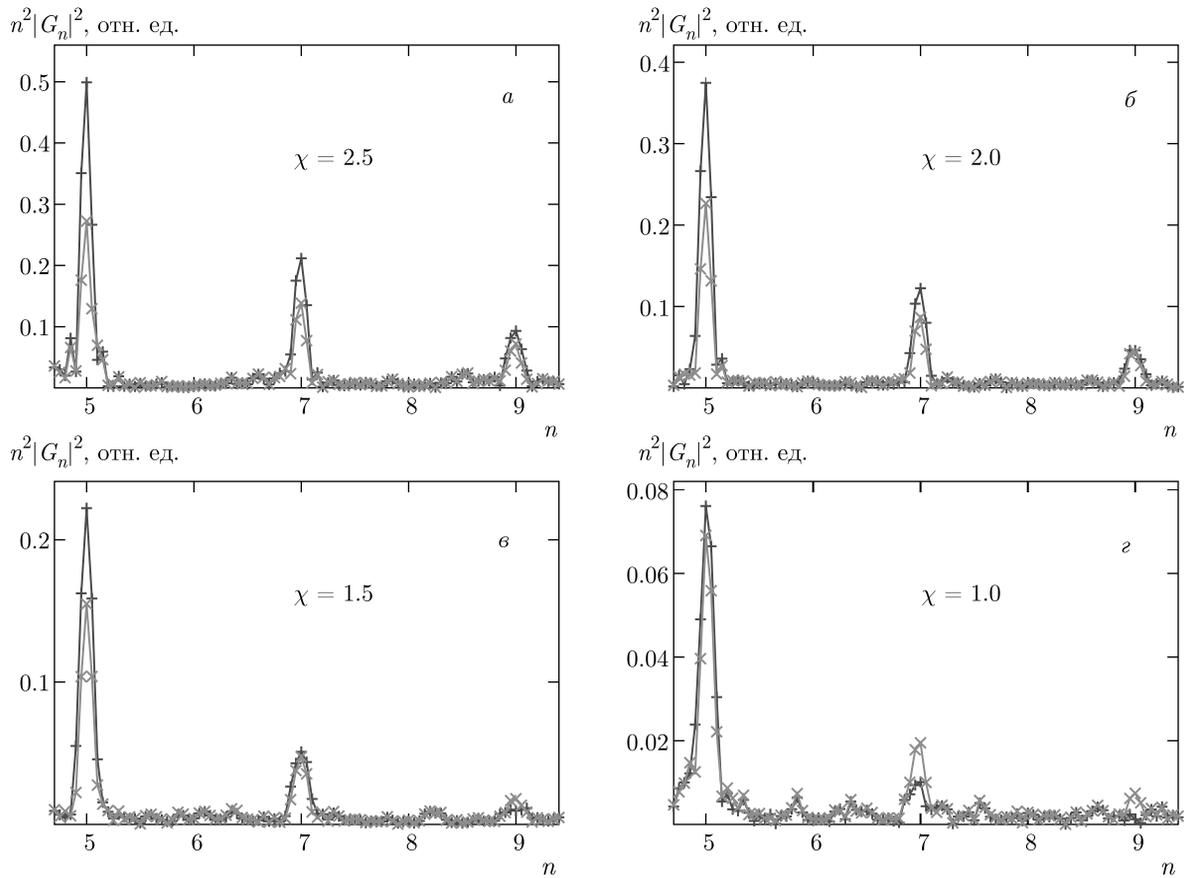


Рис. 3. (В цвете онлайн) Вероятности испускания высших гармоник в двухслойном графене при переходе Лифшица в зависимости от номера гармоники показана для разных параметров интенсивности χ и энергий Ферми $\mathcal{E}_F = 0.7\mathcal{E}_L$ (косые крестики) и $\mathcal{E}_F = 1.4\mathcal{E}_L$ (прямые крестики). Остальные параметры как на рис. 2

предположения о температурной зависимости возбуждения моря Ферми – Дирака. Вероятность ГВГ для рассмотренных случаев слабо зависит от температуры: возбужденные изолинии слегка размываются с повышением температуры.

Будем характеризовать вероятность испускания n -й гармоники безразмерным нормированным составляющим плотности тока $g_{x,y}$ (24), (25), определенным как

$$\frac{g_{x,y}}{j_0} = G_{x,y} \left(\omega t, \chi, \gamma, \frac{\mathcal{E}_L}{\hbar\omega}, \frac{k_B T}{\hbar\omega}, \frac{\mu}{\hbar\omega} \right), \quad (27)$$

где

$$j_0 = \frac{e\omega}{\pi^2} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad (28)$$

а G_x и G_y являются безразмерными периодическими (для монохроматических волн) функциями, которые зависят от параметра интенсивности χ , энергии Лифшица \mathcal{E}_L , энергии Ферми $\mathcal{E}_F \simeq \mu$ и температуры образца. Таким образом, используя ре-

шения уравнений (16)–(18) и проведя интегрирование в уравнении (23), можно вычислить спектры излучения гармоник с помощью преобразования Фурье функции $G_{x,y}(t)$. Вероятность испускания n -й гармоники пропорциональна $n^2|g_n|^2$, где $|g_n|^2 = |g_{xn}|^2 + |g_{yn}|^2$ и g_{xn}, g_{yn} – компоненты Фурье индуцированного полем полного тока. Чтобы найти g_n , был использован алгоритм быстрого преобразования Фурье. Для всех графиков мы использовали нормированную плотность тока (27).

На рис. 2 показаны зависимости вероятности испускания гармоник от их номера для различных параметров интенсивности. Как видно на этом рисунке, с увеличением интенсивности волны накачки гармоники выше третьего порядка становятся одинаково существенными.

Чтобы показать различия поведения высших гармоник, на рис. 3 мы построили только высшие гармоники при параметре интенсивности $\chi > 1$. Как видно, существуют качественные различия для ве-

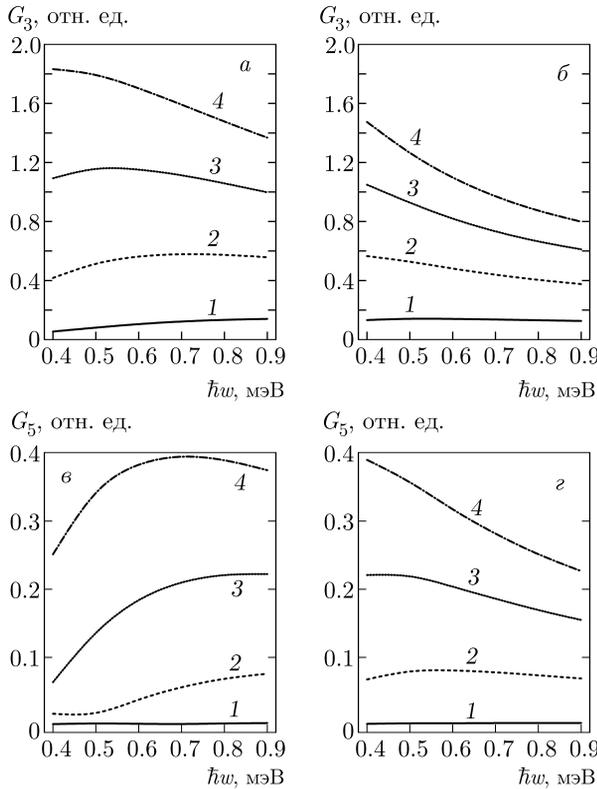


Рис. 4. Вероятности испускания третьей G_3 и пятой G_5 гармоник в зависимости от энергии фотона $\hbar\omega$ для параметров интенсивности $\chi = 0.5$ (кривые 1), 1.0 (2), 1.5 (3), 2.0 (4). Параметр $k_B T/\hbar\omega = 0.4$. Волна накачки линейно поляризована. Энергия Ферми $\mathcal{E}_F = 1.4\mathcal{E}_L$ (а, в) и $\mathcal{E}_F = 0.7\mathcal{E}_L$ (б, г)

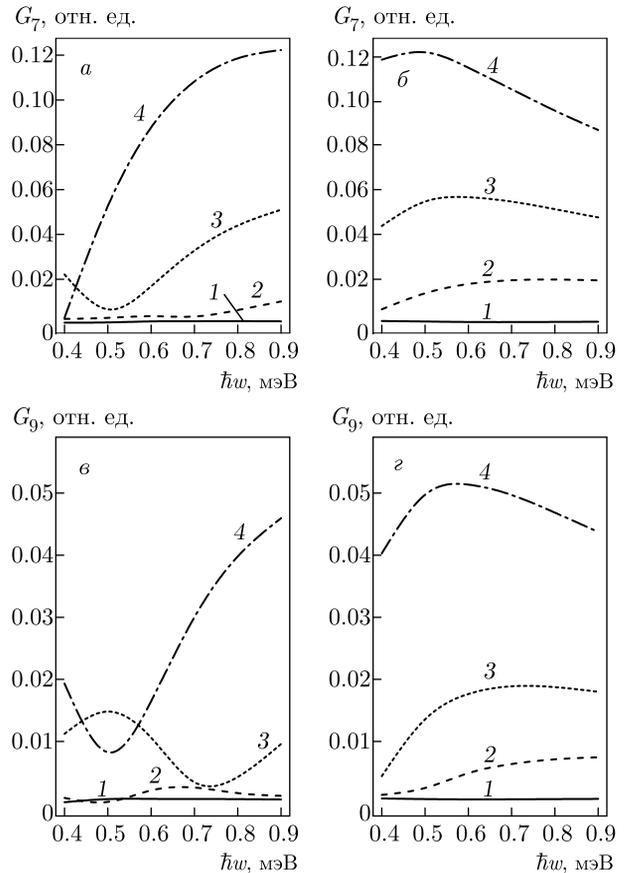


Рис. 5. То же, что и на рис. 4, для вероятностей испускания гармоник седьмого G_7 и девятого G_9 порядков

роятностей испускания $G_n = n^2|g_n|^2$ в зависимости от порядка n . Функции G_7, G_9 имеют более выраженные нелинейные свойства в сильном поле волны.

Вероятность испускания G_n высших гармоник в зависимости от частоты волны накачки для различных интенсивностей волны, определяемых параметром χ , продемонстрирована на рис. 4 и 5 для $\mathcal{E}_F > \mathcal{E}_L$ и $\mathcal{E}_F < \mathcal{E}_L$. Графики показывают, что для обоих случаев в области низкоэнергетических переходов Лифшица в сильной волне ($\chi > 1$) вероятности испускания G_3, G_5 достигают насыщения с ростом интенсивности волны накачки. Но более высокие гармоники 7 и 9 при $\mathcal{E}_F > \mathcal{E}_L$ и $\mathcal{E}_F < \mathcal{E}_L$ с увеличением интенсивности волны ведут себя по-разному. На рис. 6, 7 показаны зависимости вероятности испускания гармоник высшего порядка от интенсивности волны накачки в двухслойном графене. В результате, как видно на рис. 4–7, меняя топологию Ферми и используя ее влияние на ГВГ, можно определить энергию Ферми в графеноподобной на-

неструктуре. Надо отметить, что при найденных оптимальных параметрах вероятность испускания гармоник значительна при большей интенсивности для рассматриваемой частоты волны.

Чтобы продемонстрировать зависимость скорости излучения от энергии Ферми, на рис. 8 показаны зависимости вероятности испускания третьей G_3 , пятой G_5 , седьмой G_7 и девятой G_9 гармоник от энергии фотонов при фиксированной интенсивности волны накачки и температуре графена. В соответствии с результатами рис. 2–8 при ускорении и аннигиляции частиц или дырок, индуцированных волной накачки, в графеноподобной наноструктуре может быть получено интенсивное излучение высших гармоник при частоте волны накачки в субТГц-области. Таким образом, в сильной волне, определяемой параметром интенсивности χ , вероятности испускания высших гармоник различаются по величине для высоких $\mathcal{E}_F > \mathcal{E}_L$ и низких $\mathcal{E}_F < \mathcal{E}_L$ энергий Ферми. Это выявляет влияние топологии поверхности Ферми на ГВГ в графеноподобной наноструктуре. Как

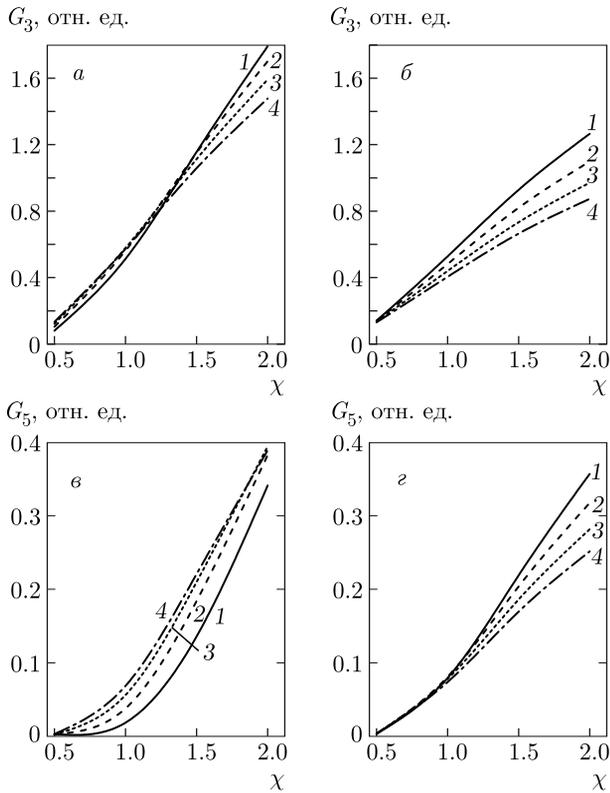


Рис. 6. Вероятности испускания гармоник третьего G_3 и пятого G_5 порядков в зависимости от параметра интенсивности χ показаны для энергий фотона $\hbar\omega = 0.5$ мэВ (кривые 1), 0.6 мэВ (кривые 2), 0.7 мэВ (кривые 3), 0.8 мэВ (кривые 4). Параметр $k_B T / \hbar\omega = 0.4$. Волна накачки линейно поляризована. Энергия Ферми $\mathcal{E}_F = 1.4\mathcal{E}_L$ (а, в) и $\mathcal{E}_F = 0.7\mathcal{E}_L$ (б, г)

и в случае аналогичных расчетов для интенсивной волны накачки, показано, что вероятность испускания слабо зависит от температуры при $k_B T < \hbar\omega$.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы представили метод исследования влияния топологии поверхности Ферми при ГВГ в графеноподобной наноструктуре на примере двухслойного сложенного АВ-графена. Во время перехода Лифшица происходит фрагментация односвязной линии Ферми на четыре отдельных участка. При этом энергия Ферми равна энергии перехода Лифшица. Итак, теоретическое исследование позволяет оценить энергию Ферми. Мы используем развитую ранее микроскопическую теорию нелинейного взаимодействия двухслойного графена с сильным полем когерентного излучения для случая низкоэнергетического фотона.

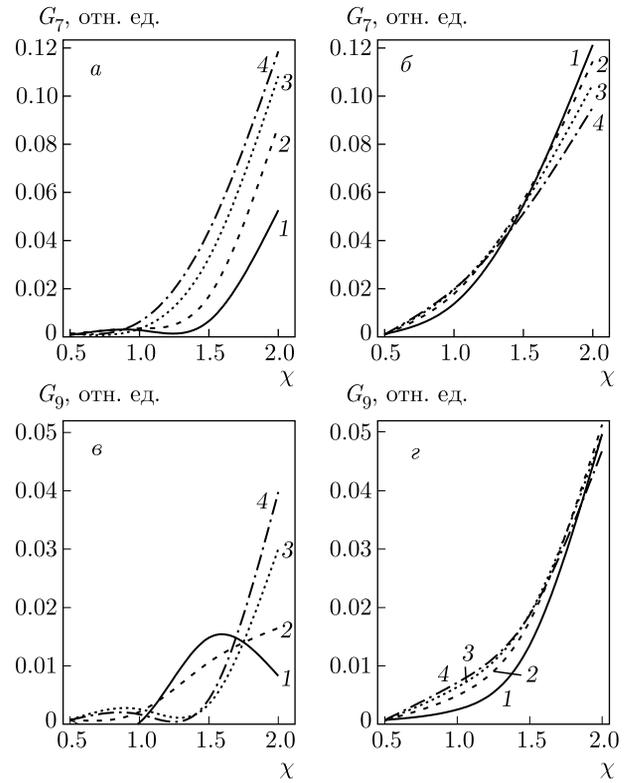


Рис. 7. То же, что на рис. 6, для вероятностей испускания гармоник седьмого G_7 и девятого G_9 порядков

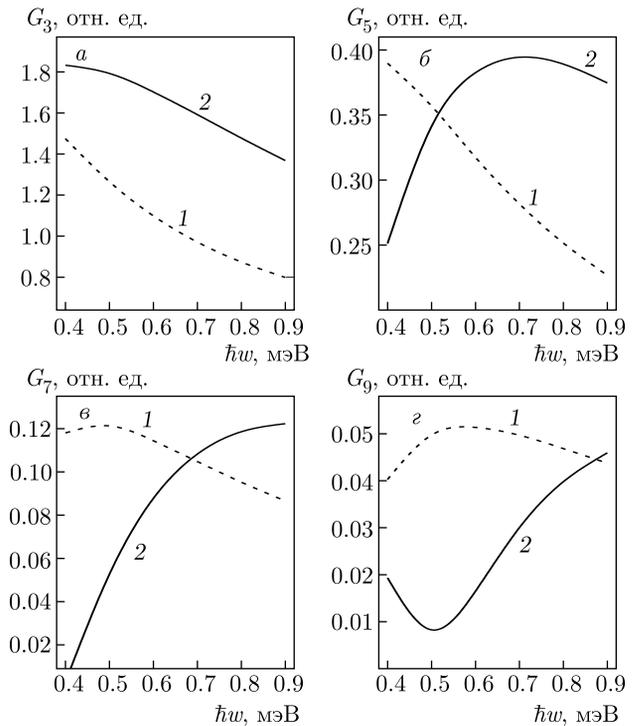


Рис. 8. Зависимости вероятностей испускания третьей G_3 , пятой G_5 , седьмой G_7 , девятой G_9 гармоник от энергии $\hbar\omega$ фотона для энергий Ферми $\mathcal{E}_F = 0.7\mathcal{E}_L$ (кривые 1), $\mathcal{E}_F = 1.4\mathcal{E}_L$ (2). Параметр $k_B T / \hbar\omega = 0.4$. Волна накачки с параметром интенсивности $\chi = 2$ поляризована линейно

Замкнутая система дифференциальных уравнений Лиувилля–фон Неймана для одночастичной матрицы плотности решается численно для переходов Лифшица в двухслойном графене. Для волны накачки взят субТГц-диапазон частот. Показано, что процесс ГВГ для фотонов субТГц-диапазона (длины волн от 0.3 до 1 мм) может наблюдаться уже при интенсивностях $I_\chi = 1\text{--}10^2$ Вт/см² при температуре образца $T < \hbar\omega$. Полученные результаты показывают, что высшие гармоники чувствительны к изменению топологии поверхности Ферми. Последнее может быть использовано для определения энергии Ферми в таких системах.

Благодарности. Выражаем признательность Г. К. Аветисяну за многочисленные обсуждения и постоянное внимание к работе.

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по науке Республики Армения в рамках научного проекта №20TTWS-1C010.

ЛИТЕРАТУРА

1. F. Mackenroth, N. Kumar, A. Di Piazza et al., Proc. SPIE **11039**, 1103902 (2019).
2. H. K. Avetissian, *Relativistic Nonlinear Electrodynamics, The QED Vacuum and Matter in Super-Strong Radiation Fields*, Springer (2016).
3. A. Di Piazza, C. Muller, K. Z. Hatsagortsyan et al., Rev. Mod. Phys. **84**, 1177 (2012).
4. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., Science **306**(5696), 666 (2004).
5. A. K. Geim, Science **324**, 1530 (2009).
6. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres et al., Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
7. F. Langer, M. Hohenleutner, C. P. Schmid et al., Nature **533**, 225 (2016).
8. O. Schubert, M. Hohenleutner, F. Langer et al., Nature Photon. **8**, 119 (2014).
9. G. Vampa, C. R. McDonald, G. Orlando et al., Phys. Rev. Lett. **113**, 073901 (2014).
10. G. Vampa, T. J. Hammond, N. Thir et al., Nature **522**, 462 (2015).
11. G. Ndabashimiye, Sh. Ghimire, M. Wu et al., Nature **534**, 520 (2016).
12. Sh. Ghimire and D. A. Reis, Nature Phys. **15**, 10 (2019).
13. Sh. Imai, A. Ono, and S. Ishihara, Phys. Rev. Lett. **124**, 157404 (2020).
14. S. A. Mikhailov and K. Ziegler, J. Phys.: Condens. Matter **20**, 384204 (2008).
15. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian et al., Phys. Rev. B **85**, 115443 (2012).
16. H. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, K. G. Batrakov et al., Phys. Rev. B **88**, 165411 (2013).
17. P. Bowlan, E. Martinez-Moreno, K. Reimann et al., Phys. Rev. B **89**, 041408(R) (2014).
18. I. Al-Naib, J. E. Sipe, and M. M. Dignam, Phys. Rev. B **90**, 245423 (2014).
19. H. K. Avetissian and G. F. Mkrtchian, Phys. Rev. B **94**, 045419 (2016).
20. H. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, G. F. Mkrtchian et al., J. Nanophoton. **11**, 016004 (2017).
21. L. A. Chizhova, F. Libisch, and J. Burgdorfer, Phys. Rev. B **95**, 085436 (2017).
22. D. Dimitrovski, L. B. Madsen, and T. G. Pedersen, Phys. Rev. B **95**, 035405 (2017).
23. N. Yoshikawa, T. Tamaya, and K. Tanaka, Science **356**, 736 (2017).
24. H. K. Avetissian and G. F. Mkrtchian, Phys. Rev. B **97**, 115454 (2018).
25. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, B. R. Avchyan et al., Phys. Rev. B **100**, 035434 (2019).
26. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan et al., J. Nanophoton. **14**, 026004 (2020).
27. A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, and Kh. V. Sedrakian, J. Nanophoton. **13**, 036010 (2019).
28. A. G. Ghazaryan, H. H. Matevosyan, and Kh. V. Sedrakian, J. Nanophoton. **14**, 046009 (2020).
29. H. K. Avetissian, B. R. Avchyan, G. F. Mkrtchian, and K. A. Sargsyan, J. Nanophoton. **14**, 026018 (2020).
30. H. K. Avetissian and G. F. Mkrtchian, Phys. Rev. B **99**, 085432 (2019).
31. G. L. Breton, A. Rubio, and N. Tancogne-Dejean, Phys. Rev. B **98**, 165308 (2018).
32. H. Liu, Y. Li, Y. S. You et al., Nature Phys. **13**, 262 (2017).

33. H. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, and K. Z. Hatsagortsyan, *Phys. Rev. Res.* **2**, 023072 (2020).
34. A. D. Güçlü, P. Potasz, M. Korkusinski, and P. Hawrylak, *Graphene Quantum Dots*, Springer-Verlag (2014).
35. Ch. Torre, *Introduction to Quantum Statistical Thermodynamics*, Springer (2015).
36. E. McCann and V. I. Fal'ko, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 086805 (2006).
37. I. M. Lifshitz, *ЖЭТФ* **38**, 1569 (1960) [*Sov. Phys. JETP* **11**, 1130 (1960)].
38. J. L. Manes, F. Guinea, and M. A. H. Vozmediano, *Phys. Rev. B* **75**, 155424 (2007).
39. G. P. Mikitik and Yu. V. Sharlai, *Phys. Rev. B* **77**, 113407 (2008).
40. D. S. L. Abergel and T. Chakraborty, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 062107 (2009).
41. E. S. Morell and L. E. F. F. Torres, *Phys. Rev. B* **86**, 125449 (2012).
42. J. J. Dean and H. M. van Driel, *Phys. Rev. B* **82**, 125411 (2010).
43. S. Wu, L. Mao, A. M. Jones et al., *Nano Lett.* **12**, 2032 (2012).
44. Y. S. Ang, S. Sultan, and C. Zhang, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 243110 (2010).
45. N. Kumar, J. Kumar, C. Gerstenkorn et al., *Phys. Rev. B* **87**, 121406 (2013).
46. E. V. Castro, K. S. Novoselov, S. V. Morozov et al., *Phys. Rev. Lett.* **99**, 216802 (2007).
47. J. B. Oostinga, H. B. Heersche, X. Liu et al., *Nature Mater.* **7**, 151 (2008).
48. Y. B. Zhang, T.-T. Tang, C. Girit et al., *Nature* **459**, 820 (2009).
49. F. Guinea, A. H. C. Neto, and N. M. R. Peres, *Phys. Rev. B* **73**, 245426 (2006).
50. M. Koshino and T. Ando, *Phys. Rev. B* **73**, 245403 (2006).
51. M. Lewenstein, Ph. Balcou, M. Yu. Ivanov et al., *Phys. Rev. A* **49**, 2117 (1994).
52. A. Varleta, M. Mucha-Kruczynski, D. Bischoff et al., *Synth. Met.* **210**, 19 (2015).
53. E. H. Hwang and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **77**, 115449 (2008).
54. J. K. Viljas and T. T. Heikkila, *Phys. Rev. B* **81**, 245404 (2010).
55. I. F. Akyildiz, J. M. Jornet, and C. Han, *Phys. Comm.* **12**, 16 (2014).
56. H. Vettikalladi, W. T. Sethi, A. F. Bin Abas et al., *Int. J. Anten. Propagat.* **2019**, 9573647:1 (2019).

ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВО ПРИТЯЖЕНИЕ АТОМОВ ВОДОРОДА

А. М. Ишханян^{a,b}, В. П. Крайнов^{c*}

^a Российско-Армянский университет
0051, Ереван, Армения

^b Институт физических исследований Национальной академии наук Армении
0203, Аштарак, Армения

^c Московский физико-технический институт
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 7 февраля 2021 г.,
после переработки 10 февраля 2021 г.
Принята к публикации 10 февраля 2021 г.

Найдена потенциальная энергия ван-дер-ваальсова притяжения атомов водорода друг к другу на расстояниях R порядка a_B/α , где a_B — боровский радиус, $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$ — постоянная тонкой структуры. Энергия зависит от R согласно закону R^{-6} на расстояниях $a_B \ll R \ll a_B/\alpha$ и закону R^{-7} на расстояниях $R \gg a_B/\alpha$.

DOI: 10.31857/S0044451021060000

1. ВВЕДЕНИЕ

Ван-дер-ваальсово притяжение между атомами и молекулами на расстояниях, больших по сравнению с размерами атомов и молекул, есть следствие различных электромагнитных сил между телами. Эти силы обусловлены как непосредственным взаимодействием зарядов, так и полем электромагнитного вакуума. Теория ван-дер-ваальсова притяжения детально описана в монографии [1]. В настоящей работе мы вычисляем потенциальную энергию ван-дер-ваальсова притяжения атомов водорода друг к другу на расстояниях R порядка a_B/α , где a_B — боровский радиус, $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$ — постоянная тонкой структуры. Энергия зависит от R как R^{-6} на расстояниях $a_B \ll R \ll a_B/\alpha$ и как R^{-7} на расстояниях $R \gg a_B/\alpha$.

Элемент новизны состоит в использовании точного аналитического выражения для динамической поляризуемости атома водорода в случае мнимой частоты на основе простых выражений (28), (29) (см. ниже) для сил осциллятора связанно-связанных и связанно-свободных переходов. Прежде всего это касается формулы (29) для связанно-свободных переходов, для которых ранее использовались разно-

образные приближения с той или иной степенью точности. Так, в работе [2] для описания переходной области использовалась приближенная модельная функция в виде арктангенса. В статье [3] для определения динамической поляризуемости атома водорода бралось приближенное разложение по степеням частоты (до восьмой степени включительно). Аналогично в статье [4] бесконечные сходящиеся ряды для динамической поляризуемости обрывались на определенном числе слагаемых. Модельные аппроксимации для динамической поляризуемости атома гелия рассматривались в работах [5, 6].

В случае $R \gg a_B/\alpha$ притяжение между атомами создается полем электромагнитного вакуума, которое приводит к поляризации атомов. Рассмотрим большой резонатор с идеально проводящими стенками. Сначала считаем, что в резонаторе имеется только один атом. Найдем изменение какой-то собственной частоты ω фотона вакуумного электромагнитного поля от внесения этого атома в резонатор. Уравнения Максвелла для напряженностей вакуумных полей на этой частоте в отсутствие атома имеют вид

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = \frac{i\omega}{c} \mathbf{H}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{H} = -\frac{i\omega}{c} \mathbf{E}. \quad (1)$$

При внесении первого атома появляется ток \mathbf{j}' , на малую величину меняется собственная частота ω и уравнения Максвелла приобретают вид

* E-mail: vpkrainov@mail.ru

$$\text{rot } \mathbf{E}' = \frac{i\omega'}{c} \mathbf{H}', \quad \text{rot } \mathbf{H}' = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}' - \frac{i\omega'}{c} \mathbf{E}'. \quad (2)$$

Умножая первое уравнение в (2) на \mathbf{H}^* , а второе уравнение на $-\mathbf{E}^*$, получим

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^* \text{rot } \mathbf{E}' &= \frac{i\omega'}{c} \mathbf{H}^* \cdot \mathbf{H}', \\ -\mathbf{E}^* \text{rot } \mathbf{H}' &= -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}' \cdot \mathbf{E}^* + \frac{i\omega'}{c} \mathbf{E}^* \cdot \mathbf{E}'. \end{aligned} \quad (3)$$

Умножая сопряженные к (1) уравнения: первое на \mathbf{H}' , а второе на $-\mathbf{E}'$, получим

$$\begin{aligned} \mathbf{H}' \text{rot } \mathbf{E}^* &= -\frac{i\omega}{c} \mathbf{H}' \cdot \mathbf{H}^*, \\ -\mathbf{E}' \text{rot } \mathbf{H}^* &= -\frac{i\omega}{c} \mathbf{E}' \cdot \mathbf{E}^*. \end{aligned} \quad (4)$$

Складывая почленно все уравнения (3) и (4), находим ($\delta\omega_1 = \omega' - \omega \ll \omega$)

$$\begin{aligned} \text{div} \{ [\mathbf{E}', \mathbf{H}^*] + [\mathbf{E}^*, \mathbf{H}'] \} = \\ = i \frac{\delta\omega_1}{c} (\mathbf{H}^* \cdot \mathbf{H}' + \mathbf{E}^* \cdot \mathbf{E}') - \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}' \cdot \mathbf{E}^*. \end{aligned} \quad (5)$$

Интегрируя (5) по всему объему резонатора и используя теорему Гаусса, получим, что левая часть (5) обращается в нуль из-за граничных условий для полей на идеально проводящих стенках резонатора. Следовательно,

$$i \delta\omega_1 \int (\mathbf{H}^* \cdot \mathbf{H}' + \mathbf{E}^* \cdot \mathbf{E}') dV = 4\pi \int \mathbf{j}' \cdot \mathbf{E}^* dV. \quad (6)$$

В левой части этого уравнения возмущенные поля можно заменить на невозмущенные, так как возмущение (атом) занимает ничтожно малую часть объема резонатора. Получаем

$$2i \delta\omega_1 \int |\mathbf{E}|^2 dV = 4\pi \int \mathbf{j}' \cdot \mathbf{E}^* dV. \quad (7)$$

А в правой части (6) интегрирование проводится по малому объему, в котором находится атом, и где вакуумное электрическое поле можно вынести за знак интеграла:

$$\begin{aligned} \int \mathbf{j}' \cdot \mathbf{E}^* dV &= \mathbf{E}^* \int \mathbf{j}' dV = \mathbf{E}^* \int \rho \mathbf{v}_1 dV = \\ &= \mathbf{E}^* \frac{\partial}{\partial t} \int \rho \mathbf{r}_1 dV = \mathbf{E}^* \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{d}_1 = \\ &= -i\omega E^* \mathbf{d}_1 = -i\omega \beta |\mathbf{E}|^2. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь β — поляризуемость атома водорода, которую, как мы увидим ниже, при $R \gg a_B/\alpha$ можно заменить на статическую, так как характерные энергии

фотонов $\hbar\omega$ электромагнитного вакуума, осуществляющих поляризацию, имеют порядок величины $\hbar\omega \propto \hbar c/R \ll Ry$. Здесь $Ry = me^4/\hbar^2 = 26.2$ эВ. Статическая поляризуемость атома водорода равна

$$\beta = \frac{9}{2} a_B^3 = 0.66 \text{ \AA}. \quad (9)$$

Из (7) и (8) получим сдвиг частоты из-за наличия первого атома в резонаторе в точке \mathbf{r}_1 [7]:

$$\frac{\delta\omega_1}{\omega} = -\frac{2\pi\beta |\mathbf{E}(\mathbf{r}_1)|^2}{\int |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2 dV}. \quad (10)$$

2. ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВО ПРИТЯЖЕНИЕ НА РАССТОЯНИЯХ $R \gg a_B/\alpha$

Для нахождения ван-дер-ваальсова притяжения на расстояниях $R \gg a_B/\alpha$ добавим в резонатор второй атом в точку \mathbf{r}_2 ; $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 = \mathbf{R}$. В (10) добавится индуцированная напряженность поля второго атома в точке первого атома: $\mathbf{E}(\mathbf{r}_1) \rightarrow \mathbf{E}(\mathbf{r}_1) + \mathbf{E}^{induced}(\mathbf{r}_1)$. Выделим из (10) сдвиг частоты, связанный только с взаимодействием атомов друг с другом:

$$\frac{\delta\omega}{\omega} = -\frac{4\pi\beta \text{Re}(\mathbf{E}^*(\mathbf{r}_1) \cdot \mathbf{E}^{induced}(\mathbf{r}_1))}{\int |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2 dV}. \quad (11)$$

Определим вещественную напряженность поля свободной стоячей электромагнитной волны в резонаторе

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= E_\omega \mathbf{e}_\lambda \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad k = \frac{\omega}{c}, \quad \mathbf{e}_\lambda \cdot \mathbf{k} = 0, \\ \lambda &= 1, 2, \quad |\mathbf{e}_\lambda| = 1. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь \mathbf{e}_λ — единичный вектор поляризации поперечного фотона. Второе решение $\sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ внесет нулевой вклад в (11), так как для него $\mathbf{E}(\mathbf{r}_1 = 0) = 0$.

Индукцированная вещественная напряженность электрического поля стоячей волны $\mathbf{E}^{induced}(\mathbf{r}_1)$ в резонаторе, создаваемая индуцированным дипольным моментом второго атома \mathbf{d}_2 в точке, где находится первый атом, определяется хорошо известным из теории поля выражением [8]:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{induced}(\mathbf{r}_1) &= \text{Re} \left\{ \left(-\frac{k^2}{R} - i\frac{3k}{R^2} + \frac{3}{R^3} \right) \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{d}_{2\omega}) + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{k^2}{R} + i\frac{k}{R^2} - \frac{1}{R^3} \right) \mathbf{d}_{2\omega} \right\} \exp(ikR). \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь $\mathbf{n} = \mathbf{R}/R$. Мы взяли произвольные расстояния, а не волновую зону; выше уже отмечалось,

что характерная величина $\omega R/c$ порядка единицы, несмотря на большие расстояния R . Дипольный момент равен

$$\mathbf{d}_{2\omega} = \beta \mathbf{E}(\mathbf{r}_2). \quad (14)$$

Из (11) находим энергию взаимодействия атомов как отрицательный сдвиг энергии основного состояния гармонического осциллятора $\hbar\omega/2$, просуммированный по всем положительным частотам (первый атом для определенности помещаем в начало координат):

$$U(R) = - \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \frac{2\pi \beta \hbar \omega (\mathbf{E}(0) \cdot \mathbf{E}^{induced}(0))}{\int |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2 dV}, \quad (15)$$

$$\sum_{\mathbf{k}} = V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad \omega > 0.$$

При этом, суммируя по двум поляризациям, можно, используя (12), вычислить знаменатель в (15):

$$\int |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2 dV = E_\omega^2 V. \quad (16)$$

Как и должно быть, нормировочный объем резонатора V сокращается в наблюдаемой величине потенциальной энергии. Из (15) видно, что величина E_ω также сокращается в выражении для $U(R)$. Поэтому ее дальше можно опустить.

В сферической системе координат с осью Z вдоль вектора \mathbf{R} обозначим угол между векторами \mathbf{R} и \mathbf{k} как ϑ . Переходим к вычислению числителя в (15). Имеем из (15)

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(0) \cdot \mathbf{E}^{induced}(0) &= \\ &= \beta \cos(k R \cos \vartheta) \operatorname{Re} \exp(i k R) \times \\ &\times \left\{ \left(-\frac{k^2}{R} - i \frac{3k}{R^2} + \frac{3}{R^3} \right) \sum_{\lambda=1,2} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_\lambda^*) (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_\lambda) + \right. \\ &\left. + \sum_{\lambda=1,2} \mathbf{e}_\lambda^* \cdot \mathbf{e}_\lambda \left(\frac{k^2}{R} + i \frac{k}{R^2} - \frac{1}{R^3} \right) \right\}. \quad (17) \end{aligned}$$

Для суммирования по поляризациям фотона в (17) используем формулу

$$\sum_{\lambda=1,2} e_{\lambda i} e_{\lambda j} = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}. \quad (18)$$

Тогда

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda=1,2} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_\lambda^*) (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_\lambda) &= n_i n_j e_{\lambda i}^* e_{\lambda j} = \\ &= n_i n_j \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) = 1 - \cos^2 \vartheta = \sin^2 \vartheta. \quad (19) \end{aligned}$$

Подставляя (17) и (19) в (15), находим (интегрирование идет только по положительным частотам, т. е. $k > 0$)

$$\begin{aligned} U(R) &= -\frac{\hbar \beta^2 c}{2\pi} \operatorname{Re} \int_0^\infty k^3 dk \exp(i k R) \times \\ &\times \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \cos(k R \cos \vartheta) \times \\ &\times \left\{ \left(-\frac{k^2}{R} - i \frac{3k}{R^2} + \frac{3}{R^3} \right) \sin^2 \vartheta + \right. \\ &\left. + 2 \left(\frac{k^2}{R} + i \frac{k}{R^2} - \frac{1}{R^3} \right) \right\}. \quad (20) \end{aligned}$$

Вычисляя элементарный интеграл по углу ϑ , получим

$$\begin{aligned} U(R) &= -\frac{\hbar \beta^2 c}{\pi R^7} \int_0^\infty dx \{ (2x^3 - 6x) \cos(2x) + \\ &+ (x^4 - 5x^2 + 3) \sin(2x) \}. \quad (21) \end{aligned}$$

При интегрировании учтем, что осциллирующие тригонометрические функции на бесконечности при усреднении дают нуль. Получаем известный результат [9]:

$$U(R) = -\frac{23 \hbar \beta^2 c}{4\pi R^7} = -\frac{1863}{16\pi \alpha} \left(\frac{a_B}{R} \right)^7 \operatorname{Ry}. \quad (22)$$

3. ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВО ПРИТЯЖЕНИЕ НА РАСТОЯНИЯХ $a_B \ll R \ll a_B/\alpha$

Теперь обратимся к меньшим расстояниям, $a_B \ll R \ll a_B/\alpha$. В этом случае нельзя выносить динамическую поляризуемость атома за знак интеграла и заменять ее на статическую. Перепишем выражение (21) в тождественном виде:

$$\begin{aligned} U(R) &= -\frac{\hbar c}{\pi R^7} \operatorname{Im} \int_0^\infty dx \beta^2(x) \exp(2ix) \times \\ &\times \{ (2ix^3 - 6ix) + (x^4 - 5x^2 + 3) \}. \quad (23) \end{aligned}$$

В выражении (23) сдвинем контур интегрирования на верхнюю половину мнимой оси, т. е. заменим $x = iz$. Получаем

$$\begin{aligned} U(R) &= -\frac{\hbar c}{\pi R^7} \int_0^\infty dz \beta^2(iz) \exp(-2z) \times \\ &\times \{ (2z^3 + 6z) + (z^4 + 5z^2 + 3) \}. \quad (24) \end{aligned}$$

При условии $R \ll a_B/\alpha$ в интеграле (24) существенны значения $z \ll 1$, так как этот интеграл обрывается быстрым убыванием поляризуемости $\beta^2(iz)$. Тогда интеграл существенно упрощается, так как в нем можно заменить экспоненту на единицу, а из пяти слагаемых оставить только последнее. Итак, заменяя $z = kR = \omega R/c$, находим

$$U(R) = -\frac{3\hbar c}{\pi R^7} \int_0^\infty dz \beta^2(iz) = -\frac{3\hbar}{\pi R^6} \int_0^\infty d\omega \beta^2(i\omega). \quad (25)$$

4. ДИНАМИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ АТОМА ВОДОРОДА

Динамическая поляризуемость атома водорода для мнимых значений частоты быстро убывает с увеличением частоты. Точное выражение для динамической поляризуемости имеет вид

$$\beta(i\omega) = \sum_{n=2}^\infty \frac{f_n}{\omega_{n1}^2 + \omega^2} + \int_0^\infty \frac{f_k}{\omega_{k1}^2 + \omega^2} dk. \quad (26)$$

Здесь определены частоты переходов

$$\omega_{n1} = \frac{1 - 1/n^2}{2}, \quad \omega_{k1} = \frac{1 + k^2}{2}$$

и силы осцилляторов для связанно-связанных f_n и связанно-свободных f_k дипольных переходов. Они удовлетворяют правилу сумм:

$$\sum_{n=2}^\infty f_n + \int_0^\infty f_k dk = 1. \quad (27)$$

Силы осцилляторов для переходов в связанные состояния атома водорода имеют вид [10]

$$f_n = \frac{2^8 n^5 (n-1)^{2n-4}}{3(n+1)^{2n+4}}. \quad (28)$$

Силы осцилляторов для переходов в свободные состояния атома водорода имеют вид, соответствующий известной формуле Штоббе для сечения фотоионизации основного состояния атома водорода [11, 12]:

$$f_k = \frac{2^8 k \exp\left(-\frac{4}{k} \arctg k\right)}{3(1+k^2)^4 \left(1 - \exp\left(-\frac{2\pi}{k}\right)\right)}. \quad (29)$$

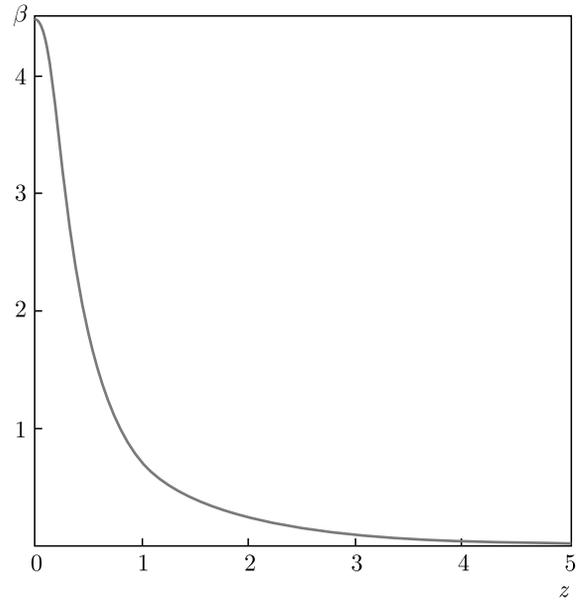


Рис. 1. Динамическая поляризуемость атома водорода (в единицах a_B^3) как функция безразмерной частоты $z = \hbar\omega/Ry$

В случае атома водорода первое слагаемое в (27) равно 0.565, а второе равно 0.435, так что роль переходов в свободные состояния сравнима с ролью переходов в связанные состояния. Что касается статической поляризуемости ($\omega = 0$), то первое слагаемое в (26), соответствующее связанно-связанным переходам, дает вклад, равный 3.66, а второе слагаемое, соответствующее связанно-свободным переходам, дает вклад, равный 0.84. В сумме они дают известное значение $9/2$.

На рис. 1 приведена динамическая поляризуемость атома водорода (в единицах a_B^3) как функция безразмерной мнимой частоты $z = \hbar\omega/Ry$, вычисленная по формуле (26). Подставляя (26) в (25) и вычисляя интеграл численно, находим известный результат [13] для потенциальной энергии на расстояниях $R \ll a_B/\alpha$:

$$U(R) = -6.50 \left(\frac{a_B}{R}\right)^6 Ry. \quad (30)$$

Численный коэффициент от переходов только в связанные состояния при этом составляет 4.0, так что вклад переходов в состояния непрерывного спектра также оказывается значительным.

5. ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВО ПРИТЯЖЕНИЕ НА ПРОМЕЖУТОЧНЫХ РАССТОЯНИЯХ $R \propto a_B/\alpha$

В общем случае $R \propto a_B/\alpha$ подставляем (26) в (24), используя силы осцилляторов (28) и (29). Ре-

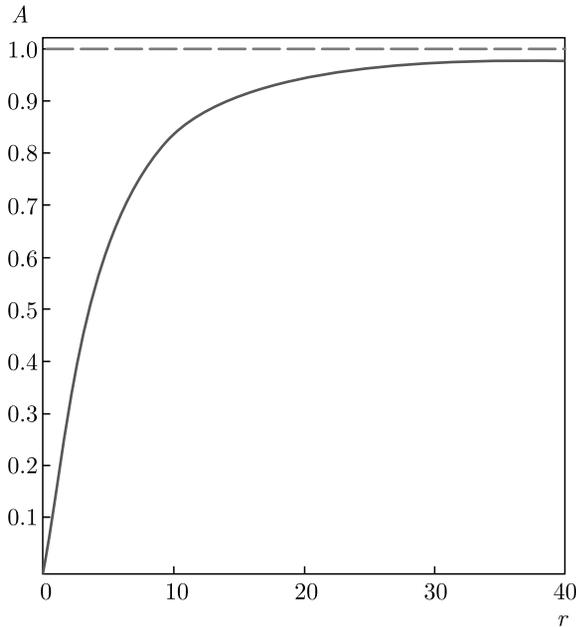


Рис. 2. Зависимость величины $A = -\frac{16 \pi U(R) R^7}{1863 c}$ от $r = R/c$ согласно (24)

зультаты численного расчета представлены на рис. 2 (далее используются атомные единицы). Приведен график зависимости величины $-\frac{16 \pi U(R) R^7}{1863 c}$ от R/c . При $R/c \gg 1$ эта зависимость стремится к постоянному значению, равному единице в соответствии с (22). В этом случае потенциальная энергия притяжения обратно пропорциональна седьмой степени расстояния между атомами. А при значениях $R/c \ll 1$ (но, разумеется, $R \gg 1$) получаем линейную функцию расстояния; она соответствует тому, что потенциальная энергия притяжения обратно пропорциональна шестой степени расстояния между атомами. Из рис. 2 видно, что переход от зависимости R^{-6} к зависимости R^{-7} при увеличении расстояния R между атомами водорода оказывается сильно затянутым.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, мы получили явное выражение для потенциальной энергии ван-дер-ваальсова притяжения атомов водорода друг к другу на расстояниях R порядка a_B/α . Как и должно быть, эта зависимость переходит в известный закон R^{-6} на расстояниях $a_B \ll R \ll a_B/\alpha$ и в известный закон R^{-7} на расстояниях $R \gg a_B/\alpha$. Отметим, что при увеличении расстояния R между атомами водорода переход от зависимости R^{-6} к зависимости R^{-7} происходит весьма медленно.

Благодарности. Авторы благодарят В. А. Астапенко и Ю. С. Бараша за ценные советы по содержанию работы.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-52-05012), Комитета по науке Армении (грант № 20RF-171) и Армянского национального фонда науки и образования (грант № PS-5701).

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю.С. Бараш, *Силы Ван-дер-Ваальса*, Наука, Москва (1988).
2. M. O'Carroll and J. Sucher, *Phys. Rev.* **187**, 85 (1969).
3. P. Getzin and M. Karplus, *J. Chem. Phys.* **53**, 2100 (1970).
4. P. W. Langhoff, *Chem. Phys. Lett.* **12**, 223 (1971).
5. M. J. Jamieson, G. W. F. Drake, and A. Dalgarno, *Phys. Rev. A* **51**, 3358 (1995).
6. Ming-Keh Chen and Kwong T. Chung, *Phys. Rev. A* **53**, 1439 (1996).
7. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Физматлит, Москва (2005).
8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*, Физматлит, Москва (2012).
9. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. Л. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Физматлит, Москва (2002).
10. В. А. Астапенко, *Взаимодействие излучения с атомами и наночастицами*, Изд-во «Интеллект», Долгопрудный (2010).
11. В. П. Крайнов, Б. М. Смирнов, *Излучательные переходы в атомной физике*, Высшая школа, Москва (1983).
12. V. Krainov and B. M. Smirnov, *Atomic and Molecular Radiative Processes with Applications to Modern Spectroscopy and the Greenhouse Effect*, Springer Ser. Atom., Opt. Plasma Phys., Vol. 108, Springer Nature Switzerland AG (2019).
13. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Физматлит, Москва (2004).

ПОСТРОЕНИЕ ТЕНЕЙ ЧЕРНЫХ ДЫР. АНАЛИТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ

*С. В. Чернов**

*Астрокосмический центр, Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
117997, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 31 декабря 2020 г.,
после переработки 31 декабря 2020 г.
Принята к публикации 26 января 2021 г.

Рассматриваются аналитические методы построения теней черных дыр в метрике Керра–Ньюмена и возможности их наблюдения с помощью радиоинтерферометрии со сверхдлинными базами (РСДБ).

DOI: 10.31857/S0044451021060031

1. ВВЕДЕНИЕ

Благодаря проекту «Телескоп горизонта событий» удалось наблюдать тень черной дыры у источника M87* [1–6], но наблюдение фотонных колец является более сложной задачей будущего [7]. Для ее решения необходимо, чтобы радиоинтерферометр имел достаточно большую базу (проекцию баз), которая превышает диаметр Земли (т. е. достаточно высокое угловое разрешение, порядка доли микросекунд) [7], высокую чувствительность приемного комплекса и большую базу численных экспериментов для моделирования фотонных колец и сопоставления данных теории и наблюдений. Одним из таких проектов, который способен решить данную задачу, является проект «Миллиметрон», который планируется запустить в 2030-х гг. [8].

Существует достаточно много свободного программного обеспечения, которое способно моделировать фотонные кольца магнитогидродинамических моделей. Эти программы решают уравнения изотропных геодезических численно (например, пакеты Raptor [9], Ipole [10, 11]) или полуаналитически (grtrans [12]). Все эти пакеты имеют как численные ошибки, так и неточности, связанные с тем, что наблюдатель расположен на конечном, относительно близком расстоянии от черной дыры ($R \approx 50R_g$). В данной работе уравнения изотропных геодезических решаются аналитически точно и строятся образы черных дыр для простейшего бесконечно тон-

кого диска. Такой подход более точно сопоставляет модельные и наблюдательные данные.

Интерферометрические наблюдения могут достаточно точно определить форму фотонного кольца [13], а это, в свою очередь, позволит более точно протестировать общую теорию относительности в сильном поле и определить параметр вращения черной дыры [14]. Существуют различные способы моделирования формы фотонных колец. В работе [15] форму фотонного кольца моделировали с помощью плоской кривой — улитка Паскаля (limaçon), в работе [13] — с помощью выпуклых овалов (phoval). Форма фотонных колец близко связана с формой критических кривых в гравитационном поле черной дыры, следовательно, точное моделирование фотонных колец поможет лучше понять физику вблизи черных дыр.

В разд. 2 выписываются точные аналитические решения уравнений изотропных геодезических в метрике Керра–Ньюмена и строятся образы черных дыр. В разд. 3 аналитически вычисляются функции видности для колец различной формы и интенсивности. В разд. 4 приводятся выводы.

В работе используется система единиц, в которой скорость света и гравитационная постоянная равны единице, $c = G = 1$. Размерность длины есть GM/c^2 , размерность времени — GM/c^3 , где M — масса черной дыры.

2. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ И ТОЧНЫЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ

Метрика вращающейся и заряженной черной дыры Керра–Ньюмена в координатах Бойера–Линдквиста (t, r, θ, ϕ) имеет вид [16]

* E-mail: chernov@lpi.ru

$$ds^2 = - \left(1 - \frac{2Mr - Q^2}{\Sigma} \right) dt^2 + \frac{\Sigma}{\Delta} dr^2 + \Sigma d\theta^2 + \frac{\sin^2 \theta}{\Sigma} ((r^2 + a^2)^2 - \Delta a^2 \sin^2 \theta) d\phi^2 - \frac{2a \sin^2 \theta (2Mr - Q^2)}{\Sigma} dt d\phi, \quad (1c)$$

где

$$\Sigma = r^2 + a^2 \cos^2 \theta, \quad \Delta = r^2 - 2Mr + a^2 + Q^2,$$

$J = Ma$ — угловой момент черной дыры. Корни уравнения

$$\Delta = (r - r_1)(r - r_2) = 0$$

соответствуют внешнему и внутреннему горизонталам событий

$$r_{1,2} = M \pm \sqrt{M^2 - a^2 - Q^2}.$$

В данной работе предполагается, что параметр вращения и заряд черной дыры ограничены неравенством $0 < a^2 + Q^2 < M^2$. Экстремальная черная дыра соответствует случаю, когда $a^2 + Q^2 \rightarrow M^2$. Случаю не вращающейся и не заряженной черной дыры отвечают пределы $a \rightarrow 0$ и $Q \rightarrow 0$ соответственно. Метрические коэффициенты и символы Кристоффеля выписаны в Приложении А.

Траектория фотонов в метрике Керра–Ньюмена описывается тремя интегралами движения. Это полная энергия на бесконечности $E = -p_t$, угловой момент вокруг вращающейся оси черной дыры $L = p_\phi$ и постоянная Картера

$$Q_c = p_\theta^2 - \cos^2 \theta \left(a^2 p_t^2 - \frac{p_\phi^2}{\sin^2 \theta} \right),$$

где p^μ обозначает 4-импульс фотона. Четвертое уравнение получается из условия равенства нулю массы фотона, $g_{\alpha\beta} p^\alpha p^\beta = 0$. Оказывается, что интегралы движения не зависят от модуля величины полной энергии, а зависят только от знака E . Поэтому удобно ввести две новые величины, от которых зависит траектория движения фотона:

$$\lambda = \frac{L}{E}, \quad \eta = \frac{Q_c}{E^2}.$$

Тогда компоненты 4-импульса фотона записываются в виде

$$\frac{\Sigma}{E} p^t = \frac{r^2 + a^2}{\Delta} (r^2 + a^2 - a\lambda) - a^2 \sin^2 \theta + a\lambda, \quad (1a)$$

$$\frac{\Sigma}{E} p^r = \pm_r \sqrt{R}, \quad (1b)$$

$$\frac{\Sigma}{E} p^\theta = \pm_\theta \sqrt{\Theta}, \quad (1c)$$

$$\frac{\Sigma}{E} p^\phi = \frac{a}{\Delta} (r^2 + a^2 - a\lambda) + \frac{\lambda}{\sin^2 \theta} - a, \quad (1d)$$

где были введены радиальный и угловой потенциалы

$$R = (r^2 + a^2 - a\lambda)^2 - \Delta(\eta + (a - \lambda)^2),$$

$$\Theta = \eta + a^2 \cos^2 \theta - \lambda^2 \frac{\cos^2 \theta}{\sin^2 \theta}.$$

Символы \pm_r и \pm_θ означают знаки импульсов фотона p^r и p^θ соответственно. Траектория движения фотона в плоскости r – θ определяется точками остановки в радиальном и угловом потенциалах. Поэтому удобно представить потенциалы в виде

$$R = (r - r_a)(r - r_b)(r - r_c)(r - r_d),$$

где корни уравнения расположены в следующем порядке: $r_a > r_b > r_c > r_d$, и

$$\Theta = a^2 \frac{(u_+ - u)(u - u_-)}{1 - u},$$

где введено обозначение $u = \cos^2 \theta$ и

$$u_\pm = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\eta + \lambda^2}{a^2} \right) \pm \sqrt{\frac{1}{4} \left(1 - \frac{\eta + \lambda^2}{a^2} \right)^2 + \frac{\eta}{a^2}}.$$

Уравнение радиального потенциала является алгебраическим уравнением четвертой степени, решение которого можно выписать аналитически (см. Приложение В). Уравнение углового потенциала является алгебраическим уравнением второго порядка относительно u , решение которого имеет вид

$$u = u_\pm, \quad \theta_\pm = \arccos(\mp \sqrt{u_\pm}),$$

где $\theta_+ > \theta_-$.

Если ввести аффинный параметр τ ,

$$\frac{dx^\mu}{d\tau} = \frac{\Sigma}{E} p^\mu,$$

то уравнения (1) переписутся в дифференциальном виде. Нас будет интересовать интегральная форма этих уравнений. Последовательно выражая аффинный параметр из каждого уравнения, легко получить интегральную форму вида [17, 18]

$$I_r = G_\theta, \quad (2a)$$

$$\phi_o - \phi_s = I_\phi + \lambda G_\phi, \quad (2b)$$

$$t_o - t_s = I_t + a^2 G_t, \quad (2c)$$

где интегралы равны

$$I_r = \int_{r_s}^{r_o} \frac{dr}{\pm r \sqrt{R}}, \quad G_\theta = \int_{\theta_s}^{\theta_o} \frac{d\theta}{\pm \theta \sqrt{\Theta}},$$

$$I_\phi = \int_{r_s}^{r_o} \frac{a(2Mr - Q^2 - a\lambda)}{\pm r \Delta \sqrt{R}} dr,$$

$$I_t = \int_{r_s}^{r_o} \frac{(r^2 \Delta + (2Mr - Q^2)(r^2 + a^2 - a\lambda)) dr}{\pm r \Delta \sqrt{R}},$$

$$G_\phi = \int_{r_s}^{r_o} \frac{d\theta}{\pm \theta \sin^2 \theta \sqrt{\Theta}}, \quad G_t = \int_{\theta_s}^{\theta_o} \frac{\cos^2 \theta d\theta}{\pm \theta \sqrt{\Theta}},$$

а обозначения «s» и «o» означают положение источника излучения и наблюдателя соответственно. Все эти интегралы легко взять в явном виде. Для этого представим интеграл I как сумму двух интегралов

$$I = \int_{r_s}^{r_o} \square dr = \int_{r_a}^{r_o} \square dr + w \int_{r_a}^{r_s} \square dr,$$

где $w = \pm 1$. Если траектория фотона имеет точку остановки в радиальном потенциале, то $w = 1$, если точка остановки совпадает с источником излучения $r_s = r_a$, то $w = 0$, если точка остановки отсутствует, то $w = -1$.

В Приложении С показаны способы разложения интегралов I в табличные и представлены значения этих табличных интегралов. Здесь выпишем явные решения для интегралов I . Явные решения для интегралов G представлены в работе [17]. Решения имеют вид

$$I_r = \frac{2(F(\nu_o, k) + wF(\nu_s, k))}{\sqrt{(r_a - r_c)(r_b - r_d)}}, \quad (3)$$

$$I_\phi = ga \sum_{i=1}^2 \Gamma_i \left[(1 - \beta_i^2) (\Pi(\nu_o, \gamma_i^2, k) + w\Pi(\nu_s, \gamma_i^2, k)) + \beta_i^2 (F(\nu_o, k) + wF(\nu_s, k)) \right], \quad (4)$$

$$G_\theta = \frac{1}{\sqrt{-a^2 u_-}} \left[2mK \left(\frac{u_+}{u_-} \right) - (\pm_s) F \left(\arcsin \left(\frac{\cos \theta_s}{\sqrt{u_+}} \right), \frac{u_+}{u_-} \right) + (\pm_o) F \left(\arcsin \left(\frac{\cos \theta_o}{\sqrt{u_+}} \right), \frac{u_+}{u_-} \right) \right], \quad (5)$$

$$G_\phi = \frac{1}{\sqrt{-a^2 u_-}} \left[2m\Pi \left(u_+, \frac{u_+}{u_-} \right) - (\pm_s) \Pi \left(u_+, \arcsin \left(\frac{\cos \theta_s}{\sqrt{u_+}} \right), \frac{u_+}{u_-} \right) + (\pm_o) \Pi \left(u_+, \arcsin \left(\frac{\cos \theta_o}{\sqrt{u_+}} \right), \frac{u_+}{u_-} \right) \right], \quad (6)$$

$$G_t = -\frac{2u_+}{\sqrt{-a^2 u_-}} \left[2mE' \left(\frac{u_+}{u_-} \right) - (\pm_s) E' \left(\arcsin \left(\frac{\cos \theta_s}{\sqrt{u_+}} \right), \frac{u_+}{u_-} \right) + (\pm_o) E' \left(\arcsin \left(\frac{\cos \theta_o}{\sqrt{u_+}} \right), \frac{u_+}{u_-} \right) \right], \quad (7)$$

где $\nu_{o,s} = \nu(r = r_{o,s})$, m – число точек остановок в угловом потенциале, $(\pm_s) = (\pm_o)(-1)^m$ [17], $(\pm_o = \text{sign}(\theta_o))$. Значение интеграла I_t имеет более сложный вид:

$$I_t = (4M^2 - Q^2)I_r + gr_a^2 \frac{\alpha_1^4}{\alpha^4} \times \left[V_0(\nu_o) + 2\frac{\alpha^2 - \alpha_1^2}{\alpha_1^2} V_1(\nu_o) + \frac{(\alpha^2 - \alpha_1^2)^2}{\alpha_1^4} V_2(\nu_o) \right] + wgr_a^2 \frac{\alpha^4}{\alpha^4} \left[V_0(\nu_s) + 2\frac{\alpha^2 - \alpha_1^2}{\alpha_1^2} V_1(\nu_s) + \frac{(\alpha^2 - \alpha_1^2)^2}{\alpha_1^4} V_2(\nu_s) \right] + \sum_{i=1}^2 \frac{gA_i}{r_a - r_i} \left[(1 - \beta_i^2) (\Pi(\nu_o, \gamma_i^2, k) + w\Pi(\nu_s, \gamma_i^2, k)) + \beta_i^2 (F(\nu_o, k) + wF(\nu_s, k)) \right] + 2Mg \left[(r_a - r_b) (\Pi(\nu_o, \delta, k) + w\Pi(\nu_s, \delta, k)) + r_b (F(\nu_o, k) + wF(\nu_s, k)) \right]. \quad (8)$$

Решения (3)–(8) полностью аналитически описывают траекторию фотона в метрике Керра – Ньюмена. Для построения тени черной дыры удобно воспользоваться параметрами (α, β) , впервые введенными в работе [19]. Считаем, что наблюдатель расположен под некоторым углом θ_o к оси вращения черной дыры в диапазоне $\theta_o \in (0, \pi/2)$. Запишем параметры (α, β) в виде

$$\alpha = -\frac{\lambda}{\sin \theta_o}, \quad \beta = \pm_o \sqrt{\eta + a^2 \cos^2 \theta_o - \lambda^2 \frac{\cos^2 \theta_o}{\sin^2 \theta_o}}.$$

Для построения тени черной дыры нам достаточно воспользоваться только решением уравнения (2а). Из этого уравнения можно вывести радиус источника через радиус наблюдателя r_o и углы источника θ_s и наблюдателя θ_o

$$r_s = \frac{r_a(r_b - r_d) - r_b(r_a - r_d) \operatorname{sn}^2 \left(\frac{1}{2} \sqrt{(r_a - r_c)(r_b - r_d)} I_r - F(\nu_o, q) | k \right)}{r_b - r_d - (r_a - r_d) \operatorname{sn}^2 \left(\frac{1}{2} \sqrt{(r_a - r_c)(r_b - r_d)} I_r - F(\nu_o, q) | k \right)}, \tag{9}$$

где sn — эллиптический синус Якоби. Для построения образа воспользуемся методом обратной трассировки лучей. Будем запускать лучи от наблюдателя к источнику. Пусть источником излучения является бесконечно тонкий диск, расположенный в экваториальной плоскости вращения черной дыры с внутренним радиусом $r_{in} = 6$. Тогда $\theta_s = \pi/2$. Наблюдатель расположен на расстоянии $r_o = 10^{10}$ под углом $\theta_o = 17^\circ$, что приблизительно соответствует источнику M87*. Для каждого значения параметров α и β вычисляем положение источника r_s и сравниваем с положением внутреннего радиуса диска $r_s \geq r_{in}$, таким образом определяем образ диска (черной дыры) в картинной плоскости наблюдателя. На рис. 1 показан пример образа черной дыры Керра–Ньюмена, полученный по аналитическим формулам (3) и (5) для параметров черной дыры, равных $a = 0.9$, $Q = 0.3$. На рис. 1 показана тень черной дыры, первое фотонное кольцо и второе подкольцо (subring). Из-за того, что внутренний радиус диска $r_{in} = 6$ близок к фотонной сфере, происходит наложение образа диска и первого фотонного кольца.

Для построения распределения угла ϕ в картинной плоскости наблюдателя надо воспользоваться решениями уравнений (2а) и (2b). Определяя радиус (9) и подставляя в (4), с помощью (2b) определяем распределения угла ϕ . На рис. 2 цветом показан график распределения угла ϕ , нормированный на угол 2π , в картинной плоскости.

Таким же образом можно найти образ распределения времени t в картинной плоскости. Для этого надо воспользоваться решениями уравнений (2а) и (2с).

3. ФУНКЦИЯ ВИДНОСТИ

В этом разделе рассмотрим наблюдательное проявление колец посредством функции видности и представим точные аналитические решения проявления колец с неоднородной плотностью и конечной толщиной.

Комплексная функция видности V двух элементов интерферометра является фурье-образом распределения интенсивности сигнала на небе I и определяется формулой [20]

$$V(\mathbf{u}) = \int I(\mathbf{x}) e^{-2\pi i \mathbf{u} \cdot \mathbf{x}} d^2x,$$

где u — безразмерная проекция базы интерферометра в единицах длин волн, x — безразмерный размер образа в радианах. Если ввести полярные координаты $\mathbf{x} = (\rho, \phi_\rho)$ и $\mathbf{u} = (u, \phi_u)$, то функция видности переписывается в виде

$$V(u, \phi_u) = \iint I(\rho, \phi_\rho) e^{-2\pi i u \rho \cos(\phi_\rho - \phi_u)} \rho d\rho d\phi_\rho.$$

Если интенсивность кольца образа черной дыры описывается бесконечно тонким кольцом с однородной интенсивностью

$$I(\rho, \phi_\rho) = \frac{1}{\pi d} \delta \left(\rho - \frac{d}{2} \right),$$

то функция видности имеет простой вид [7] (в Приложении D выписаны табличные интегралы, которые использовались при вычислении интегралов в этом разделе)

$$V(u, \phi_u) = J_0(\pi du), \tag{10}$$

где d — диаметр кольца, J_0 — функция Бесселя. Если фотонное кольцо имеет конечную толщину, то для конечного кольца с однородной интенсивностью

$$I(\rho, \phi_\rho) = \frac{1}{\pi dw}$$

получаем функцию видности

$$\begin{aligned} V(u) &= \int_a^b \int_0^{2\pi} e^{-2\pi i u \rho \cos(\phi_\rho - \phi_u)} \frac{\rho d\rho d\phi_\rho}{\pi dw} = \\ &= \frac{2}{dw} \int_a^b \rho J_0(2\pi \rho u) d\rho = \\ &= \frac{1}{\pi dwu} \left(bJ_1(2\pi bu) - aJ_1(2\pi au) \right), \tag{11} \end{aligned}$$

где a, b — соответственно внутренний и внешний радиус кольца, $d = a + b$ — средний диаметр кольца, $w = b - a$ — толщина кольца. При $a \rightarrow b$ решение (11) сводится к решению (10). Для конечного неоднородного кольца, интенсивность которого растет линейно с увеличением радиуса,

$$I(\rho, \phi_\rho) = \frac{1}{\pi dw} \left(\frac{\rho}{a} - 1 \right),$$

получаем функцию видности

$$\begin{aligned} V(u) &= \int_a^b \frac{2\rho}{dw} \left(\frac{\rho}{a} - 1 \right) J_0(2\pi u \rho) d\rho = \\ &= \frac{1}{4dw\pi u} \left[4b \left(\frac{b}{a} - 1 \right) J_1(2\pi ub) + \right. \\ &+ \frac{b}{au} (J_0(2\pi bu)H_1(2\pi ub) - J_1(2\pi ub)H_0(2\pi ub)) - \\ &- \frac{a}{au} (J_0(2\pi au)H_1(2\pi ua) - \\ &\left. - J_1(2\pi ua)H_0(2\pi ua)) \right]. \quad (12) \end{aligned}$$

Для конечного неоднородного кольца, интенсивность которого зависит параболически от радиуса,

$$I(\rho, \phi_\rho) = \frac{1}{\pi dw} \left(1 - \left(\frac{2}{b-a} \right)^2 \left(\rho - \frac{a+b}{2} \right)^2 \right),$$

получаем более громоздкое решение:

$$\begin{aligned} V(u) &= \frac{2}{dw} \int_a^b \left(1 - \left(\frac{2}{b-a} \right)^2 \left(\rho - \frac{a+b}{2} \right)^2 \right) \times \\ &\times \rho J_0(2\pi u \rho) d\rho = \frac{4}{dw^3} \left[\frac{b}{(2\pi u)^3} (-8\pi bu J_0(2\pi bu) + \right. \\ &+ 8J_1(2\pi bu) - 2d\pi^2 u J_1(2\pi bu)H_0(2\pi bu) + \\ &+ 2d\pi^2 u J_0(2\pi bu)H_1(2\pi bu)) - \frac{a}{(2\pi u)^3} \times \\ &(-8\pi au J_0(2\pi au) + 8J_1(2\pi au) - \\ &- 2d\pi^2 u J_1(2\pi au)H_0(2\pi au) + \\ &\left. + 2d\pi^2 u J_0(2\pi au)H_1(2\pi au)) \right]. \quad (13) \end{aligned}$$

Для конечного анизотропного кольца, интенсивность которого зависит от угла ϕ_ρ ,

$$I(\rho, \phi_\rho) = \frac{\sin \phi_\rho}{2dw},$$

функция видности равна

$$\begin{aligned} V(u) &= \int_a^b \int_0^{2\pi} \sin \phi_\rho e^{-2\pi i \rho u \cos(\phi_\rho - \phi_u)} \frac{\rho d\rho d\phi_\rho}{2dw} = \\ &= -\frac{i\pi \sin \phi_u}{dw} \int_a^b \rho J_1(2\pi \rho u) d\rho = \\ &= \frac{\pi i \sin \phi_u}{4u dw} \left[a(J_1(2\pi ua)H_0(2\pi ua) - \right. \\ &- J_0(2\pi ua)H_1(2\pi ua)) - b(J_1(2\pi ub)H_0(2\pi ub) - \\ &\left. - J_0(2\pi ub)H_1(2\pi ub)) \right]. \quad (14) \end{aligned}$$

Данная функция видности является мнимой. Это означает, что фаза функции видности равна $\pi/2$. Амплитуда функции видности равна модулю от выражения (14).

На рис. 3 показаны модуль функции видности для рассмотренных колец в зависимости от проекции баз интерферометра в единицах миллиард длин волн (Гл). Синяя кривая соответствует бесконечно тонкому кольцу, зеленая кривая — однородному кольцу с конечной толщиной, красная кривая — неоднородному кольцу, интенсивность которого растет линейно с увеличением радиуса, и черная кривая — неоднородному кольцу, интенсивность которого зависит параболически от радиуса. На данном рисунке толщина кольца равна $w = 2\mu\text{ас}$ (микросекунд дуги), а диаметр $d = 34\mu\text{ас}$. Все кривые нормированы на единицу функции видности $V = 1$ при нулевых проекциях баз $u = 0$. Наибольшую скорость уменьшения функции видности в зависимости от проекции баз имеет неоднородное кольцо с параболическим профилем изменения интенсивности. Для того чтобы разрешить однородное кольцо, проекция баз интерферометра должна быть больше обратной толщины, $u > 1/w$ [7]. Для толщины $w = 2\mu\text{ас}$ это соответствует проекциям базы $u > 100\text{Гл}$. При условиях $u \gg 1/w$ наблюдается периодичность функции видности V с периодом $1/w$ и асимптотикой $V \sim 1/u^{3/2}$. Неоднородное кольцо с линейным ростом интенсивности имеет такую же асимптотику вида $V \sim 1/u^{3/2}$, но периодичность выражена не так ярко. Асимптотика функции видности неоднородного кольца, интенсивность которого зависит параболически от радиуса, имеет вид $V \sim 1/u^{5/2}$, т.е. функция видности убывает быстрее, и периодичность не проявляется.

На рис. 4 показана амплитуда двумерной функции видности в зависимости от координат проекции баз (u, v) в единицах Гл. Функция видности не симметрична. Вдоль оси x она имеет нулевое значение ($\sin \phi_u = 0$).

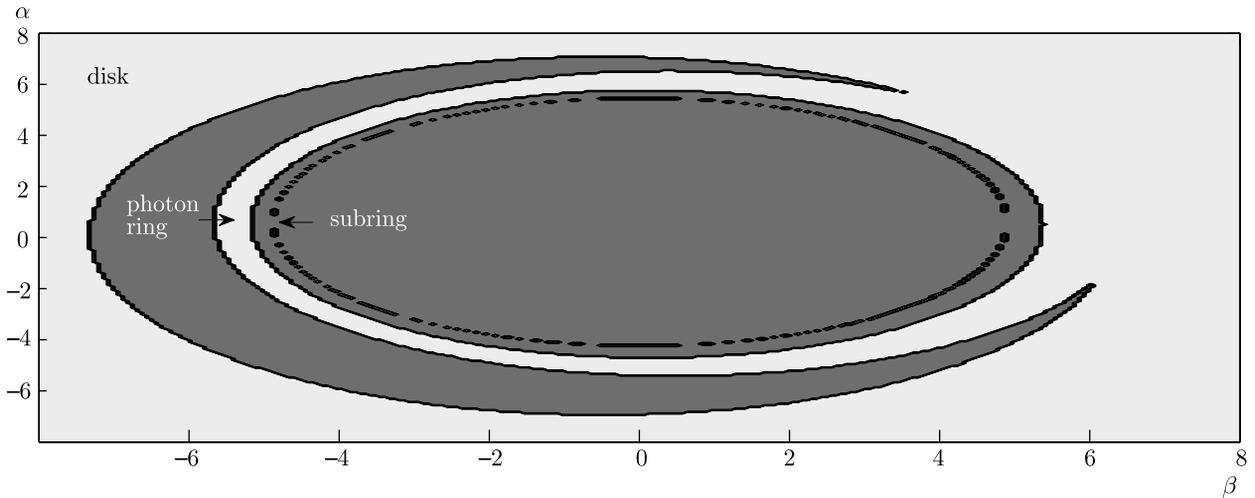


Рис. 1. Аналитический образ черной дыры, полученный по формулам (3) и (5), в зависимости от α и β

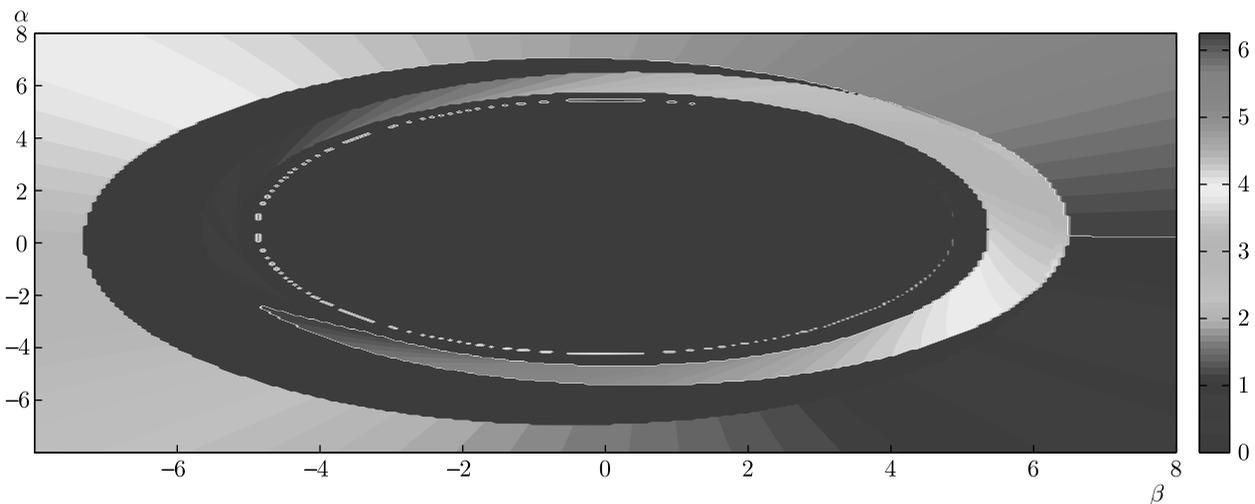


Рис. 2. (В цвете онлайн) Аналитический образ распределения угла ϕ в зависимости от параметров α , β , полученный по формулам (3)–(6)

Из сказанного выше можно сделать следующие выводы. Интерферометрическое проявление фотонных колец черных дыр зависит от степени неоднородности распределения интенсивности по ширине кольца. С увеличением неоднородности требуются более чувствительные детекторы, способные фиксировать функцию видности от фотонных колец.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассматривались аналитические методы построения образа черной дыры Керра–Ньюмена. Были выписаны точные аналитические

решения и в качестве примера построены образы и фотонные кольца бесконечно тонкого диска. Для простейшей формы образа кольца черной дыры были вычислены аналитически функции видности и была показана возможность детектирования колец черной дыры на базах $u > 1/w$, что соответствует расстоянию порядка расстояния от Земли до Луны и больше [7].

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-02-00469-а) и Государственного задания по научной программе ОКР «Миллиметр».

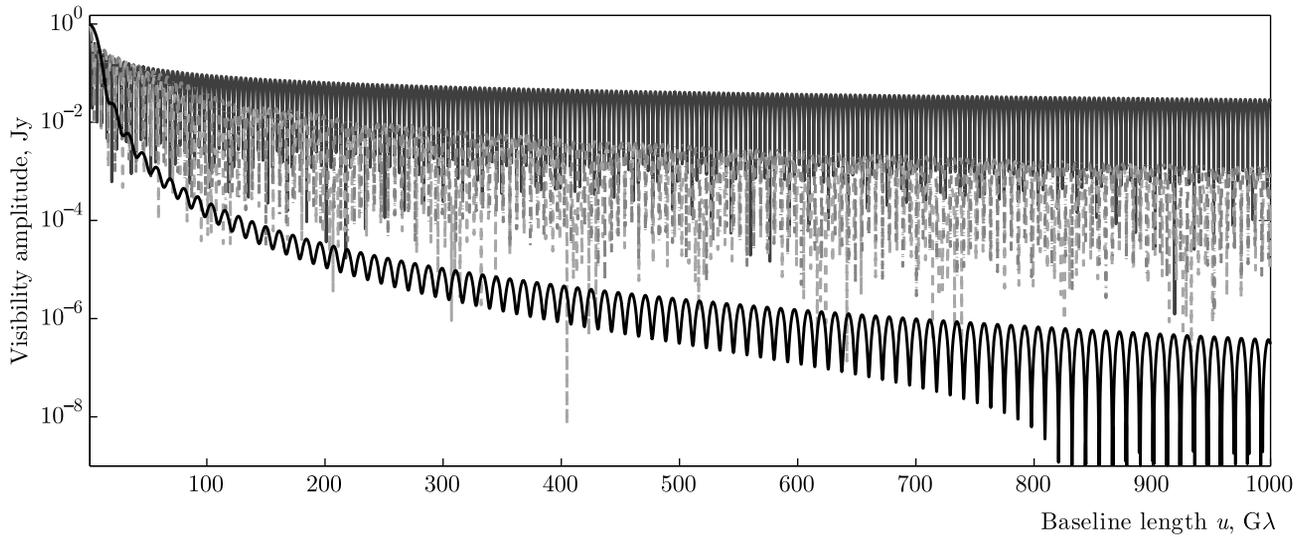


Рис. 3. (В цвете онлайн) Одномерные функции видности в зависимости от u

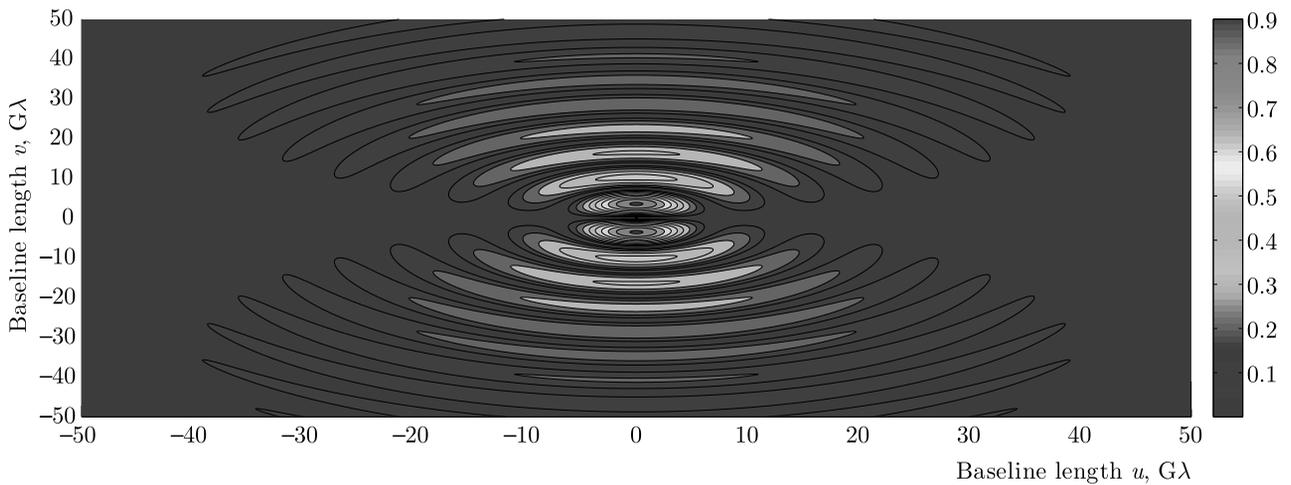


Рис. 4. (В цвете онлайн) Двумерная функция видности в зависимости от u, v для неоднородного анизотропного кольца

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Метрические коэффициенты метрики Керра–Ньюмена равны [16]

$$g_{tt} = - \left(1 - \frac{2Mr - Q^2}{\Sigma} \right), \quad g_{rr} = \frac{\Sigma}{\Delta}, \quad g_{\theta\theta} = \Sigma,$$

$$g_{\phi\phi} = \frac{\sin^2 \theta}{\Sigma} \left((r^2 + a^2)^2 - \Delta a^2 \sin^2 \theta \right),$$

$$g_{t\phi} = - \frac{(2Mr - Q^2)a \sin^2 \theta}{\Sigma}, \quad g^{\theta\theta} = \frac{1}{\Sigma},$$

$$g^{tt} = - \frac{(r^2 + a^2)^2 - \Delta a^2 \sin^2 \theta}{\Sigma \Delta}, \quad g^{rr} = \frac{\Delta}{\Sigma},$$

$$g^{\phi\phi} = \frac{\Delta - a^2 \sin^2 \theta}{\Delta \Sigma \sin^2 \theta}, \quad g^{t\phi} = - \frac{(2Mr - Q^2)a}{\Sigma \Delta}.$$

Определитель метрики равен [16]

$$g = -\Sigma^2 \sin^2 \theta.$$

Символы Кристоффеля равны [16]

$$\Gamma_{tr}^t = -\frac{pb}{\Delta}, \quad \Gamma_{r\phi}^t = \frac{a \sin^2 \theta}{\Delta} (pb + 2qr),$$

$$\Gamma_{\theta\phi}^t = -\frac{qa^3}{\Sigma} \sin^2 \theta \sin 2\theta, \quad \Gamma_{tt}^r = -\frac{\Delta p}{\Sigma},$$

$$\Gamma_{rr}^r = \frac{r}{\Sigma} + \frac{M-r}{\Delta}, \quad \Gamma_{r\theta}^r = -\frac{a^2 \sin 2\theta}{2\Sigma},$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{\theta\theta}^\theta &= -\frac{a^2 \sin 2\theta}{2\Sigma}, & \Gamma_{rr}^\theta &= \frac{a^2 \sin 2\theta}{2\Sigma\Delta}, \\ \Gamma_{\theta\theta}^r &= -\frac{r\Delta}{\Sigma}, & \Gamma_{r\theta}^\theta &= \frac{r}{\Sigma}, \\ \Gamma_{\phi\phi}^r &= -\frac{\Delta \sin^2 \theta}{\Sigma}(r + pa^2 \sin^2 \theta), & \Gamma_{t\theta}^t &= \frac{qa^2 \sin 2\theta}{\Sigma}, \\ \Gamma_{tt}^\theta &= \frac{qa^2 \sin 2\theta}{\Sigma^2}, & \Gamma_{t\phi}^r &= \frac{a\Delta p \sin^2 \theta}{\Sigma}, \\ \Gamma_{t\phi}^\theta &= -\frac{qab \sin 2\theta}{\Sigma^2}, & \Gamma_{t\theta}^\phi &= \frac{2qa \cos \theta}{\Sigma \sin \theta}, \\ \Gamma_{\phi\phi}^\theta &= -\frac{\sin 2\theta}{2\Sigma} \left[b - 2a^2 q \sin^2 \theta \left(2 + \frac{a^2 \sin^2 \theta}{\Sigma} \right) \right], \\ \Gamma_{r\phi}^\phi &= \frac{r}{\Delta} (1 + 2q) + a^2 p \frac{\sin^2 \theta}{\Delta}, \\ \Gamma_{\theta\phi}^\phi &= \frac{\cos \theta}{\Delta \sin \theta} \left[(1 + 2q)(b - 2qa^2 \sin^2 \theta) - \frac{2qa^2 b \sin^2 \theta}{\Sigma} \right], \\ \Gamma_{tr}^\phi &= -a \frac{rQ^2 + M(\Sigma - 2r^2)}{\Delta \Sigma^2}, \end{aligned}$$

где

$$b = r^2 + a^2, \quad p = \frac{rQ^2 + M(\Sigma - 2r^2)}{\Sigma^2}, \quad q = \frac{Q^2 - 2Mr}{2\Sigma}.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Выражение для радиального потенциала является алгебраическим уравнением четвертого порядка, которое удобно представить в виде [17]

$$R = (r - r_a)(r - r_b)(r - r_c)(r - r_d),$$

где корни уравнения записаны в порядке убывания, $r_a > r_b > r_c > r_d$. Явный вид решения этого уравнения записывается в виде [17]

$$\begin{aligned} r_a &= z + \sqrt{-\frac{A}{2} - z^2 - \frac{B}{4z}}, \\ r_b &= z - \sqrt{-\frac{A}{2} - z^2 - \frac{B}{4z}}, \\ r_c &= -z + \sqrt{-\frac{A}{2} - z^2 + \frac{B}{4z}}, \\ r_d &= -z - \sqrt{-\frac{A}{2} - z^2 + \frac{B}{4z}}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} A &= a^2 - \eta - \lambda^2, \\ B &= 2M(\eta + (\lambda - a)^2), \\ C &= -a^2\eta - Q^2(\eta + (a - \lambda)^2), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{P} &= -\frac{A^2}{12} - C, \\ \mathcal{Q} &= -\frac{A}{3} \left[\left(\frac{A}{6} \right)^2 - C \right] - \frac{B^2}{8}, \\ \omega_{\pm} &= \sqrt[3]{-\frac{\mathcal{Q}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\mathcal{P}}{3} \right)^3 + \left(\frac{\mathcal{Q}}{2} \right)^2}}, \\ z &= \sqrt{\frac{\omega_+ + \omega_-}{2} - \frac{A}{6}} > 0. \end{aligned}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ С

Неполные эллиптические интегралы первого, второго и третьего рода определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} F(\phi, k) &= \int_0^\phi \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k \sin^2 \theta}}, \\ E(\phi, k) &= \int_0^\phi \sqrt{1 - k \sin^2 \theta} d\theta, \\ \Pi(\alpha^2, \phi, k) &= \int_0^\phi \frac{1}{1 - \alpha^2 \sin^2 \theta} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k \sin^2 \theta}}. \end{aligned}$$

Производная эллиптического интеграла второго рода E по параметру k задается как

$$E'(\phi, k) = \frac{\partial E(\phi, k)}{\partial k} = \frac{E(\phi, k) - F(\phi, k)}{2k}.$$

Полные эллиптические интегралы определяются условием $\phi = \pi/2$ и обозначаются как

$$\begin{aligned} K(k) &= F(\pi/2, k), & E(k) &= E(\pi/2, k), \\ \Pi(n, k) &= \Pi(n, \pi/2, k). \end{aligned}$$

Введем обозначения

$$\begin{aligned} \nu &= \arcsin \sqrt{\frac{(r_b - r_d)(r - r_a)}{(r_a - r_d)(r - r_b)}}, & \alpha^2 &= \frac{r_a - r_d}{r_b - r_d}, \\ g &= \frac{2}{\sqrt{(r_a - r_c)(r_b - r_d)}}, & k &= \frac{(r_b - r_c)(r_a - r_d)}{(r_a - r_c)(r_b - r_d)}. \end{aligned}$$

Для вычисления интегралов I в работе использовались следующие табличные значения интегралов для случая, когда $r > r_a$. Данный интеграл вычисляется на с. 256 [21]:

$$\int_{r_a}^r \frac{dx}{\sqrt{(x - r_a)(x - r_b)(x - r_c)(x - r_d)}} = gF(\nu, k).$$

Этот интеграл вычисляется на с. 257 [21]:

$$\int_{r_a}^r \frac{x dx}{\sqrt{(x-r_a)(x-r_b)(x-r_c)(x-r_d)}} = g \left[(r_a - r_b) \Pi(\alpha^2, \nu, k) + r_b F(\nu, k) \right].$$

Этот интеграл вычисляется на с. 259 [21]:

$$\int_{r_a}^r \frac{dx}{(p-x)\sqrt{(x-r_a)(x-r_b)(x-r_c)(x-r_d)}} = \frac{g}{(p-r_a)(p-r_b)} \left[(r_a - r_b) \Pi\left(\alpha^2 \frac{p-r_b}{p-r_a}, \nu, k\right) + (p-r_a) F(\nu, k) \right].$$

Этот интеграл вычисляется на с. 130 [22]:

$$\int_{r_a}^r \frac{x^2 dx}{\sqrt{(x-r_a)(x-r_b)(x-r_c)(x-r_d)}} = gr_a^2 \int_0^{u_1} \frac{(1 - \alpha_1^2 \operatorname{sn}^2 u)^2}{(1 - \alpha^2 \operatorname{sn}^2 u)^2} du,$$

где

$$\operatorname{am} u_1 = \arcsin \sqrt{\frac{(r_b - r_d)(r - r_a)}{(r_a - r_d)(r - r_b)}}, \quad \alpha_1^2 = \frac{r_a - r_d}{r_b - r_d} \frac{r_b}{r_a}$$

и am обозначает амплитуду u_1 .

Данный интеграл вычисляется на с. 205 [22]:

$$\int \frac{(1 - \alpha_1^2 \operatorname{sn}^2 u)^2}{(1 - \alpha^2 \operatorname{sn}^2 u)^2} du = \frac{\alpha_1^4}{\alpha^4} \left[V_0 + 2 \frac{\alpha^2 - \alpha_1^2}{\alpha_1^2} V_1 + \frac{(\alpha^2 - \alpha_1^2)^2}{\alpha_1^4} V_2 \right],$$

где (см. с. 201 [22])

$$V_0 = \int du = F(\nu, k),$$

$$V_1 = \int \frac{du}{1 - \alpha^2 \operatorname{sn}^2 u} = \Pi(\alpha^2, \nu, k),$$

$$V_2 = \int \frac{du}{(1 - \alpha^2 \operatorname{sn}^2 u)^2} = \frac{1}{2(\alpha^2 - 1)(k - \alpha^2)} \left[\alpha^2 E(u) + (k - \alpha^2)u + (2\alpha^2 k + 2\alpha^2 - \alpha^4 - 3k) \Pi(\alpha^2, \nu, k) - \frac{\alpha^4 \operatorname{sn} u \operatorname{cn} u \operatorname{dn} u}{1 - \alpha^2 \operatorname{sn}^2 u} \right],$$

$\operatorname{sn} u$, $\operatorname{cn} u$ и $\operatorname{dn} u$ — эллиптические функции Якоби.

Интеграл I_ϕ легко представить в виде табличных интегралов. Для этого разложим I_ϕ как [23]

$$I_\phi = \int_{r_a}^r \frac{a(2rM - Q^2 - a\lambda)}{\Delta\sqrt{R}} dr = a \sum_{i=1}^{i=2} \int_{r_a}^r \frac{K_i dr}{(r - r_i)\sqrt{R}} = ga \sum_{i=1}^2 \Gamma_i \left[(1 - \beta_i^2) \Pi(\nu, \gamma_i^2, k) + \beta_i^2 F(\nu, k) \right],$$

где

$$\gamma_i^2 = \frac{r_a - r_d}{r_b - r_d} \frac{r_i - r_b}{r_i - r_a}, \quad \beta_i^2 = \frac{r_i - r_a}{r_i - r_b},$$

$$r_i = M + (-1)^{i+1} \sqrt{M^2 - a^2 - Q^2}, \quad \Gamma_i = \frac{K_i}{r_a - r_i},$$

$$K_i = M + (-1)^{i+1} \frac{M^2 - Q^2/2 - a\lambda/2}{\sqrt{M^2 - a^2 - Q^2}},$$

Аналогично представим интеграл I_t в виде табличных интегралов как

$$I_t = \int_{r_a}^r \left[\frac{A_1}{r - r_1} + \frac{A_2}{r - r_2} + 4M^2 - Q^2 + 2Mr + r^2 \right] \frac{dr}{\pm r\sqrt{R}},$$

где

$$A_1(r_1 - r_2) = (2Mr_1 - Q^2)(r_1^2 + a^2 - a\lambda),$$

$$A_2(r_1 - r_2) = -(2Mr_2 - Q^2)(r_2^2 + a^2 - a\lambda).$$

ПРИЛОЖЕНИЕ D

Для вычисления функции видности использовались следующие табличные значения интегралов. Для вычисления интеграла (10) использовался табличный интеграл

$$\int_0^{2\pi} e^{-2\pi i u \rho \cos(\phi_\rho - \phi_u)} d\phi_\rho = 2\pi J_0(2\pi u \rho).$$

Для вычисления интеграла (11)–(13), использовались табличные интегралы (с. 484 [24])

$$\int_0^z t J_0(ut) dt = \frac{z}{u} J_1(uz),$$

$$\int_0^z t^2 J_0(ut) dt =$$

$$= \frac{z}{2u^2} [2uzJ_1(uz) - \pi J_1(uz)H_0(uz) + \pi J_0(uz)H_1(uz)],$$

$$\int_0^z t^3 J_0(ut) dt = \frac{z^2}{u^2} (2J_2(uz) - uzJ_3(uz)) =$$

$$= \frac{z^2}{u^2} [uzJ_1(uz) - 2J_2(uz)] =$$

$$= \frac{z^2}{u^2} [uzJ_1(uz) - \frac{4}{uz}J_1(uz) + 2J_0(uz)],$$

где H — функция Струве. Для вычисления интеграла (14) использовался табличный интеграл

$$\frac{2u}{\pi} \int_0^x t J_1(ut) dt = x [J_1(ux)H_0(ux) - J_0(ux)H_1(ux)].$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Event Horizon Telescope Collaboration, *Astrophys. J. Lett.* **875**, L1 (2019).
2. Event Horizon Telescope Collaboration, *Astrophys. J. Lett.* **875**, L2 (2019).
3. Event Horizon Telescope Collaboration, *Astrophys. J. Lett.* **875**, L3 (2019).
4. Event Horizon Telescope Collaboration, *Astrophys. J. Lett.* **875**, L4 (2019).
5. Event Horizon Telescope Collaboration, *Astrophys. J. Lett.* **875**, L5 (2019).
6. Event Horizon Telescope Collaboration, *Astrophys. J. Lett.* **875**, L6 (2019).
7. M. D. Johnson et al., *Sci. Adv.* **6**, 1310 (2020).
8. Н. С. Кардашёв и др., *УФН* **184**, 1319 (2014).
9. T. Bronzwaer et al., *Astron. Astrophys.* **613**, 2 (2018).
10. M. Moscibrodzka and C. F. Gammie, *Month. Not. Roy. Astron. Soc.* **475**, 43 (2018).
11. S. C. Noble, P. K. Leung, C. F. Gammie, and L. G. Book, *Class. Quant. Grav.* **24**, 259 (2007).
12. J. Dexter, *Month. Not. Roy. Astron. Soc.* **462**, 115 (2016).
13. S. E. Gralla and A. Lupsasca, arXiv:2007.10336.
14. S. E. Gralla and A. Lupsasca, arXiv:2008.03879.
15. J. R. Farah, D. W. Pesce, M. D. Johnson, and L. L. Blackburn, *Astrophys. J.* **900**, 77 (2020).
16. Д. В. Гальцов, *Частицы и поля в окрестности черных дыр*, МГУ, Москва (1986).
17. S. E. Gralla and A. Lupsasca, *Phys. Rev. D* **101**, 044031 (2020).
18. S. E. Gralla, A. Lupsasca, *Phys. Rev. D* **101**, 044032 (2020).
19. C. T. Cunningham and J. M. Bardeen, *Astrophys. J.* **173**, L137 (1972).
20. A. R. Thompson, J. M. Moran, and G. W. J. George, *Interferometry and Synthesis in Radio Astronomy*, Springer (2017).
21. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Физматгиз, Москва (1963).
22. P. F. Byrd and M. D. Friedman, *Handbook of Elliptic Integrals for Engineers and Scientists*, Springer (1971).
23. S. E. Vázquez and E. P. Esteban, *Nuovo Cim. B* **119**, 489 (2004).
24. M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Nat. Bureau Stand. (1972).

МОДИФИКАЦИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ КВАЗИСВОБОДНОГО ГРАФЕНА ПРИ АДСОРБЦИИ И ИНТЕРКАЛЯЦИИ АТОМОВ Mn

А. А. Гогина^{a*}, А. Г. Рыбкин^a, А. М. Шижин^a, А. В. Тарасов^a,
Л. Петачча^{b**}, Г. Ди Санто^{b**}, И. А. Елисеев^c, С. П. Лебедев^c,
В. Ю. Давыдов^c, И. И. Климовский^a

^a Санкт-Петербургский государственный университет
199034, Санкт-Петербург, Россия

^b Elettra Sincrotrone Trieste
34149, Trieste, Italy

^c Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук
194021, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 20 октября 2020 г.,
после переработки 21 декабря 2020 г.
Принята к публикации 22 декабря 2020 г.

С использованием методов фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением экспериментально исследовано влияние интеркаляции атомов марганца на электронную структуру графена, сформированного на подложках Au/Co(0001)/W(110) и SiC(0001). Для обеих систем методом ультрафиолетовой фотоэлектронной спектроскопии получены дисперсионные зависимости π -состояний графена в \bar{K} -точке зоны Бриллюэна, на которых наблюдаются сдвиги конуса Дирака при интеркаляции атомов марганца и последующих прогревах систем. Методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии изучена структура приповерхностных слоев сформированных систем. Анализ линий остовных уровней указывает на возможность формирования тонкого слоя сплава Mn_2Au на границе графен–Mn–Au и квазидвумерного слоя Mn под графеном на подложке SiC. Подробное исследование графена на SiC методом спектроскопии комбинационного рассеяния света показало, что при интеркаляции такой системы атомами Mn буферный слой остается связанным с подложкой и не происходит его превращения в дополнительный слой графена. После интеркаляции наблюдается увеличение количества дефектов в кристаллической решетке графена.

DOI: 10.31857/S0044451021060043

1. ВВЕДЕНИЕ

Последние десятилетия ознаменовались открытием и активным изучением новых семейств двумерных (2D) структур, таких как графен (Gr) [1–3], h-BN [4] и другие. В частности, значительный интерес к исследованиям графена вызван наличием уникальной линейной дисперсии электронных π -состояний вблизи \bar{K} -точки зоны Бриллюэна, которая открывает возможности для его функционализации

и использования в электронике и спинтронике [5, 6]. Модифицировать зонную структуру графена можно за счет приведения его в контакт с различными материалами [7–22]. Наиболее интересным для применения в спинтронике является контакт графена с магнитными металлами, такими как Ni, Co, Fe, Mn [7–17], и с редкоземельными металлами, такими как Gd, Eu, Yb и Dy [18–20].

Как правило, взаимодействие между $2p_z$ -состояниями графена и d -состояниями металлической подложки приводит к сильной модификации электронной структуры по отношению к свободному графену и сдвигу энергетического π -состояния относительно уровня Ферми. Перекрывание электронных состояний

* E-mail: alevtina_gogina@mail.ru

** L. Petacca, G. Di Santo.

на границе раздела графена и ферромагнетиков, таких как Ni и Co, позволяет наблюдать индуцированную спиновую поляризацию π -состояний графена, что было показано в серии экспериментов для графена на Ni(111) и графена на Co(0001) [7, 10, 12]. В наших работах [10, 23] было показано, что интеркаляция тяжелых атомов Au приводит к аномально большому индуцированному спин-орбитальному расщеплению π -состояний графена и обусловлена гибридизацией π -состояний графена и d -состояний золота. Это явление может быть использовано для создания спин-поляризованных токов в графене.

В настоящее время активно развивается направление по исследованию магнитных 2D-материалов и гетероструктур [24–29]. Использование контакта таких материалов с графеном [10, 30] позволяет объединить уникальные свойства магнитных 2D-структур и графена. Открывается возможность для манипулирования магнетизмом на наноразмерном масштабе [31, 32] и возникновения квантового аномального эффекта Холла, предсказанного в ряде теоретических работ [33, 34]. Известно, что магнитные 2D-структуры можно создать, например, за счет интеркаляции различных магнитных атомов под графен и их взаимодействия с атомами подложки. Примером такого синтеза может служить образование тонкого слоя сплава Ni₃Mn на границе раздела Gr/Mn(111) [35]. В данной работе были проведены исследования модификации электронной структуры графена при интеркаляции атомами Mn на подложках Au/Co(0001)/W(110) и SiC(0001). Эксперимент включал в себя синтез систем с последующим исследованием электронных и структурных характеристик графена методами фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР), рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС), дифракции медленных электронов (ДМЭ) и спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС). В результате был продемонстрирован факт интеркаляции марганца под графен для системы Gr/Au/Co после прогрева до комнатной температуры и для системы Gr/SiC при отжиге при 550–600 °С. Также в работе была показана возможность формирования тонкого слоя сплава Mn₂Au на границе Gr–Mn–Au и квазидвумерного слоя Mn под графеном на подложке SiC.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ И МЕТОДЫ

Синтез графена на слое Co(0001) толщиной 80 Å на монокристалле W(110) проводился методом

осаждения из газовой фазы путем крекинга пропилена с прогревом образца примерно до 660 °С при давлении около 10⁻⁶ мбар в течение 15 мин. Далее проводились напыление атомов Au и последующие прогревы системы при температурах 450–600 °С, после чего золото интеркалировалось под графен.

Графен на SiC был сформирован методом термического отжига грани Si(0001) монокристалла SiC политапа 4H в атмосфере аргона при температуре 1800 °С [36].

Чистота поверхности и качество исследуемого графенового слоя контролировалось методом РФЭС.

Напыление атомов золота и марганца происходило *in-situ* в условиях сверхвысокого вакуума при помощи источника с использованием электронной бомбардировки. Контроль скорости напыления осуществлялся при помощи кварцевых микровесов и РФЭС.

Измерение ФЭСУР-спектров проводилось в сверхвысоком вакууме с давлением порядка 10⁻¹⁰ мбар на канале BaDElPh синхротрона Elettra (г. Триест) с использованием синхротронного излучения с энергией фотонов $h\nu = 34$ эВ. Измерения проводились с помощью анализатора с угловым разрешением SPECS Phoibos 150 с 2D-CCD-детектором [37].

Для определения структуры приповерхностных слоев системы был применен метод РФЭС с разрешением по углу. Измерения проводились на канале BaDElPh с использованием рентгеновской трубки с Mg-анодом, генерирующей излучение линии K α с энергией 1253.5 эВ, при углах эмиссии 20° и 55° (далее отмечены на рисунках соответственно как bulk и surface).

С целью оценки влияния фотоэлектронной дифракции на интенсивность линий основных уровней C1s и Mn2p были проведены теоретические расчеты для интерфейса графен/марганец с использованием программного кода EDAC [38], основанного на методе симуляции многократного электронного рассеяния в пределах кластера заданной атомной структуры. При моделировании углового распределения фотоэлектронной интенсивности были использованы структурные кластеры свободного графена и трех возможных конфигураций расположения графена на слое атомов марганца в структуре 1 × 1. При этом радиусы всех используемых кластеров были равны 17 Å и содержали около 350 атомов. В выбранных моделях были рассмотрены два возможных варианта расстояния между слоем марганца и графена: 2.65 Å (на основании исследова-

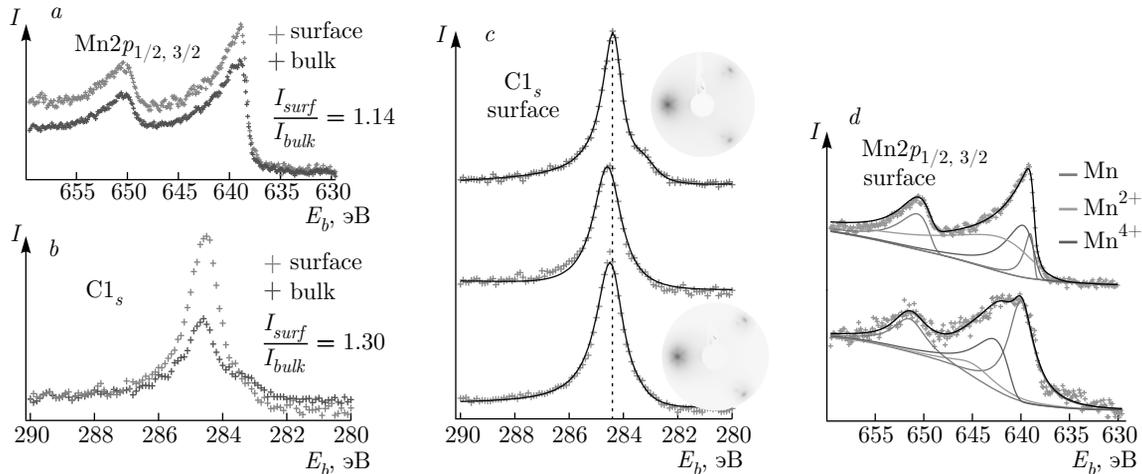


Рис. 1. (В цвете онлайн) РФЭС-спектры внутренних уровней $Mn2p_{1/2,3/2}$ (a) и $C1s$ (b) для системы Gr/Au/Co после напыления Mn при $T = 14$ К и прогрева до комнатной температуры, измеренные под разными углами эмиссии к нормали, а также РФЭС-спектры $C1s$ (c), полученные на разных этапах формирования системы: чистый образец Gr/Au/Co (верхний); система Gr/Au/Co после напыления атомов Mn и прогрева до комнатной температуры (центральный) и Gr/MnAu/Co после отжига системы ($550\text{--}560^\circ\text{C}$); рядом для начальной и конечной систем представлены картины ДМЭ, снятые при $E_k = 55$ эВ. Также изображены РФЭС-спектры $Mn2p_{1/2,3/2}$ для системы Gr/MnAu/Co (d) до отжига (верхний) и после отжига до $550\text{--}560^\circ\text{C}$ (нижний) с разложением на компоненты, которые отвечают атомам Mn с разными степенями окисления

ний методом сканирующей туннельной спектроскопии [16]) и 3.30 \AA (характерное для квазисвободного графена). В расчетах интенсивности фотоэлектронной дифракции были учтены параметры геометрии эксперимента, такие как естественная поляризация, угол захвата анализатора $\pm 8^\circ$, углы фотоэлектронной эмиссии вдоль направления $\overline{ГК}$ зоны Бриллюэна и т. д.

Исследование графена на SiC методом спектроскопии КРС проводилось в атмосферных условиях при комнатной температуре в геометрии «обратного рассеяния» на спектрометрической установке Horiba Jobin-Yvon T64000, оснащенной конфокальным оптическим микроскопом. Для возбуждения спектров КРС использовался твердотельный Nd:YAG-лазер с длиной волны излучения 532 нм; мощность лазерного излучения на пленке графена составляла примерно 4.0 мВт в пятне диаметром около 1 мкм, полученном с использованием объектива $100\times$ ($NA = 0.9$). Для оценки однородности структурных характеристик образца наряду с локальной диагностикой исследовалось несколько областей размером $10 \times 10 \text{ мкм}^2$ с последующим построением карт КРС различных параметров спектральных линий. Все спектры КРС графеновых пленок, приводимые в работе, получены после вычитания вклада спектра подложки 4H-SiC.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Электронная структура эпитаксиального графена на подложке кобальта после интеркаляции атомами Au и Mn

Сформированная система Gr/Au/Co представляет собой «сэндвич»-структуру, в которой наблюдаются эффекты поверхностного сплавления Au и Co с образованием петлевых дислокаций. В работе [10] демонстрируется формирование конуса Дирака в области точки \overline{K} с линейной зависимостью энергии π -состояний от волнового вектора и с точкой Дирака, локализованной выше уровня Ферми. Таким образом, электронная структура системы Gr/Au/Co оказывается подобной электронной структуре квазисвободного графена. Исследования спиновой структуры системы Gr/Au/Co показали, что влияние атомов ферромагнитного металла Co, находящихся под графеном, приводит к асимметричной спиновой структуре π -состояний.

На первом этапе изучения влияния атомов Mn на электронную структуру графена на поверхность системы Gr/Au/Co был нанесен слой атомов Mn толщиной около 3 \AA при $T = 14$ К, после чего образец прогревался до комнатной температуры и подвергался высокотемпературному отжигу до температур $550\text{--}560^\circ\text{C}$. На рис. 1a,b представлены РФЭС-спект-

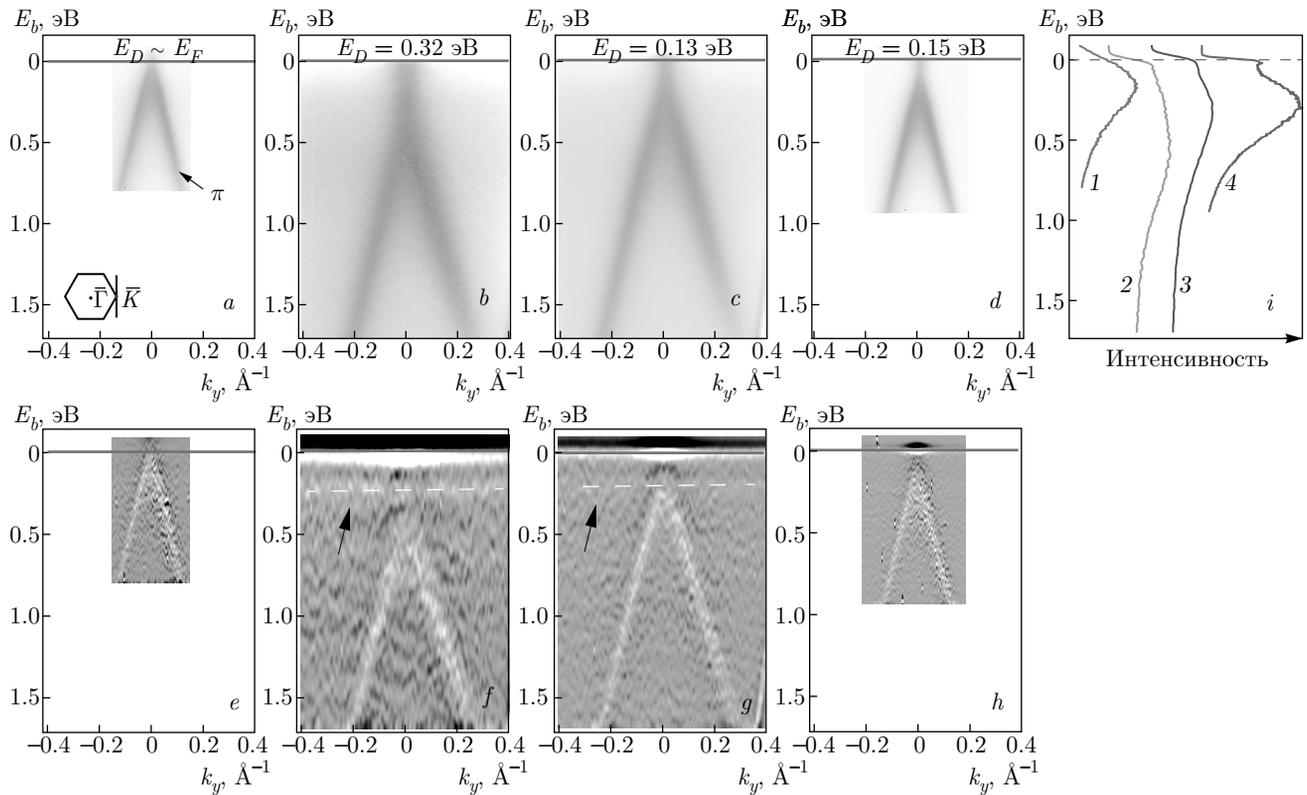


Рис. 2. (В цвете онлайн) ФЭСУР-спектры π -состояний графена в направлении, перпендикулярном направлению $\overline{\Gamma K}$ зоны Бриллюэна: *a* — для чистой системы Gr/Au/Co; *b* — Gr/Au/Co после напыления атомов Mn при $T = 14$ К; *c* — после прогрева Gr/MnAu/Co до комнатной температуры; *d* — после высокотемпературного отжига ($550\text{--}560^\circ\text{C}$) системы, а также соответствующие дисперсионные зависимости (*e*–*h*) после взятия второй производной от интенсивности по энергии. На панели *i* показаны срезы по энергии при $k_y = 0$ дисперсионных зависимостей, изображенных на панелях *a*–*d*, для чистой системы Gr/Au/Co (1); после напыления Mn (2); после прогрева до комнатной температуры (3) и после отжига до $550\text{--}560^\circ\text{C}$ (4)

ры внутренних уровней $\text{Mn}2p_{1/2,3/2}$ и $\text{C}1s$ для системы Gr/Au/Co после напыления Mn и прогрева до комнатной температуры, измеренные под разными углами эмиссии относительно нормали. На спектрах видно, что отношение интенсивностей линий марганца и углерода при нормальном угле вылета электронов больше, чем это же отношение при скользющем угле, что позволяет сделать вывод об интеркаляции атомов марганца под графен. При изменении угла эмиссии также возможна модуляция интенсивности пиков, связанная с дифракцией фотоэлектронов, однако ее вклад оказывается несущественным для анализа относительного расположения слоев атомов (см. дискуссию ниже).

Для исследования кристаллической структуры начальной и конечной систем были сняты картины ДМЭ при энергии первичных электронов $E_k = 55$ эВ. На дифракционных картинах видно, что

интеркаляция Mn в структуру Gr/Au/Co не приводит к образованию дополнительной сверхструктуры, что свидетельствует о формировании в основном разупорядоченного слоя марганца под графеном либо структур, близких к 1×1 по отношению к графену, что согласуется с ранее опубликованными результатами [16, 17].

С целью модификации системы был проведен прогрев образца до $550\text{--}560^\circ\text{C}$. Подробные РФЭС-спектры линий $\text{Mn}2p$ и $\text{C}1s$ с разложением на соответствующие компоненты до и после прогрева представлены на рис. 1*c, d*.

При подробном рассмотрении остовных уровней $\text{Mn}2p$ на рис. 1*d* видно, что отжиг системы Gr/MnAu/Co приводит к уширению обоих пиков марганца (нижний) по сравнению со спектром до отжига (верхний) и появлению компонент с большими энергиями связи, которые отвечают атомам Mn

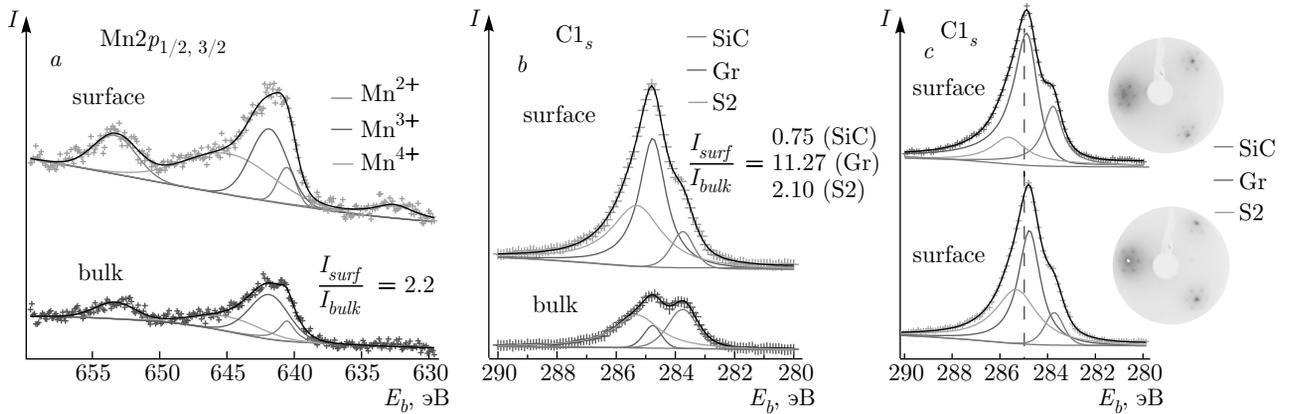


Рис. 3. (В цвете онлайн) РФЭС-спектры внутренних уровней $Mn2p_{1/2,3/2}$ (a) и $C1s$ (b) для системы Gr/SiC с интеркалированным Mn после прогрева при 550–600 °C, измеренные под разными углами эмиссии к нормали, а также спектры $C1s$ (c) для чистой системы Gr/SiC (верхний) и после интеркаляции Mn и прогрева до 550–600 °C (нижний) с представленными рядом картинками ДМЭ, снятыми при $E_k = 55$ эВ. На спектрах символами указаны экспериментальные данные, сплошными линиями — результат аппроксимации с разложением на соответствующие компоненты

с разными степенями окисления. На рис. 1c (центральный) наблюдается сдвиг уровня $C1s$ на 0.2 эВ после напыления и прогрева марганца до комнатной температуры. В результате отжига уровень $C1s$ оказывается сдвинут на 0.1 эВ (рис. 2c) относительно исходного положения. Такое поведение может свидетельствовать о формировании поверхностных сплавов Mn–Co или Mn–Au, в том числе Mn_2Au .

Для изучения дисперсионных зависимостей состояний графена на разных стадиях формирования системы были измерены ФЭСУР-спектры π -состояний графена в направлении, перпендикулярном направлению $\bar{K}\bar{K}$ зоны Бриллюэна, с энергией падающих фотонов 34 эВ. Эти спектры представлены на рис. 2. Для чистой системы (до напыления Mn) хорошо виден конус Дирака, образованный π -состояниями графена (рис. 3a), при этом точка Дирака (E_D) практически совпадает с уровнем Ферми (E_F). Напыление марганца приводит к сдвигу точки Дирака в сторону больших энергий связи E_b примерно на 0.32 эВ (рис. 2b), что свидетельствует о переносе заряда с атомов марганца к атомам углерода, приводящем к n -допированию графена. При 10-минутной экспозиции образца при комнатной температуре происходит интеркаляция марганца под графен со сдвигом точки Дирака на уровень 0.13 эВ энергии связи (рис. 2c). Данный факт можно связать с формированием связи Mn–Au под графеном и с уменьшением переноса заряда с атомов Mn на графен. Высокотемпературный отжиг (550–560 °C) также становится причиной энергетического сдвига — теперь точка Дирака соответствует положению с энергией

связи $E_b = 0.15$ эВ (рис. 2d). На срезах по энергии при $k_y = 0$ дисперсионных зависимостей, изображенных на рис. 2a–d (см. рис. 2i), хорошо видно, что напыление Mn приводит к уширению по энергии π -состояний графена (рис. 2i, кривая 2), указывающему на присутствие некоторой степени беспорядка, в том числе на возможное наличие островков атомов марганца. Прогрев системы до комнатной температуры приводит к сужению линии (рис. 2i, кривая 3), а при конечном прогреве до 560 °C (рис. 2i, кривая 4) полуширина линии оказывается практически такой же, как и для чистой системы, что свидетельствует об упорядочении слоя Mn под графеном.

После напыления Mn кроме линейной дисперсии π -состояний графена вблизи \bar{K} -точки наблюдается также слабодиспергирующее энергетическое состояние с энергией связи 0.25 эВ (отмечено стрелкой на рис. 2f). Такой вид дисперсии, который может отражать наличие края валентной зоны состояний атомов Co, сохраняется и после прогрева до комнатной температуры (рис. 2g). После высокотемпературного отжига это состояние не наблюдается (рис. 2h).

3.2. Электронная структура эпитаксиального графена на подложке SiC с интеркалированными атомами Mn

С целью изучения влияния атомов Mn на графен на полупроводниковой подложке была проведена адсорбция и интеркаляция Mn в системе Gr/SiC. Напыление происходило в два идентичных этапа по 3 мин, после которых были измерены РФЭС-спект-

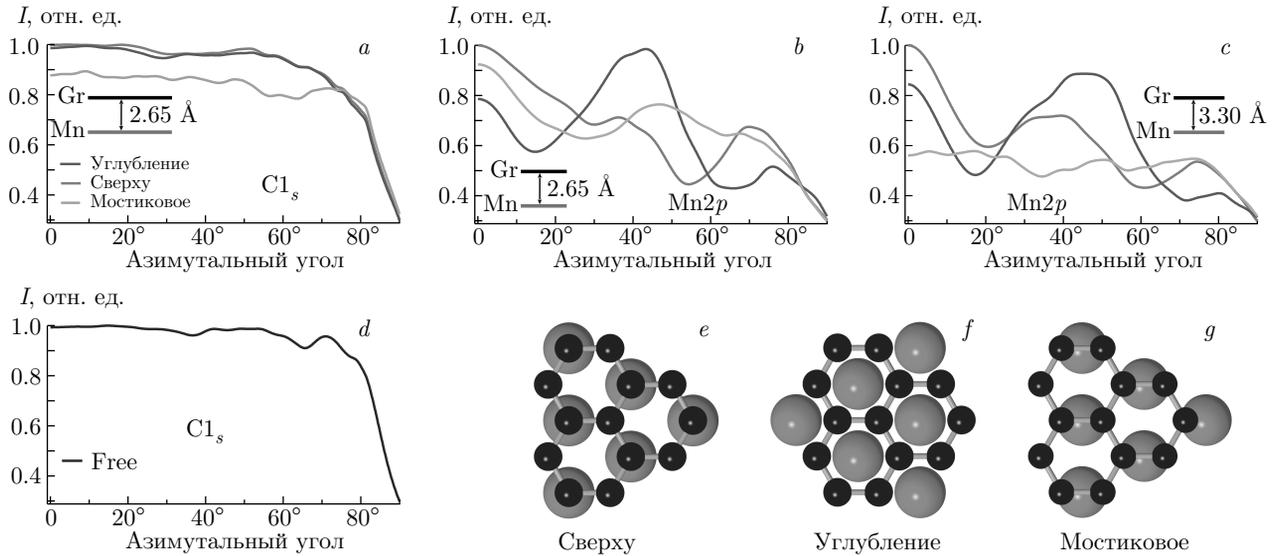


Рис. 4. (В цвете онлайн) Результаты расчетов угловых модуляций фотоэлектронной интенсивности, вызванных эффектами фотоэлектронной дифракции. Угловые зависимости интенсивности вдоль заданного направления, соответствующего ориентации пути $\bar{\Gamma K}$ в обратном пространстве, для трех возможных расположений графена относительно слоя марганца: сверху (a), углубление (b), мостиковое (c), а также для модели изолированного графена (d). Панели a и b соответствуют эмиссии электронов с остовных уровней $Mn2p$ и $C1s$ в модели с расстоянием между слоями марганца и графена, равным 2.65 \AA , а c — эмиссии с уровня $Mn2p$ при расстоянии 3.30 \AA . Рассматриваемые конфигурации интерфейса Gr/Mn изображены на панелях e–g

ры остовных уровней $Mn2p_{1/2,3/2}$ и $C1s$ под разными углами вылета электронов относительно нормали к поверхности образца. Эти спектры представлены на рис. 3.

Система Gr/SiC после интеркаляции марганца характеризуется типичным для графена на подложке SiC разложением уровня $C1s$ на три компонента с энергиями связи 284.7 эВ , 285.3 эВ и 283.7 эВ , что соответствует вкладам связи $C=C$ (или sp^2 -связи) графена, буферного слоя (S2) и подложки SiC [39].

Результаты сравнения отношений интенсивностей компонент для $C1s$ и $Mn2p_{1/2,3/2}$, полученных при разных углах эмиссии (рис. 3a,b), свидетельствуют о преимущественном расположении атомов Mn между графеновым монослоем и буферным слоем. Как и для первой системы, с целью исследования кристаллической структуры начальной и конечной систем были получены картины ДМЭ при $E_k = 55 \text{ эВ}$. Из результатов видно, что интеркаляция атомов Mn в структуру Gr/SiC не приводит к образованию дополнительной сверхрешетки, что свидетельствует о формировании преимущественно разупорядоченного слоя Mn под графеном либо структур, близких к 1×1 по отношению к графену.

Стоит отметить, что в отношении интенсивностей компонент фотоэлектронного сигнала могут

вносить заметный вклад эффекты фотоэлектронной дифракции. Исследование этого влияния в нашей работе было проведено путем теоретического расчета рассеяния и интерференции фотоэлектронов в модельных кластерах изучаемых систем.

Как известно, важным условием формирования отчетливого дифракционного узора для углового распределения фотоэлектронного сигнала, испускаемого атомами выбранного сорта (эмиттерами), является однотипная пространственная геометрия ближнего окружения эмиттера либо ограниченное число структурно-неэквивалентных позиций атомов-эмиттеров [40]. В изучаемых в данной работе системах интеркалированный слой марганца образует по отношению к подложке сверхструктуру с большой размерностью (либо является неупорядоченным) и, как следствие, обладает большим числом структурно-неэквивалентных положений атомов марганца по отношению к подложке. Поэтому в наших расчетах фотоэлектронной дифракции мы пренебрегли влиянием подложки на угловое распределение фотоэлектронов и ограничились рассмотрением простейшей модели структуры Gr/Mn 1×1 .

Из результатов расчетов фотоэлектронной дифракции, представленных на рис. 4, видно, что распределение интенсивности фотоэлектронного пи-

ка $C1s$ при параметрах расчета, соответствующих условиям эксперимента, не имеет заметных угловых модуляций сигнала в диапазоне углов $20\text{--}60^\circ$ (как для изолированного графена, так и для случая формирования 1×1 -интерфейса между графеном и слоем марганца), что объясняется очень малым вкладом обратного рассеяния при высоких кинетических энергиях электронов [40,41]. С другой стороны, в случае формирования 1×1 -структуры Gr/Mn для интенсивности пика $Mn2p$ (рис. 4b,c) наблюдаются заметные изменения от угла эмиссии, которые сильно зависят от конкретного расположения атомов Mn относительно графеновой решетки. Стоит, однако, заметить, что для системы Gr/Mn/SiC даже учет такого характера влияния дифракции на угловое распределение фотоэлектронов не может существенно повлиять на картину отношения интенсивностей I_{surf}/I_{bulk} для основных уровней графена и марганца (см. рис. 3).

Тем не менее экспериментальное отношение I_{surf}/I_{bulk} для основных уровней графена и марганца в системе Gr/MnAu/Co (см. рис. 1) оказывается меньше, чем для системы Gr/Mn/SiC. Однако, в соответствии с данными работ [16,17], атомы Mn под графеном могут формировать различные фазы, в том числе с разным количеством монослоев. При этом картина ДМЭ муаровой сверхструктуры может сохраняться, как показано в работах [16,17]. Кроме того, на экспериментальных спектрах $Mn2p$ для систем Gr/MnAu/Co и Gr/Mn/SiC (рис. 1d и рис. 3a) различаются пики, соответствующие нескольким степеням окисления атомов Mn, что означает наличие различных фаз интеркалированного Mn. Данные экспериментальные факты приводят нас к выводу о том, что реальные угловые модуляции интенсивности пика $Mn2p$ (вызванные фотоэлектронной дифракцией) с большой долей вероятности будут сильно отличаться от теоретических угловых зависимостей, посчитанных для идеальных моделей 1×1 -интерфейса Gr/Mn (рис. 4b,c). В эксперименте фотоэлектронный сигнал будет образован вкладами от эмиттеров марганца, имеющих весьма различное положение по отношению к графену. Вследствие усреднения по большому количеству неэквивалентных позиций атомов Mn эффекты дифракции должны почти полностью подавляться, а угловые модуляции фотоэлектронной интенсивности будут сводиться к минимуму.

Таким образом, при сравнении экспериментальных и теоретических зависимостей можно сделать вывод, что дифракционные эффекты из-за их незна-

чительного вклада не могут повлиять на анализ глубины залегания слоев для исследуемых в данной работе систем. Как показано на рис. 3a, уровень $Mn2p_{3/2}$ раскладывается на три компоненты с энергиями связи 640.5 эВ, 641.9 эВ и 644.9 эВ, соответствующие Mn^{2+} [42,43], Mn^{3+} [42,43] и Mn^{4+} [42,44]. Таким образом, исходя из разложений линий $Mn2p$ и $C1s$, а также из полученных отношений интенсивностей компонент при разных углах эмиссии, можно сделать предположение о формировании под графеном квазидвумерного слоя Mn и переходного слоя силицида марганца.

На РФЭС-спектре уровня $C1s$ после интеркаляции Mn и отжига при температуре $550\text{--}600^\circ\text{C}$ (см. рис. 3c, нижний спектр) наблюдается сдвиг графеновой компоненты из положения $E_b = 284.9$ эВ на позицию с $E_b = 284.7$ эВ. Помимо сдвига sp^2 -компоненты наблюдается смещение компоненты буферного слоя (S2) в сторону меньших энергий связи на 0.4 эВ.

На рис. 5 представлены дисперсионные зависимости электронных π -состояний, полученные методом ФЭСУР на разных этапах формирования системы. На спектре для чистой системы Gr/SiC на рис. 5a наблюдается конус Дирака, образованный π -состояниями с точкой Дирака, сдвинутой в сторону больших энергий связи относительно уровня Ферми на 0.41 эВ, что согласуется с результатами работ [2,45]. Напыление атомов Mn на систему Gr/SiC приводит к сдвигу точки Дирака на уровень с энергией связи 0.44 эВ (рис. 5b), что обусловлено переносом заряда с атомов марганца к атомам углерода. Отжиг системы при температурах в пределах $550\text{--}600^\circ\text{C}$ приводит к небольшому обратному смещению конуса ближе к уровню Ферми с точкой Дирака при $E_b = 0.38$ эВ (рис. 5c). Такое поведение может быть следствием образования интерфейсных сплавов между графеном и SiC.

Аналогично системе Gr/MnAu/Co, срезы по энергии при значении $k_y = 0$ дисперсионных зависимостей на рис. 5g демонстрируют уширение по энергии π -состояния графена, что указывает на наличие некоторой степени беспорядка, в том числе на образование кластеров Mn. Однако последующий прогрев приводит к сужению линии, что говорит об упорядочении слоя Mn под графеном.

3.3. Исследование системы Gr/SiC методом спектроскопии КРС

Для подробного изучения структуры графена, выращенного на подложке SiC, было проведено ис-

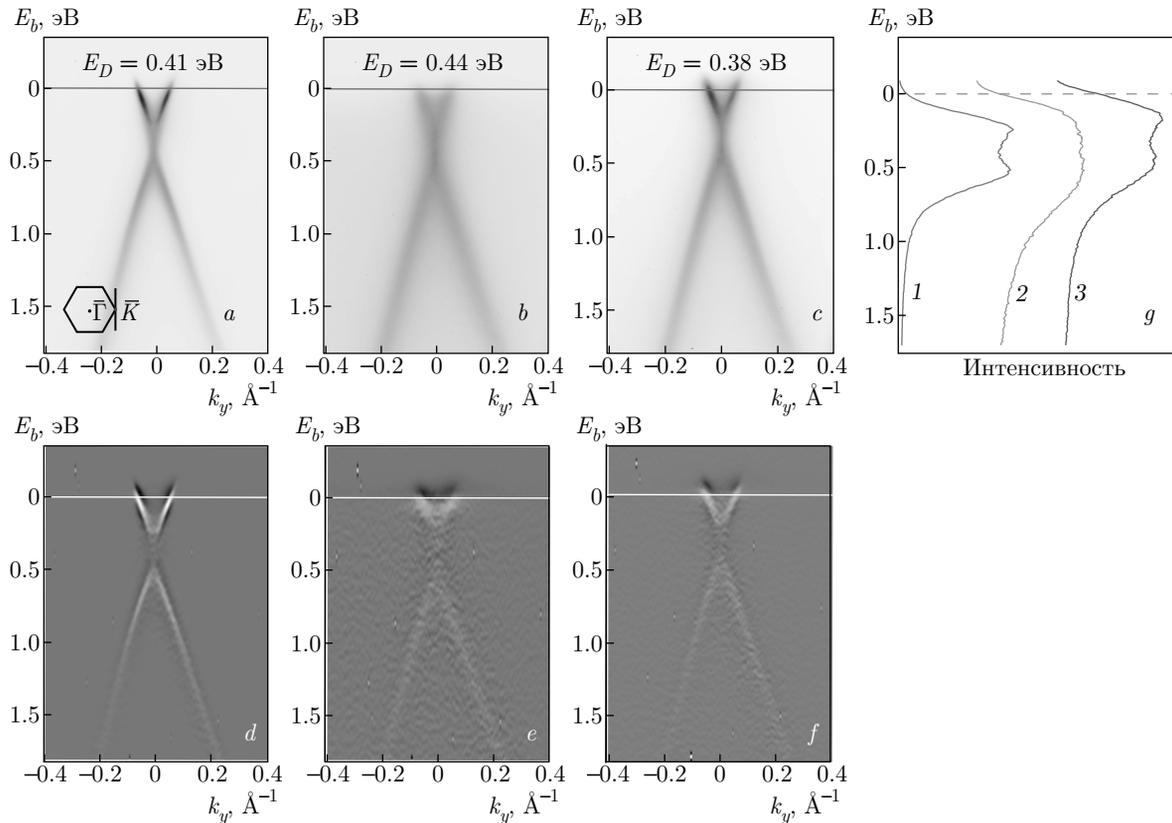


Рис. 5. (В цвете онлайн) ФЭСУР-спектры π -состояний графена в направлении, перпендикулярном направлению $\overline{\Gamma K}$ зоны Бриллюэна, для чистой системы Gr/SiC (a), после напыления атомов Mn (b) и после отжига системы при 550–600 °C (c), а также соответствующие дисперсионные зависимости (d–f) после взятия второй производной от интенсивности по энергии. На панели g представлены срезы по энергии при $k_y = 0$ дисперсионных зависимостей для всех этапов формирования системы a–c: для чистой системы Gr/SiC (1); после напыления Mn (2); после отжига до 550–600 °C (3)

следование методом спектроскопии КРС исходного образца до напыления на него атомов Mn и образца после напыления Mn с последующим отжигом при температуре 550–560 °C.

На рис. 6a представлен массив спектров, полученный в результате сканирования области 10×10 мкм² в центре образца до напыления на него атомов Mn. В спектрах КРС наблюдаются особенности, характерные для графена: линии G и 2D, а также широкие полосы в области 1200–1700 см⁻¹, соответствующие буферному слою между графеном и SiC [46]. На рис. 6b приведена карта распределения полной ширины на половине высоты (full width at half maximum, FWHM) линии 2D, полученная в результате обработки данного массива, а на рис. 6в — гистограмма карты (график статистического распределения ее элементов). Установлено, что в большей части спектров линия 2D имеет симметричную форму с FWHM ≈ 35 см⁻¹ и ее контур хорошо аппроксимируется одиночным ло-

ренцианом, что указывает на наличие монослойного графена в исследуемой области [47]. В оставшейся части спектров линия 2D имеет асимметричную форму с FWHM ≈ 50 см⁻¹, что говорит о присутствии областей двуслойного графена в исходном образце.

На достаточно высокое качество исходного образца указывает тот факт, что линию D (1350 см⁻¹), возникающую при наличии дефектов и структурного беспорядка в графене, во всех спектрах массива невозможно выделить из общего фона вследствие ее малой интенсивности по сравнению с интенсивностью спектра буферного слоя.

Массив спектров, полученный при сканировании области размером 10×10 мкм² образца Gr/SiC после напыления Mn с последующим отжигом, представлен на рис. 6d. По сравнению со спектрами исходного образца, в спектрах образца после напыления Mn появилась ярко выраженная линия D, свидетельствующая о появлении дефектов в кристалли-

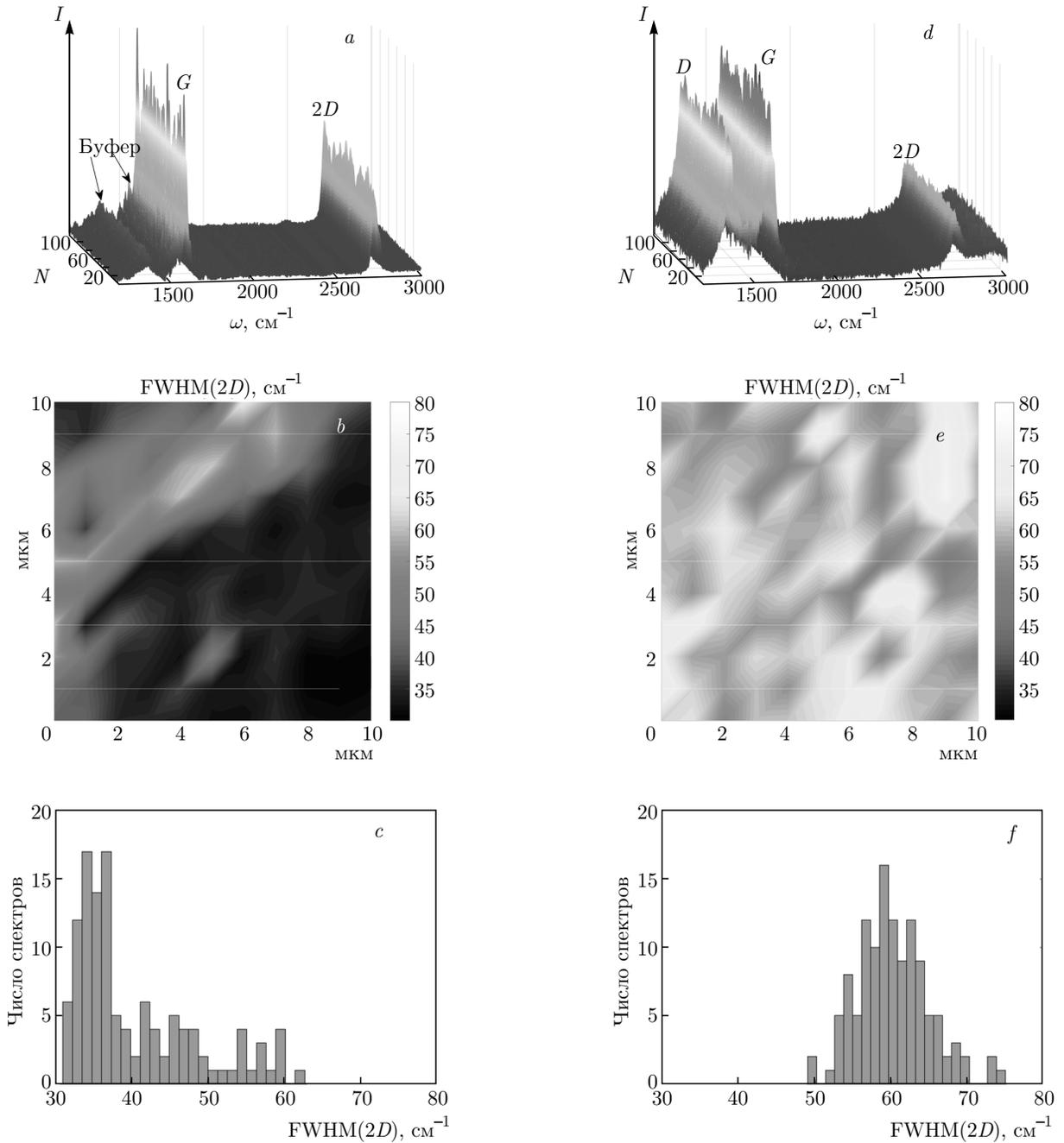


Рис. 6. (В цвете онлайн) Массивы спектров образца Gr/SiC до (a) и после (d) нанесения атомов Mn. Карты FWHM линии 2D и соответствующие гистограммы для образца Gr/SiC до (b,e) и после (c,f) нанесения Mn

ческой решетке образца. Подобная картина наблюдалась ранее в спектрах КРС графена на SiC после его интеркаляции атомами железа, кобальта и кремния [48, 49]. На рис. 6e и рис. 6f приведены соответственно карта FWHM линии 2D и гистограмма этой карты. Видно, что, по сравнению с исходным образцом, величина FWHM линии 2D существенно уве-

личилась для образца Gr/SiC после напыления Mn. Причины наблюдаемого уширения линии 2D будут рассмотрены ниже.

На рис. 7 представлены типичные спектры КРС исходного образца и образца после нанесения Mn. На этом же рисунке приводятся заимствованные из работы [46] спектры КРС буферного слоя, находя-

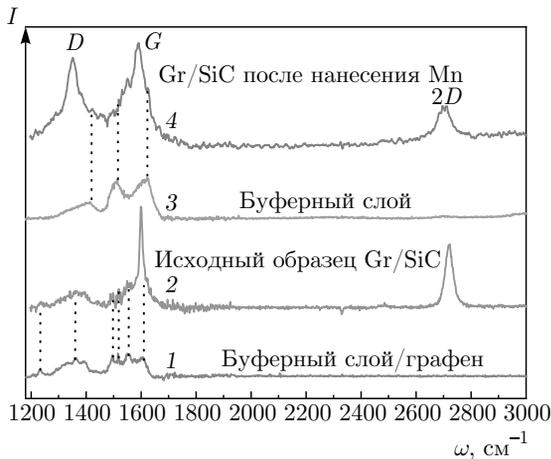


Рис. 7. (В цвете онлайн) Типичные спектры КРС, полученные при составлении карт областей образца графена до (спектр 2) и после (спектр 4) нанесения Mn в сравнении со спектрами буферного слоя, покрытого графеном (спектр 1) и без графенового покрытия (спектр 3) [46]. Пунктиром отмечены положения максимумов основных линий спектра КРС буферного слоя. Экспериментально измеренные спектры нормированы на интенсивность G -линии

щегося под слоем графена, и буферного слоя без графенового покрытия. Хорошо видно, что спектры КРС буферного слоя, находящегося под слоем графена, и спектр буферного слоя без графенового покрытия существенно различаются. Хорошо видно также, что спектр образца до напыления Mn в области частот $1200\text{--}1600\text{ см}^{-1}$ полностью аналогичен приводимому в литературе спектру буферного слоя, покрытого слоем графена, который был получен в работе [46] после вычитания из исходного спектра линий G и $2D$ графенового слоя. После нанесения Mn кроме появления D -линии в спектрах КРС в области частот $1200\text{--}1600\text{ см}^{-1}$ наблюдаются существенные изменения в форме спектральных полос: исчезновение узкого пика с положением 1234 см^{-1} и сдвиг правого крыла G -линии в сторону высоких частот. Спектр буферного слоя без графенового покрытия, приведенный на рис. 7, состоит из трех основных пиков: широкая асимметричная полоса с максимумом вблизи 1400 см^{-1} и две широкие линии с максимумами на 1530 и 1600 см^{-1} . Сравнение спектра такого буферного слоя с типичными спектрами, полученными при исследовании образца после напыления Mn, позволяет утверждать, что наблюдаемые в спектрах изменения, которые проявляются в виде широкого асимметричного фона в области линии D и двух крыльев (с высокочастотной и низ-

кочастотной сторон) линии G , в основном связаны с модификацией буферного слоя. Можно предположить, что в основе такой модификации лежат две причины: интеркалирование буферного слоя атомами Mn, проникшими через графеновую пленку, и уменьшение влияния графеновой пленки на лежащий ниже буферный слой.

Анализ спектров КРС графена позволяет не только получать информацию о степени дефектности образца, но и определять концентрацию и тип дефектов. Наиболее часто встречающимися типами дефектов в графене являются точечные дефекты (например, вакансии) и линейные дефекты (границы кристаллитов) [50]. Поскольку возникновение различных типов дефектов в кристаллической решетке графена по-разному влияет на время жизни фононов, а следовательно, и на ширину линии G , одновременный анализ отношения интегральных интенсивностей линий D и G (I_D/I_G) и FWHM линии G (FWHM_G) позволяет разделить вклады различных типов дефектов в спектры КРС графена.

В спектрах исследованного образца средние значения отношения I_D/I_G и FWHM_G составили соответственно 0.85 и 32 см^{-1} . Основываясь на данных, приведенных в работе [50], в которой была предложена модель разделения вкладов точечных и линейных дефектов в спектр КРС графена, можно утверждать, что в образце после нанесения Mn присутствуют как точечные, так и линейные дефекты с доминированием последних. Показателями степени дефектности образца графена в таком случае являются средний размер L_a кристаллитов и среднее расстояние L_D между дефектами. С использованием значений параметра I_D/I_G и длины волны возбуждающего света $\lambda_1 = 532\text{ нм}$ средний размер кристаллитов можно вычислить по формуле [51]:

$$L_a [\text{нм}] = (2.4 \cdot 10^{-10}) \lambda_1^4 (I_D/I_G)^{-1}. \quad (1)$$

Средний размер кристаллитов в образце после нанесения атомов Mn, согласно формуле (1), составляет 22.6 нм . В работе [50] приведены зависимости параметра I_D/I_G от FWHM_G для графена с различным фиксированным значением L_D . Оцененные нами значения параметров I_D/I_G и FWHM_G наиболее близки к зависимости для графена с $L_D = 15.1\text{ нм}$. Таким образом, среднее расстояние между дефектами в исследованном образце, согласно данным работы [48], составляет около 15 нм .

Сравнивая карты и гистограммы распределения FWHM линии $2D$ для исходного образца и образца после напыления Mn, легко заметить, что после напыления FWHM линии $2D$ увеличилась по

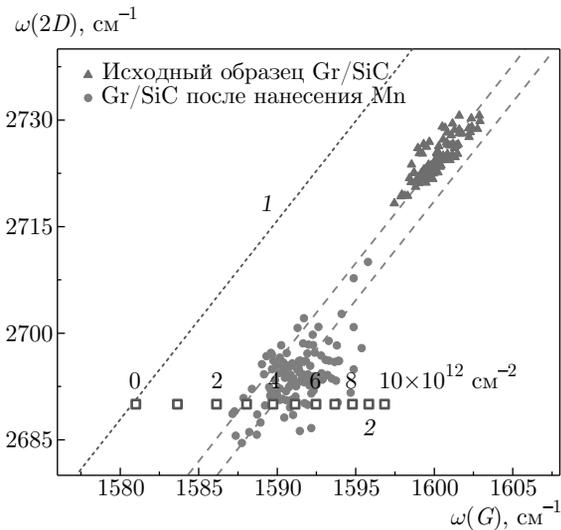


Рис. 8. (В цвете онлайн) Корреляция между положениями линий G и $2D$ для образца до и после нанесения атомов Mn . Точки, соответствующие двухслойному графену, исключены из рассмотрения. Пунктирная линия 1 демонстрирует зависимость между положениями линий G и $2D$ в спектре КРС электрически нейтрального монослойного графена на подложке SiC в условиях двуслойной деформации. Штриховые линии — результат аппроксимации экспериментальных данных. Квадратные символы 2 — данные о сдвиге линии G в спектре КРС недеформированного графена при увеличении концентрации электронов

сравнению с ее значением для исходного образца. Тем не менее ее форма в большинстве спектров по-прежнему остается симметричной и хорошо аппроксимируется одним контуром Лоренца. Только в небольшой части спектров (желтые и красные области на рис. 6*d*, где FWHM линии $2D$ составляет более 65 см^{-1}) линия $2D$ имеет асимметричную форму, характерную для двухслойного графена. Эти данные указывают на то, что в результате интеркаляции буферного слоя атомами Mn не произошло его превращения в дополнительный слой графена и число слоев исходного, преимущественно однослойного графена после нанесения Mn не увеличилось. Таким образом, основной причиной уширения линии $2D$ в случае исследованного нами образца является возникновение дефектов в кристаллической решетке графена в результате интеркаляции атомами Mn [52].

На рис. 8 приведены данные о корреляции между положениями линий G и $2D$ в спектре КРС исследуемых образцов графена на SiC до и после интеркаляции. На положение линий G и $2D$ в спектре КРС графена могут оказывать влияние сразу несколько

факторов. Наиболее важными из них являются концентрация носителей заряда и величина деформации. Методика разделения вкладов деформации и концентрации носителей заряда в спектры КРС графена была впервые введена в работе [53]. В работе [54] было показано, что в случае графена, выращенного на SiC , на положение линии $2D$ оказывает влияние величина скорости Ферми, которая, в свою очередь, зависит от величины диэлектрической проницаемости подложки. Зависимость между положениями линий G и $2D$ в спектре КРС электрически нейтрального монослойного графена на подложке SiC в условиях двуслойной деформации, построенная на основе данных работы [55] и скорректированная с учетом влияния скорости Ферми на положение линии $2D$ в спектре КРС графена [54], представлена на рис. 8 пунктирной линией. С использованием методики, предложенной в работе [53], и данных по зависимости положения линий G и $2D$ от концентрации свободных носителей заряда из работы [55], которые были скорректированы с учетом описанных выше факторов [54], нами была проведена оценка величины двуслойной деформации $\epsilon_{||}$ и концентрации n носителей заряда для каждой изученной области. Отметим, что, согласно приведенным выше данным ФЭСУР, образец демонстрировал электронный тип допирования как до, так и после обработки.

Результаты анализа данных КРС, представленных на рис. 8, приводят к заключению, что после нанесения атомов Mn на поверхность исследованного образца средняя величина $\epsilon_{||}$ снизилась с -0.21% (знак «минус» указывает на деформацию сжатия) до -0.02% , а средняя концентрация электронов n_e увеличилась от $2.9 \cdot 10^{12}$ до $4.0 \cdot 10^{12}\text{ см}^{-2}$.

Такое существенное уменьшение величины деформации свидетельствует в пользу того, что в результате интеркалирования графена атомами Mn произошло отделение графена от подложки SiC . Однако увеличение оценочной концентрации электронов в образце после обработки Mn не согласуется с приведенными выше данными ФЭСУР. Одним из возможных объяснений возникшего противоречия может быть то, что данные ФЭСУР были получены непосредственно после напыления Mn с последующим отжигом в условиях сверхвысокого вакуума, а измерения спектров КРС проводились в атмосферных условиях через несколько дней после извлечения образца из вакуумной камеры. В этом случае на поверхности графена могли адсорбироваться молекулы из воздуха, которые могут оказывать влияние на концентрацию носителей заряда в графене [56].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе было исследовано влияние интеркаляции атомов Mn на электронные и структурные свойства систем Gr/Au/Co и Gr/SiC. Для обеих систем методами РФЭС и ФЭСУР подтверждена интеркаляция и проанализирована вероятность формирования интерфейсных сплавов Mn с атомами подложек. Методом ФЭСУР получены дисперсионные зависимости электронных π -состояний графена в \bar{K} -точке зоны Бриллюэна, демонстрирующие сохранение квазисвободного характера графена при интеркаляции Mn. На разных этапах формирования систем в электронной структуре наблюдались сдвиги точки Дирака, отражающие изменение величины переноса заряда и электронный тип допирования графена в результате интеркаляции и последующих прогревов систем.

Результаты, полученные методом КРС, также указывают на то, что напыление Mn с последующим отжигом на поверхность эпитаксиального, преимущественно монослойного графена, выращенного на подложке SiC, приводит к интеркаляции графена атомами Mn. При этом буферный слой остается связанным с подложкой, и в результате интеркаляции не происходит его превращения в дополнительный слой графена, что согласуется с данными РФЭС и ФЭСУР.

Благодарности. Авторы выражают благодарность сотрудникам центра синхротронного излучения Elettra в г. Триесте за предоставленную возможность проведения измерений и техническую поддержку. Авторы также благодарны П. Ландуа (P. Landois) и ее коллегам (Университет Монпелье, Франция) за предоставленные спектры буферного слоя. Часть исследований проводилась в ресурсном центре «Физические методы исследования поверхности» Научного парка Санкт-Петербургского государственного университета.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (грант № 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024)).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. K. Geim and K. S. Novoselov, *Nature Mater.* **6**, 183 (2007).
2. A. Bostwick, T. Ohta, T. Seyller et al., *Nature Phys.* **3**, 36 (2007).
3. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., *Nature* **438**, 197 (2005).
4. D. Wickramaratne, L. Weston, and C. G. Van de Walle, *J. Phys. Chem. C* **122**, 25524 (2018).
5. W. Han, R. K. Kawakami, M. Gmitra, and J. Fabian, *Nature Nanotechn.* **9**, 794 (2014).
6. A. A. Rybkina, A. G. Rybkin, I. I. Klimovskikh et al., *Nanotechnology* **31**, 16520 (2020).
7. O. Rader, A. Varykhalov, J. Sánchez-Barriga et al., *Phys. Rev. Lett.* **102**, 057602 (2009).
8. А. М. Шикин, В. К. Адамчук, К. Х. Ридер, ФТТ **51**, 2251 (2009) [A. M. Shikin, V. K. Adamchuk, and K. H. Rieder, *Phys. Solid State* **51**, 2390 (2009)].
9. A. Varykhalov, J. Sanchez-Barriga, A. Shikin et al., *Phys. Rev. Lett.* **101**, 157601 (2008).
10. M. Weser, Y. Rehder, K. Horn et al., *Phys. Lett.* **96**, 012504 (2010).
11. A. G. Rybkin, A. A. Rybkina, M. M. Otrokov et al., *Nano Lett.* **18**, 1564 (2018).
12. D. Usachov, A. V. Fedorov, M. M. Otrokov et al., *Nano Lett.* **15**, 2396 (2015).
13. J. Drnec, S. Vlais, I. Carlomagno et al., *Carbon* **94**, 554 (2015).
14. R. Decker, J. Brede, N. Atodiressei et al., *Phys. Rev. B* **87**, 041403 (2013).
15. A. Varykhalov, J. Sánchez-Barriga, D. Marchenko et al., *Nature Comm.* **6**, 1 (2015).
16. T. Gao, Y. Gao, C. Chang et al., *ACS Nano* **6**, 6562 (2012).
17. Y. Zhang, Y. Zhang, D. Ma et al., *Nano Res.* **6**, 887 (2013).
18. I. I. Klimovskikh, M. Krivenkov, A. Varykhalov et al., *Carbon* **147**, 182 (2019).
19. I. S. Sokolov, D. V. Averyanov, O. E. Parfenov et al., *Mater. Horiz.* **7**, 1372 (2020).
20. M. Kim, M. C. Tringides, M. T. Hershberger et al., *Carbon* **123**, 93 (2017).
21. Д. А. Естюнин, И. И. Климовских, В. Ю. Климовских и др., ЖЭТФ **152**, 903 (2017) [D. A. Estyunin, I. I. Klimovskikh, V. Y. Voroshnin et al., *JETP* **125**, 762 (2017)].
22. I. I. Klimovskikh, M. M. Otrokov, V. Y. Voroshnin et al., *ACS Nano* **11**, 368 (2017).
23. A. Shikin, A. Rybkin, D. Marchenko et al., *New J. Phys.* **15**, 013016 (2013).

24. M. Gibertini, M. Koperski, A. F. Morpurgo et al., *Nature Nanotechn.* **14**, 408 (2019).
25. C. Gong and Z. Xiang, *Science* **363**, 6428 (2019).
26. N. Samarth, *Nature* **546**, 216 (2017).
27. P. Huang, P. Zhang, S. Xu et al., *Nanoscale* **12**, 2309 (2020).
28. B. Huang, G. Clark, E. Navarro-Moratalla et al., *Nature* **546**, 270 (2017).
29. M. A. McGuire, H. Dixit, V. R. Cooper et al., *Chem. Mater.* **27**, 612 (2015).
30. C. Tang, Z. Zhang, S. Lai et al., arXiv:1910.10411 (2019).
31. O. V. Yazyev, *Rep. Progr. Phys.* **73**, 056501 (2010).
32. O. V. Yazyev and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 047209 (2008).
33. L. Y. Gan, Q. Zhang, C. S. Guo et al., *J. Phys. Chem. C* **120**, 2119 (2016).
34. J. Zhang, B. Zhao, T. Zhou et al., *Phys. Rev. B* **97**, 085401 (2018).
35. E. Voloshina, Q. Guo, B. Paulus et al., *J. Phys. Chem. C* **123**, (2019).
36. A. A. Lebedev, V. Yu. Davydov, D. Yu. Usachov et al., *Semiconductors* **52**, 1882 (2018).
37. L. Petaccia, P. Vilmercati, S. Gorovikov et al., *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A* **606**, 780 (2009).
38. F. J. García de Abajo, M. A. Van Hove, and C. S. Fadley, *Phys. Rev. B* **63**, 075404 (2001).
39. M. H. Oliveira Jr., T. Schumann, F. Fromm et al., *Carbon* **52**, 83 (2013).
40. E. V. Shalaeva and M. V. Kuznetsov, *J. Struct. Chem.* **44**, 465 (2003).
41. M. L. Xu, J. J. Barton, and M. A. Van Hove, *Phys. Rev. B* **39**, 8275 (1989).
42. X. Li, M. Xin, S. Guo et al., *Electrochim. Acta* **253**, 302 (2017).
43. A. Sumboja, C. Y. Foo, X. Wang et al., *Adv. Mater.* **25**, 2809 (2013).
44. D. Mukherjee, B. G. Rao, and B. M. Reddy, *Appl. Catal. B* **197**, 105 (2016).
45. S. Y. Zhou, D. A. Siegel, A. V. Fedorov et al., *Physica E* **40**, 2642 (2008).
46. T. Wang, J.-R. Huntzinger, M. Bayle et al., *Carbon* **163**, 224 (2020).
47. A. C. Ferrari, *Sol. St. Comm.* **143**, 47 (2007).
48. М. В. Гомоюнова, Г. С. Гребенюк, В. Ю. Давыдов и др., *ФТТ* **60**, 1423 (2018) [M. V. Gomoynova, G. S. Grebenyuk, V. Yu. Davydov et al., *Physics of the Solid State* **60**, 1439 (2018)].
49. Г. С. Гребенюк, И. А. Елисеев, С. П. Лебедев и др., *ФТТ* **62**, 1726 (2020) [G. S. Grebenyuk, I. A. Eliseev, S. P. Lebedev et al., *Phys. Solid State* **62**, 519 (2020)].
50. L. G. Cançado, M. G. da Silva, E. H. M. Ferreira et al., *2D Mater.* **4**, 025039 (2017).
51. L. G. Cançado, K. Takai, T. Enoki et al., *Appl. Phys. Lett.* **88**, 163106 (2006).
52. A. Eckmann, A. Felten, I. Verzhbitskiy et al., *Phys. Rev. B* **88**, 035426 (2013).
53. J. E. Lee, G. Ahn, J. Shim et al., *Nature Comm.* **3**, 1024 (2012).
54. I. A. Eliseyev, V. Yu. Davydov, A. N. Smirnov et al., *Semiconductors* **53**, 1904 (2019).
55. G. Froehlicher and S. Berciaud, *Phys. Rev. B* **91**, 205413 (2015).
56. V. Panchal, C. E. Giusca, A. Lartsev et al., *2D Mater.* **3**, 015006 (2016).

ВЛИЯНИЕ ВМОРОЖЕННЫХ НЕМАГНИТНЫХ ПРИМЕСЕЙ НА ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА

А. К. Муртазаев^a, А. Б. Бабаев^{b,c*}

^a *Институт физики им. Х. И. Амирханова
Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук
367003, Магачкала, Россия*

^b *Дагестанский федеральный исследовательский центр Российской академии наук
367000, Магачкала, Россия*

^c *Дагестанский государственный педагогический университет
367000, Магачкала, Россия*

Поступила в редакцию 31 января 2021 г.,
после переработки 10 февраля 2021 г.
Принята к публикации 10 февраля 2021 г.

С помощью кластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло исследуется влияние слабого беспорядка, реализованного в виде замороженных немагнитных примесей, на фазовые переходы в трехмерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$. Рассмотрены системы с линейными размерами $L = 10$ – 120 при концентрациях спинов $p = 1.00, 0.80$. Используя метод кумулянтов Биндера четвертого порядка и гистограммный метод анализа данных, мы показали, что внесение в систему слабого замороженного беспорядка ($p = 0.80$) в виде немагнитных примесей изменяет фазовый переход первого рода на фазовый переход второго рода.

DOI: 10.31857/S0044451021060055

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение влияния беспорядка, содержащегося в твердом теле в виде примесей или других дефектов структуры, на фазовые переходы (ФП) и критические явления (КЯ) представляет большой теоретический и экспериментальный интерес [1]. Это связано с тем, что большинство реальных твердых тел всегда содержит примеси и другие дефекты структуры, присутствие которых влияет на их физические свойства и, в частности, может существенно влиять на поведение систем при ФП. По этой причине существует серьезная необходимость знать закономерности влияния примесей на те или иные свойства твердых тел. Без предварительных теоретических и экспериментальных исследований ни один материал не может быть использован для практических целей. Поэтому в последнее время усилия многих исследователей были направлены на то, чтобы понять, как те или иные дефекты струк-

туры влияют на поведение различных систем при ФП.

Критерий Харриса [2] ответил на принципиальный вопрос о смене критического поведения при введении небольшого количества неподвижных («замороженных») примесей. Согласно этому критерию, если $d\nu > 2$, где d — размерность систем, а ν — критический индекс (КИ) радиуса корреляции, то примеси не изменяют критических индексов. Критерий Харриса неприменим к двумерной модели Изинга в силу того, что $d\nu = 2$. В работе [3] было показано, что влияние примеси в двумерной модели Изинга затрагивает только поведение теплоемкости, в то время как остальные термодинамические и корреляционные функции не изменяют своего критического поведения. В случае двумерных моделей Поттса с числом состояний спина $q \leq 4$ примеси могут изменить критические индексы и изменить класс универсальности критического поведения.

В то же время имеются основания предполагать, что примеси оказывают совершенно другое влияние вплоть до изменения рода ФП в случае спиновых систем, испытывающих в однородном состоянии ФП

* E-mail: b_albert78@mail.ru

первого рода [4,5]. Такая смена ФП экспериментально наблюдается в жидких кристаллах в присутствии аэрогеля [6]. Для низкоразмерных систем ($d \leq 2$), описываемых моделью Поттса с $q > q_c(d)$ ($q_c = 4, q_c$ — критическое число состояний спина, d — размерность), на основе аналитических методов было показано, что наличие сколь угодно малой величины беспорядка достаточно, чтобы изменить ФП первого рода на ФП второго рода [7]. Для однородных систем с размерностью $d \geq 3$, описываемых моделями Поттса, для которых наблюдается ФП первого рода, ситуация может оказаться существенно другой. В этом случае внесение замороженного беспорядка может привести к трикритической точке p^* , ниже которой будет наблюдаться ФП второго рода, а выше ФП — первого рода [8–10].

В связи с этим целью настоящей работы является исследование на основе однокластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло (МК) влияния слабого беспорядка, реализованного в виде замороженных немагнитных примесей каноническим способом, на ФП в трехмерных системах, описываемых моделью Поттса с числом состояний спина $q = 5$, для которой в однородном состоянии наблюдается ФП первого рода.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

В работе рассматривается трехмерная слабо разбавленная модель Поттса с числом состояний спина $q = 5$. При построении такой модели необходимо иметь в виду следующие особенности: в узлах кубической решетки расположены спины S_i , которые могут находиться в одном из состояний $q \geq 2$, и немагнитные примеси (вакансии); немагнитные примеси распределены случайно и фиксированы на различных узлах решетки (quenched disorder); энергия связи между двумя узлами равна нулю, если они находятся в разных состояниях (безразлично, в каких именно) или если хотя бы в одном узле находится немагнитный атом, и равна $|J|$, если взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях (опять же, все равно, в каких именно). С учетом этих особенностей микроскопический гамильтониан такой системы может быть, представлен в виде

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i S_j), \quad S_i = 1, 2, 3, 4, 5, \quad (1)$$

где

$$\delta(S_{i,j}) = \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j, \\ 0, & \text{если } S_i \neq S_j, \end{cases}$$

$$\rho_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j, \\ 0, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases}$$

Исследования проводились на основе высокоэффективного кластерного алгоритма Вольфа [11]. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями при концентрациях спинов $p = 1.00, 0.80$. Исследовались системы с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 10-120$. Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины были упорядочены вдоль оси Z . Для вывода системы в равновесное состояние отсекался неравновесный участок длиной τ_0 для системы с линейными размерами L . Этот неравновесный участок отбрасывался. Затем усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной $\tau = 200\tau_0$.

Для самой большой системы $L = 120$, $\tau_0 = 2.3 \cdot 10^3$ МК-шагов/спин. Кроме того, проводилось усреднение по различным начальным конфигурациям. В случае $p = 1.0$ для усреднения использовалось 10 начальных конфигураций. Для слабо разбавленных систем с концентрацией спинов $p = 0.80$ осуществлялось конфигурационное усреднение по 1000 различным конфигурациям, причем для каждой примесной конфигурации выполнялось усреднение по длине цепи $\tau = 200\tau_0$.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости использовались флуктуационные соотношения [12]:

$$C(T) = (NK^2) (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (2)$$

$$\chi = (NK) (\langle m_F^2 \rangle - \langle m_F \rangle^2), \quad (3)$$

где $K = |J|/(k_B T)$, $N = pL^3$ — число магнитных узлов, U — внутренняя энергия, m_F — намагниченность системы, угловые скобки обозначают усреднение по ансамблю. В качестве намагниченности (m_F), для ФМ-модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ использовалось следующее выражение [13]:

$$m_F = \frac{q(N_{max}/N) - 1}{q - 1}, \quad (4)$$

где $N_{max} = \max[N_1, N_2, N_3, N_4, N_5]$, N_i — число спинов в состоянии с $q = i$, $N = pL^3$.

На рис. 1 и 2 представлены характерные зависимости для восприимчивости χ и теплоемкости C

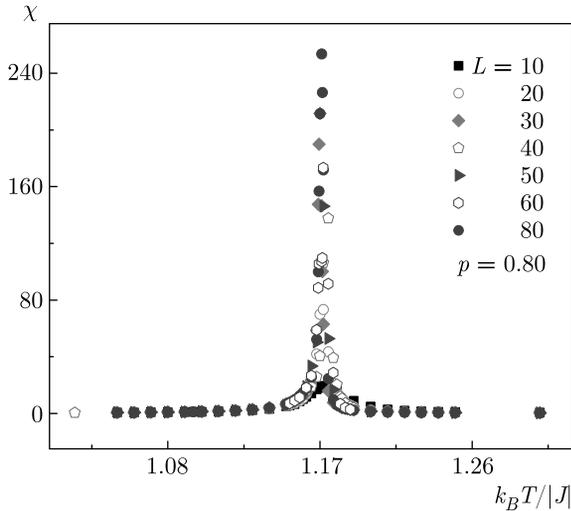


Рис. 1. Температурная зависимость восприимчивости χ для трехмерной слабо разбавленной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке

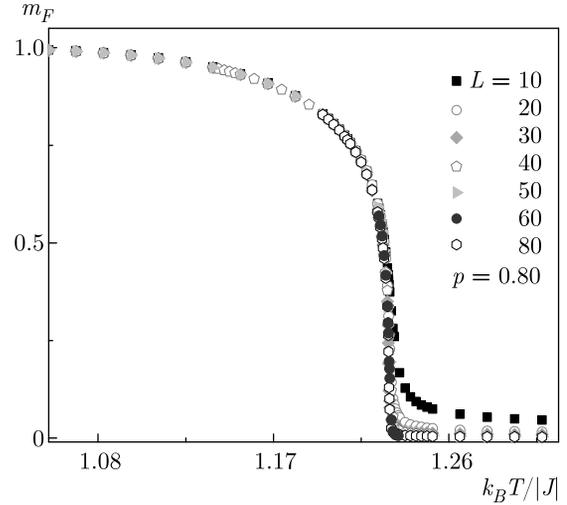


Рис. 3. Температурная зависимость намагниченности m_F для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке

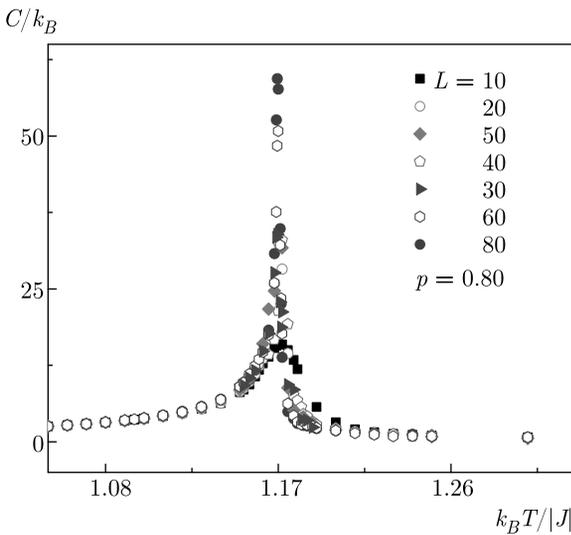


Рис. 2. Температурная зависимость теплоемкости C для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке

от температуры T для трехмерной слабо разбавленной ФМ-модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке для систем с линейными размерами $L = 10-80$ при концентрации спинов $p = 0.80$. Здесь и далее на всех рисунках погрешность данных не превышает размеров символов, используемых для построения графиков. Отметим, что в зависимости восприимчивости χ и теплоемкости C от температуры для всех исследуемых нами систем проявляются четко выраженные мак-

симумы, и эти максимумы в пределах погрешности соответствуют одной температуре.

На рис. 3 представлены температурные зависимости намагниченности m_F для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с $q = 5$ при $p = 0.80$. Как видно на рис. 3, наблюдается монотонное уменьшение величины m_F с ростом температуры и заметное уменьшение высокотемпературных «хвостов» при увеличении линейного размера L .

Для определения температуры фазового перехода $T_l(p)$ и анализа характера фазового перехода использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [14]:

$$V_L(T, p) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle}{3 \langle E^2 \rangle_L^2}, \quad (5)$$

$$U_L(T, p) = 1 - \frac{\langle m_F^4 \rangle}{3 \langle m_F^2 \rangle_L^2}, \quad (6)$$

где E — энергия, и m_F — намагниченность системы с линейным размером L . Выражения (5) и (6) позволяют определить температуру фазового перехода $T_l(p)$ с большой точностью в фазовых переходах соответственно первого и второго рода. Методика определения температуры ФП этим методом рассмотрена в работах [15–17]. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо определить род фазового перехода в системе. Известно, что фазовые переходы второго рода характеризуются следующими отличительными особенностями [18]: усредненная величина $V_L(T, p)$

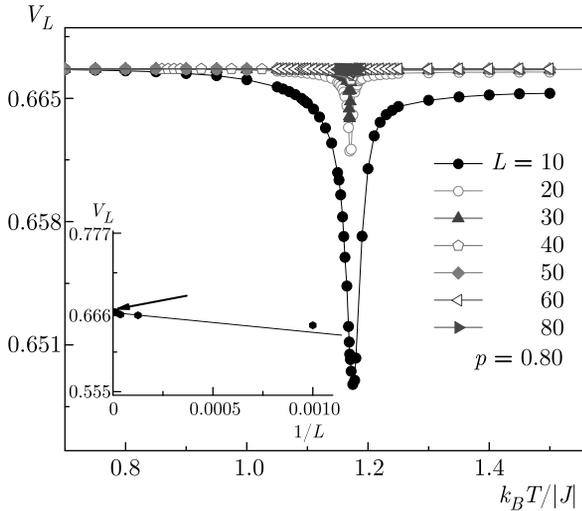


Рис. 4. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке

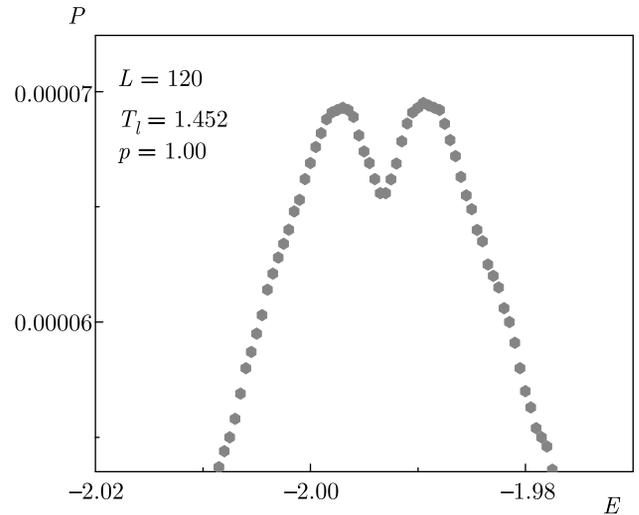


Рис. 6. Гистограмма распределении энергии для трехмерной чистой модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке при $p = 1.0$ и $T = T_l$

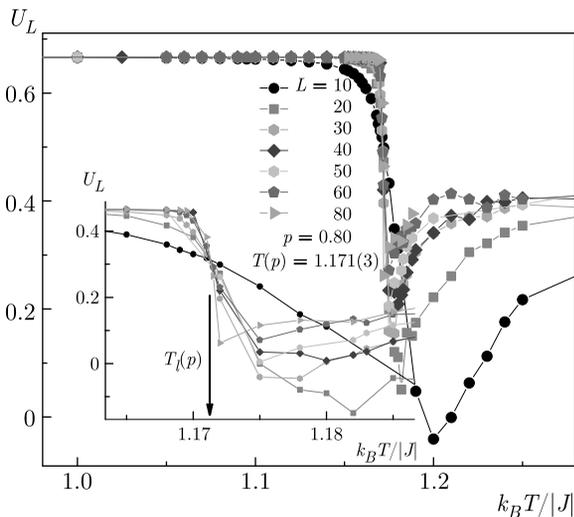


Рис. 5. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке

стремится к тривиальному значению согласно выражению

$$V_L(T, p) = V^* + bL^{-d} \quad (7)$$

при $L \rightarrow \infty$ и $T = T_l(L)$, где $V^* = 2/3$.

Кроме того, в случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ имеют четко выраженную точку пересечения. Характерные зависимости кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ и $U_L(T, p)$ от температуры для систем с разными линейными размерами при $p = 0.80$ приведены соответственно на рис. 4 и 5. Заметим, что на вставке к рис. 4 наглядно видно, что тривиальная величина $V^* \rightarrow 2/3$ в соответствии с выражением (7) при $L \rightarrow \infty$. Такое поведение, как отмечалось выше, характерно для ФП второго рода. Кроме того, на рис. 5 видно, что в критической области для $U_L(T, p)$ наблюдается четко выраженная точка пересечения и $U_L(T, p)$ не проявляет тенденции стремления к $-\infty$ при $L \rightarrow \infty$, что также свидетельствует о ФП второго рода. Определенные методом кумулянтов Биндера температуры фазовых переходов $T_l(p)$ в единицах $|J|/k_B$ равны: $T_l(1.0) = 1.452(1)$, $T_l(0.80) = 1.171(3)$.

Кроме кумулянтов Биндера для анализа рода ФП нами использовался и гистограммный анализ данных метода МК [19, 20]. В гистограммном анализе данных вероятность обнаружения системы со значением энергии U и параметром порядка m_F определяется выражением [19]

$$\overline{P(U, m_F)} = \frac{1}{Z(K)} W(U, m_F) \exp[KU], \quad (8)$$

где $W(U, m_F)$ — число конфигураций с энергией U и параметром порядка m_F , $Z(K)$ — функция распределения энергии всей системы и K — обратная температура.

Гистограммный анализ данных проведенный нами для чистой неразбавленной трехмерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина

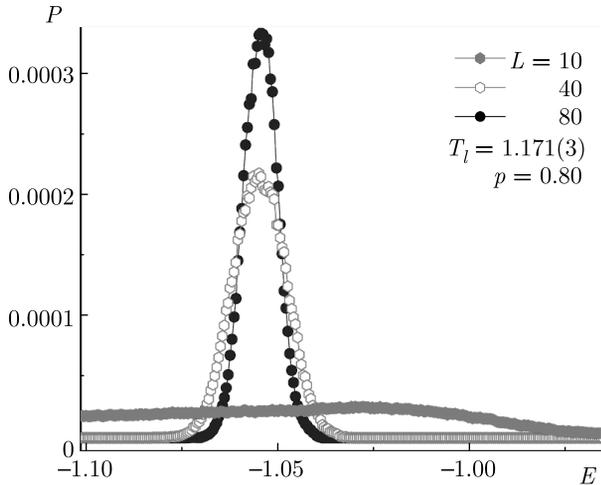


Рис. 7. Гистограмма распределении энергии для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке при $p = 0.80$ и $T = T_l$

$q = 5$ на простой кубической решетке также свидетельствует о наличии ФП первого рода. Это продемонстрировано на рис. 6. На этом рисунке представлена гистограмма распределения энергии вблизи точки фазового перехода T_l для систем с линейным размером $L = 120$. Как видно на рисунке, на зависимости вероятности P от энергии системы U для системы $L = 120$ наблюдаются два хорошо выраженных максимума. Наличие бимодальности в распределении энергии является достаточным признаком ФП первого рода. Соответствующий гистограммный анализ данных был проведен и для трехмерной слабо разбавленной ферромагнитной модели Поттса на простой кубической решетке при концентрации спинов $p = 0.80$, но бимодальность в гистограмме распределения энергии для этой модели обнаружить не удалось. В этом случае в зависимости вероятности P от энергии системы U с достаточно большим линейным размером L наблюдается один хорошо выраженный максимум (см. рис. 7), что является характерным признаком для ФП второго рода.

Таким образом, наши данные свидетельствуют о том, что в трехмерной ферромагнитной модели Поттса с $q = 5$ в отсутствие структурного беспорядка происходит ФП первого рода в соответствии с предсказаниями аналитических теорий [21]. Внешение слабого замороженного беспорядка ($c = 0.20$, $c = 1 - p$) в виде немагнитных примесей каноническим способом в рассматриваемую модель приводит к ФП второго рода. Отметим, что в работах [13, 22]

такая смена ФП наблюдалась и для спиновых систем, в которых беспорядок внесен в виде случайных связей.

Определение точного значения трикритической точки p_c , отделяющей на фазовой диаграмме область ФП первого рода от ФП второго рода для трехмерной модели Поттса с $q = 5$ на простой кубической решетке, — предмет отдельного рассмотрения. Точная величина трикритической точки имеет большое значение при создании различных новых магнитных материалов, а также при изучении влияния замороженного беспорядка на различные термодинамические характеристики.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе с соблюдением единой методики исследовано влияние слабого замороженного беспорядка, реализованного в виде замороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в трехмерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке. Данные полученные в результате наших исследований свидетельствуют о том, что:

1. В трехмерной ферромагнитной модели Поттса с $q = 5$ на простой кубической решетке наблюдается фазовый переход первого рода в соответствии с предсказаниями аналитических теорий [21].

2. Внешение слабого беспорядка ($p = 0.80$) в виде замороженных немагнитных примесей в рассматриваемую модель приводит к фазовым переходам второго рода.

Финансирование. Исследование выполнено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 19-02-00153.

ЛИТЕРАТУРА

1. O. Vasilyev, B. Berche, M. Dudka, and Yu. Holovatch, Phys. Rev. E **92**, 042118 (2015).
2. A. V. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
3. Vik. Dotsenko and Vl. Dotsenko, Adv. Phys. **32**, 129 (1983).
4. A. Bailly-Reyre and H. T. Diep, Physics Procedia **75**, 557 (2015).
5. J. Cardy and J. L. Jacobsen, Phys. Rev. Lett. **79**, 4063 (1997).

6. G. S. Iannacchione, G. P. Crawford, S. Zumer et al., *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2595 (1993).
7. M. Aizenman and J. Wehr, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2503 (1989).
8. C. J. Q. Yin, B. Zheng, and S. Trimper, *Phys. Rev. E* **72**, 036120 (2001).
9. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, *Письма в ЖЭТФ* **99**, 618 (2014).
10. А. Б. Бабаев, А. К. Муртазаев, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 363 (2017).
11. U. Wolff, *Phys. Lett.* **62**, 361 (1989).
12. P. Peczac, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **43**, 6087 (1991).
13. C. Chatelain and B. Berche, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1670 (1998).
14. K. Eichhorn and K. Binder, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 5209 (1996).
15. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, *ФТТ* **61**, 1342 (2019).
16. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, *ФНТ* **46**, 818 (2020).
17. A. K. Murtazaev and A. B. Babaev, *Mater. Lett.* **258**, 126771 (2020).
18. D. Loison and K. D. Schotte, *Eur. Phys. J. B* **5**, 735 (1998).
19. N. A. Alves, B. A. Berg, and R. Villanova, *Phys. Rev. B* **41**, 383 (1990).
20. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Атаева, *ФТТ* **62**, 1088 (2020).
21. F. Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
22. J. Q. Yin, B. Zheng, V. V. Prudnikov, and S. Trimper, *Eur. Phys. J. B* **49**, 195 (2006).

ВРАЩАТЕЛЬНАЯ ДИПОЛЬНАЯ ПЛАЗМОННАЯ МОДА В НАНОРАЗМЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ЧАСТИЦАХ

Л. Г. Герчиков^{a}, А. Н. Ипатов^{a,b**}*

*^a Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
195251, Санкт-Петербург, Россия*

*^b Академический университет им. Ж. И. Алфёрова
195220, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 21 декабря 2020 г.,
после переработки 18 января 2021 г.
Принята к публикации 18 января 2021 г.

Исследован новый тип плазмонной моды в наноразмерных полупроводниковых кристаллах. В оптических спектрах фотолегированных нанокристаллов преобладает дипольный плазмонный резонанс вращательного типа, при котором возбуждаются только угловые степени свободы. Такая коллективная мода принципиально отличается от поверхностных плазмонных резонансов в типичных спектрах фотопоглощения металлических нанокластеров и может быть описана как возбужденное состояние в конечной ферми-системе, так и как вращательное движение квантовой жидкости. Было продемонстрировано, что подобные дипольные колебания являются гармоническими, что позволяет их определить как плазмонное резонансное возбуждение.

DOI: 10.31857/S0044451021060067

1. ВВЕДЕНИЕ

Интенсивное развитие нанотехнологий в течение последних десятилетий требует создания новых материалов, физические и химические свойства которых отличаются от свойств соответствующих объемных компонентов. Квантовая плазмоника в настоящее время является быстро развивающейся областью исследований, которая включает в себя изучение квантовых свойств света и механизмов его взаимодействия с материей на наноразмерном уровне [1–3]. Оптические свойства наноразмерных проводящих частиц определяются наличием локализованных поверхностных плазмонных резонансов (LSPR) в их спектрах возбужденных состояний [2, 4–8]. Для металлических наночастиц характерны высокие плотности носителей заряда, типичные значения которых могут варьироваться в пределах 10^{22} – 10^{23} см⁻³ [9, 10]. Таким образом, частоты плазмонных резонансов, наблюдаемые в оптических спектрах микроскопических металлических клас-

теров [11–13], лежат в ультрафиолетовой области спектра для нанокластеров из атомов серебра и золота [5, 8, 14–19]. Сильно легированные полупроводниковые нанокристаллы представляют собой новый многообещающий тип материалов с плазмонным резонансом в оптическом спектре [4, 5, 9, 14–17, 20, 21]. При этом частоты их плазмонных мод, как правило, лежат намного ниже по сравнению с металлическими наночастицами [22]. Главное достоинство полупроводниковых нанокристаллов состоит в том, что концентрация носителей в них может варьироваться в широком диапазоне. В то время как концентрация носителей в металлических проводниках фиксирована, в полупроводниковых образцах в результате легирования она может изменяться в пределах 10^{16} – 10^{22} см⁻³ [22–28]. В результате появляется возможность изменять частоты плазмонных резонансов в оптических спектрах сильно легированных полупроводниковых нанокристаллов в широком диапазоне частот от терагерцевой до инфракрасной и видимой части спектра [22, 23, 29–32] путем изменения параметров как материала самого нанокристалла, так и окружающей его среды [20, 23, 31, 33–37]. Для динамических свойств легированных полупроводниковых наночастиц характерен переход от режима размерного квантования к классическому ре-

* E-mail: lgerchikov@mail.ru

** E-mail: andrei_ipatov@mail.ru

жиму плазмонных колебаний [25]. При этом с увеличением числа свободных носителей заряда в нанокластерах в их спектрах возбужденных состояний наблюдается переход от чисто квантовомеханических одночастичных возбуждений к классическим коллективным плазмонным колебаниям электронной системы [17, 25]. В случае металлических кластеров классическая теория Ми [38] адекватно описывает оптические свойства наночастиц при значениях их радиуса превышающих 10 нм [17, 26]. При этом выдавливание (spill-out) части электронной плотности за пределы ионного остова у кластеров, состоящих из атомов щелочных металлов, приводит к смещению резонансной линии в область более низких частот по мере уменьшения размера частицы, что сопровождается колебаниями ее положения, обусловленными квантовыми оболочечными эффектами, наблюдаемыми у металлических кластеров с числом атомов меньше ста [6]. У микроскопических кластеров благородных металлов поляризация d -оболочек оказывает дополнительное влияние на оптические свойства частиц, но при этом качественно картина остается неизменной [7, 8]. Для систем достаточно большого размера асимптотическое значение частоты дипольного плазмонного резонанса может быть оценено в рамках классической модели Друде с использованием феноменологической диэлектрической функции объемного металла [19]. Напротив, для наноразмерных металлических кластеров эффекты, связанные с размерным квантованием в системе электронов проводимости, оказывают заметное влияние на оптические свойства частиц. В связи с этим описание оптического отклика полупроводниковых нанокристаллов на основе квантовомеханического и классического подходов приводит к существенно различным результатам [5, 24, 25, 27, 39], но, в отличие от металлических наночастиц, в полупроводниках переход от режима размерного квантования к режиму классических плазмонных колебаний электронной системы может быть осуществлен как путем варьирования числа носителей заряда, так и путем изменения размера нанокристалла. Следует особо отметить, что положение резонансной линии в оптических спектрах наночастиц и ее форма определяется не только концентрацией носителей, но также и типом легирования, который может быть условно определен как объемный (bulk-like) или поверхностный (surface-like) [25, 30]. В первом случае заряд свободных носителей распределен по всему объему кристалла, где нейтрализован зарядом легирующих примесей, а во втором случае свободные носите-

ли инжектированы в объем полупроводниковой наночастицы донорами/акцепторами, расположенными на ее поверхности. Пример поверхностного механизма легирования подробно обсуждался в работах [24, 40], где был экспериментально исследован процесс фотолегирования нанокристаллов ZnO, помещенных в раствор толуола.

При квантовомеханическом подходе описание оптических свойств металлических кластеров обычно базируется на сферической модели желе, где потенциалы отдельных атомов заменяются потенциалом равномерно заряженного ионного остова, в котором двигаются делокализованные электроны проводимости [13, 41, 42]. В адиабатическом приближении [43, 44] поверхностный дипольный плазмон может быть описан как гармонические колебания центра масс электронного облака в параболическом потенциале положительно заряженного кора. Учет взаимодействия гармонической коллективной моды с одночастичными возбуждениями электронной системы приводит к фрагментации резонансной линии и ее существенному сдвигу в область более низких частот по отношению к ее положению, определенному согласно классической теории [43]. Аналогичная ситуация наблюдается в случае полупроводниковых нанокристаллов, легированных по объемному (bulk-like) типу [25, 29, 30, 33], когда распределение плотности легирующих примесей также может быть описано как равномерно заряженный остов. В обоих случаях поверхностный плазмон представляет собой колебания системы делокализованных электронов как единого целого относительно центра положительного кора в направлении нормали к его поверхности.

В случае нанокристаллов с поверхностным типом легирования ситуация оказывается иной. Свободные носители заряда в полупроводниковых наночастицах формируют структуру электронных оболочек [45, 46] вне зависимости от типа легирования. Однако, как было продемонстрировано в работе [47], плазмонный резонанс в фотолегированных нанокристаллах принципиально отличается от поверхностной дипольной моды в металлических кластерах или объемно-легированных полупроводниковых наночастицах, поскольку при поверхностном легировании отсутствует эффективная возвращающая сила, действующая на делокализованные электроны со стороны положительно заряженного остова. В результате кулоновское отталкивание между свободными электронами смещает их по направлению к поверхности системы, как это было показано в статье [25] при анализе распределения элект-

тронной плотности основного состояния нанокристаллов CdSe. Этот же эффект был наглядно продемонстрирован авторами работы [47], где представлен теоретический анализ экспериментальных спектров фотопоглощения фотолегированных нанокристаллов ZnO. Было показано, что особенности электронной конфигурации, обусловленные поверхностным механизмом легирования, приводят к тому, что при формировании дипольной коллективной моды в результате взаимодействия с внешним электромагнитным полем возбуждаются только угловые степени свободы, в то время как движение электронов в радиальном направлении не включается. В отличие от поверхностных плазмонных возбуждений в металлических кластерах и объемно-легированных полупроводниковых наночастицах, где колебание свободных зарядов носит трансляционный характер, электроны в поверхностно-легированных нанокристаллах ZnO осциллируют тангенциально по отношению к границе системы внутри сравнительно тонкого сферического слоя подобно дипольным плазмонным колебаниям в фуллеренах [48–50].

В данной работе мы представляем подробный теоретический анализ оптических свойств фотолегированных полупроводниковых наночастиц, результаты экспериментальных измерений которых приведены в статьях [24, 40]. Основной целью нашего исследования является подтверждение того, что резонансные моды в спектрах фотопоглощения нанокристаллов ZnO с поверхностным механизмом легирования являются поверхностными плазмонными резонансами вращательного типа в отличие от «трансляционных» коллективных возбуждений в металлических кластерах и объемно-легированных наноразмерных полупроводниковых системах. Наш подход основан на самосогласованном квантовомеханическом описании многочастичных возбуждений в системе электронов проводимости в рамках приближения случайных фаз (Random Phase Approximation, RPA) с локальным обменным взаимодействием (RPAX) [51, 52]. Мы показываем, что распределение электронной плотности в поверхностно-легированных полупроводниковых нанокристаллах при увеличении числа электронов имеет тенденцию к формированию узкой сферической электронной оболочки вблизи поверхности наночастицы, а не к однородному распределению заряда, характерному для металлических кластеров. С этой точки зрения следует ожидать, что фотолегированные сферически-симметричные полупроводниковые нанокристаллы при взаимодействии с внешним электромагнитным

полем будут проявлять свойства более характерные для фуллеренов C_{60} [48–50], чем для металлических кластеров [11–13] или объемно-легированных систем [25, 29, 30, 33]. В нашей работе мы демонстрируем, что из-за специфической оболочечной структуры основного состояния фотолегированных полупроводниковых наночастиц их оптические спектры для систем с числом свободных носителей N до 100–150 могут быть адекватно описаны в рамках простой двухуровневой модели. В этой модели волновая функция возбужденного состояния дипольной плазмонной моды строится на основе только одной электронно-дырочной пары, соответствующей внутризонному переходу между вырожденным высшим занятым электронным уровнем (Highest Occupied Molecular Orbital, HOMO) и низшим свободным уровнем (Lowest Unoccupied Molecular Orbital, LUMO), в то время как многочастичные эффекты учитываются как корреляции в основном состоянии. При этом частота плазмонного резонанса, полученная на основе двухуровневой модели, оказалась в хорошем согласии с результатами вычислений в рамках RPAX с учетом полного базиса одночастичных волновых функций.

Анализ радиального распределения плотности дипольных переходов, соответствующей различным линиям в рассчитанных спектрах фотопоглощения нанокристаллов ZnO подтвердил тот факт, что коллективная плазмонная мода включает только угловое движение электронной плотности, в то время как радиальные осцилляции возбуждаются при переходах между одночастичными состояниями, причем эти степени свободы практически не смешиваются между собой. Предсказания разработанной теории хорошо согласуются с результатами экспериментальных измерений спектров фотопоглощения сильно n -легированных нанокристаллов ZnO [24, 40], в частности, хорошо описывают зависимость положения резонансного пика от размера системы. В данной работе мы показываем, что при малых размерах частиц наблюдаемая зависимость обусловлена двумя квантовыми эффектами, а именно, отталкиванием электронов от границы нанокристалла, что приводит к эффективному уменьшению среднего радиуса электронной системы, а также влиянием квантового давления. С увеличением размера кластеров роль квантовых эффектов становится незначительной, и частота резонансного пика плавно смещается к классической частоте плазмонного резонанса в заряженном тонком сферическом слое. Мы демонстрируем, что, поскольку вращательное плазмонное возбуждение включает только угловые сте-

пени свободы, сила его осциллятора содержит в себе только $2/3$ от правила сумм в отличие от «традиционного» плазмона Ми, наблюдаемого в металлических кластерах [13]. По этой же причине квадрат частоты вращательного плазмона в классическом пределе составляет $2/3$ от квадрата соответствующей частоты Ми. Оставшаяся часть дипольных возбуждений, которые включают в себя радикальные колебания электронной плотности, практически не коррелирует с коллективной модой и может быть описана в рамках одночастичного приближения.

В представляемой статье также предлагается альтернативный подход к описанию вращательных плазмонных мод в полупроводниковых нанокристаллах, основанный на гидродинамической модели [6, 53, 54]. Данная модель описывает плазмонное возбуждение как тангенциальное движение квантовой жидкости в тонком сферическом слое и наглядно демонстрирует гармонический характер колебания плотности заряда при возбуждении вращательного плазмона. Нами показано, что значение частоты плазмонного резонанса, предсказанное на основе этой теории, полностью согласуется с результатом, полученным в результате решения матричного уравнения РРАХ, соответствующего двухуровневой квантовомеханической модели. Важно отметить, что гидродинамическая модель для фермижидкости позволяет выйти за рамки приближения линейного отклика, учитывающего одновременное возбуждение только одной электрон-дырочной пары. Исследование динамики электронных осцилляций показало, что вращательный плазмон может рассматриваться как гармоническая коллективная колебательная мода при условии, что число участвующих электронов, в частности частиц на уровне Ферми, достаточно велико. Высокий уровень фотолегирования, обеспечивающий большое число носителей в наночастице, гарантирует, что все электроны делокализованы. С другой стороны, необходимые условия для возникновения вращательной резонансной моды не зависят от электронной концентрации, а определяются только размерами нанокристалла, радиус которого должен превышать эффективный боровский радиус рассматриваемой системы.

2. ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ

В своем исследовании мы рассматриваем n -легированные полупроводниковые нанокристаллы ZnO в окружении толуола, технология фотоле-

гирования которых обсуждалась в работе [24]. Свободные электроны в зоне проводимости локализованы внутри объема наночастицы, в то время как дырки, образовавшиеся вместе с электронами в процессе фотолегирования захватываются молекулами этанола EtOH в окружающем растворе толуола. Далее окисление этанола высвобождает протоны H^+ , которые на поверхности нанокристалла образуют заряженный слой и компенсируют отрицательный заряд электронов проводимости в его объеме. Радиус исследуемых наночастиц, R , варьируется в диапазоне от 2.4 до 6.0 нм в зависимости от числа свободных электронов проводимости, N , которое, в свою очередь, меняется в пределах от 10 до 130. При проведении численных расчетов учитывалось значение средней концентрации электронов из работы [24], $n_e = 3N/4\pi R^3 = 1.4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, т. е. бралась максимальная концентрация электронов, которая достигалась при использовании метода фотолегирования [24]. При этом соответствующий эффективный радиус Вигнера–Зейца, т. е. среднее межэлектронное расстояние, оказался равным $r_s = (3/4\pi n_e)^{1/3} = 1.2 \text{ нм}$. Поскольку целью данной работы является теоретическое исследование коллективной динамики электронной системы нанокристаллов, мы используем ряд упрощений в описании движения отдельных электронов. Так, мы используем приближение огибающей функции (Envelope Function Approximation, EFA) [55, 56], применимость которого оправдано большим радиусом наночастиц по сравнению с постоянной решетки ZnO. В этом приближении мы пренебрегаем непараболическостью и анизотропией зоны проводимости ZnO [57] и полагаем дисперсию электронов соответствующей изотропной и параболической зоне с эффективной массой $m_e = 0.3m_0$ [57], где m_0 — масса свободного электрона. По этой же причине мы описываем нанокристаллы ZnO как сферически-симметричные системы, т. е. наночастицы со сферической поверхностью, внутри которой делокализованные электроны в основном состоянии образуют систему сферически-симметричных оболочек. Кроме того, мы заменяем N протонов на поверхности нанокристалла однородным положительно заряженным сферическим слоем, который не создает напряженности электрического поля внутри объема системы. В результате полный гамильтониан представляет собой просто гамильтониан N свободных электронов, взаимодействующих друг с другом посредством кулоновского потенциала V , а также с потенциалом V_i положительных зарядов на поверхности,

$$\hat{H} = \sum_a^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_a^2}{2m_e} + \frac{1}{2} \sum_{a,b}^N V(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) + \sum_a^N V_i(r_a). \quad (1)$$

Поскольку электроны жестко ограничены в своем движении внутри объема наночастицы границей зоны проводимости вблизи поверхности [17], будем описывать $V_i(r)$ как сферическую потенциальную яму радиуса R с бесконечно высокими стенками. При этом условии радиальные электронные волновые функции равны нулю на поверхности для $r_a = R$. Парное кулоновское взаимодействие между электронами в точках \mathbf{r}_a и \mathbf{r}_b экранируется в результате поляризации как собственно самого материала ZnO («1»), так и окружающей среды («2»), так что мультипольное разложение потенциала межчастичного взаимодействия при $r_a, r_b < R$ может быть записано в виде [58, 59]

$$V(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = \frac{4\pi e^2}{\epsilon_1} \sum_{LM} \left(\frac{r_{<}^L}{r_{>}^{L+1}} + \frac{(\epsilon_1 - \epsilon_2)(L+1)(r_a r_b)^L}{(L\epsilon_1 + (L+1)\epsilon_2)R^{2L+1}} \right) \frac{Y_{LM}(\mathbf{n}_a)Y_{LM}^*(\mathbf{n}_b)}{2L+1}, \quad (2)$$

где $r_{>}, <$ обозначают соответственно наибольший и наименьший из радиусов $r_{a,b}$. При проведении численных расчетов мы полагали диэлектрические константы ZnO и толуола равными их значениям для соответствующих объемных материалов, $\epsilon_1 = 3.7$ и $\epsilon_2 = 2.25$ [24]. С этими параметрами эффективный борковский радиус, $a_0 = \hbar^2 \epsilon_1 / m_e e^2 = 0.65$ нм, оказывается существенно меньше, чем радиус исследуемых наночастиц R .

Используемое в работе описание основного состояния наночастиц ZnO базируется на приближении локальной плотности (Local Density Approximation, LDA), в рамках которого одночастичные волновые функции $\psi_a(\mathbf{r})$ удовлетворяют уравнениям Коуна-Шема,

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} + V_{mf}(\mathbf{r}) \right) \psi_a(\mathbf{r}) = \epsilon_a \psi_a(\mathbf{r}). \quad (3)$$

Здесь потенциал среднего поля $V_{mf}(\mathbf{r})$ представляет собой сумму «прямого» кулоновского потенциала, $V_D(\mathbf{r})$, и локального обменного потенциала в приближении Дирака-Слэтера [60], $V_x(\mathbf{r})$,

$$V_{mf}(\mathbf{r}) = V_D(\mathbf{r}) + V_x(\mathbf{r}), \quad (4)$$

где

$$V_D(\mathbf{r}) = \int V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (5)$$

$$V_x(\mathbf{r}) = -(e^2 / \epsilon_1) (3\rho(\mathbf{r}) / \pi)^{1/3} \quad (6)$$

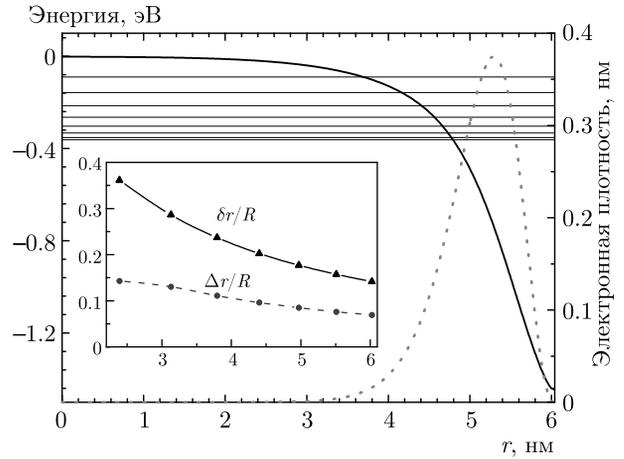


Рис. 1. Радиальный профиль потенциала среднего поля $V_{mf}(r)$ сферического нанокристалла ZnO, фотолегированного 128 электронами — сплошная черная кривая; одночастичные уровни энергии основного состояния — тонкие черные горизонтальные линии; радиальная зависимость электронной плотности основного состояния — красная пунктирная кривая. На вставке: зависимости отношения ширины электронного слоя δr (черные треугольники) и смещения среднего электронного радиуса Δr (синие кружки) к радиусу R от размера наночастицы

и $\rho(\mathbf{r}) = \sum_a |\psi_a(\mathbf{r})|^2$ — объемная концентрация электронов.

Для сферически-симметричных систем с замкнутыми электронными оболочками и изотропными угловыми зависимостями $\rho(\mathbf{r})$ и $V_{mf}(\mathbf{r})$ совокупный индекс a обозначает $a = (n, l, m, \sigma)$, где n — радиальное квантовое число, l и m — угловой момент и его проекция, σ — проекция спина, а сами волновые функции записываются как произведение радиальной, угловой и спиновой компонент [61],

$$\psi_{nlm\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{P_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_{\sigma}. \quad (7)$$

Результаты проведенных численных расчетов для основного состояния нанокристалла ZnO с радиусом $R = 6$ нм и числом электронов проводимости $N = 128$ представлены на рис. 1. Тонкими черными горизонтальными линиями отмечены положения одночастичных уровней энергии ϵ_a , сплошная черная кривая показывает радиальную зависимость потенциала среднего поля $V_{mf}(r)$. Электронная плотность основного состояния системы $\rho(r)$ изображена красной пунктирной линией. Важно отметить, что электронные конфигурации фотолегированных наночастиц ZnO отличаются порядком заполнения электронных оболочек от конфигураций как металлических нанокластеров, так и объемно-легирован-

ных полупроводниковых нанокристаллов. На рис. 1 видно, что электронная плотность имеет узкое радиальное распределение, смещенное по направлению к поверхности из-за кулоновского межэлектронного отталкивания. Таким образом, формируется распределение плотности заряда в виде полого сферического слоя, а не близкого к однородному радиального распределения делокализованных электронов, характерного для металлических наночастиц [6, 10, 11]. При этом, в то время как электронная плотность частично выталкивается за пределы ионного остова металлических кластеров, в случае нанокристаллов ZnO электроны «вталкиваются» внутрь поверхности наночастицы. На вставке рис. 1 приведено отношение смещения среднего электронного радиуса $\Delta r = R - \langle r \rangle$ к радиусу нанокристалла R в зависимости от его размера. Также представлено отношение эффективной ширины распределения электронной плотности к радиусу наночастицы $\delta r/R$, где δr определена как дисперсия электронного радиуса $\delta r = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2}$. Легко видеть, что δr по порядку величины меньше, чем R , и их соотношение уменьшается по мере увеличения размера системы.

Смещение распределения плотности заряда в направлении поверхности нанокристалла приводит к важным последствиям для электронной конфигурации основного состояния. Поскольку электроны оказываются локализованными внутри узкого сферического слоя шириной $\delta r \ll R$, их радиальное движение квантуется. Энергия квантования может быть оценена как $E_r = \hbar^2/2m_e\delta r^2$. Для системы, содержащей $N = 128$ электронов, $R = 6$ нм и $\delta r = 0.4$ нм, энергия радиального квантования составляет $E_r \simeq 0.74$ эВ, что по порядку величины близко к разности энергий 1.08 эВ между нижним одночастичным электронным уровнем на рис. 1 и дном потенциальной ямы среднего поля. Напротив, движение электронов в тангенциальном направлении вдоль сферического заряженного слоя происходит существенно медленнее, поскольку его пространственный масштаб $2\pi R$ намного больше, чем δr . Кинетическая энергия этого движения равна $\hbar^2 l(l+1)/m_e(r)^2$, т. е. равна энергии вращательного движения с постоянным электронным угловым моментом l , что существенно меньше энергии радиального движения E_r . Это хорошо видно на рис. 1, где разности энергий между электронными уровнями равны разности энергий их углового движения. По величине эти интервалы энергии много меньше, чем расстояние между первым электронным уровнем с $l = 0$ и дном потенциальной ямы V_{mf} .

Эффективное разделение быстрого и жестко квантованного радиального движения и сравнительно медленного углового определяет специфику свойств электронной системы фотолегированных наночастиц ZnO, в частности, особенности ее отклика на внешнее электромагнитное поле. При взаимодействии с внешним полем жестко квантованная радиальная степень свободы остается замороженной и оптический отклик системы электронов определяется возмущением существенно более «мягкого» углового движения. В результате такого разделения радиальной и угловой степеней свободы электронная конфигурация основного состояния формируется из одночастичных компонент с наименьшими значениями радиальных квантовых чисел $n = 1$, соответствующими бескорневым радиальным волновым функциям $P_{1,l}(r)$. Таким образом, одночастичные уровни с волновыми функциями, имеющими один или более корней у радиальной компоненты, в основном состоянии остаются не заселенными. Этот факт был проверен в результате численных расчетов, проведенных для систем, содержащих число электронов N в пределах от 8 до 128, путем сравнения энергий всех возможных конфигураций с замкнутыми электронными оболочками. Было подтверждено, что низшей энергии основного состояния соответствует последовательность заполнения одночастичных уровней $1s^2, 1p^6, 1d^{10} \dots 1l_{max}^{2(l_{max}+1)}$. Эта электронная структура соответствует «магическим числам» для систем с замкнутыми оболочками,

$$N = 2(l_{max} + 1)^2, \quad (8)$$

где l_{max} — угловой момент высшей заполненной орбитали (НОМО). Бескорневые радиальные волновые функции этих заполненных уровней практически идентичны, поскольку центробежная сила, действующая на эти состояния, оказывается намного меньше силы кулоновского взаимодействия. Силу кулоновского отталкивания можно оценить, исходя из значения напряженности электрического поля вблизи поверхности нанокристалла,

$$eE \simeq e^2 N / \epsilon_1 R^2.$$

В свою очередь, центробежная сила у поверхности оценивается как

$$F_l \simeq \hbar^2 l_{max}(l_{max} + 1) / (m_e R^3).$$

При этом угловое и радиальное движение не оказывают влияния друг на друга при условии $eE \gg F_l$, которое выполняется для всех заполненных орбиталей, включая высшее по энергии состояние (НОМО) с $l = l_{max}$, если

$$\frac{Fl_{max}}{eE} \simeq \frac{\hbar^2 l_{max}(l_{max} + 1)\epsilon_1}{m_e e^2 NR} \simeq \frac{a_0}{2R} \ll 1. \quad (9)$$

Здесь было использовано соотношение (8). Важно отметить, что условие (9) выполняется независимо от числа электронов N в системе. Единственное требование состоит в том, чтобы размер наночастицы был больше эффективного борковского радиуса a_0 , что выполняется для всех рассматриваемых в работе наночастиц. Таким образом, радиальная и угловая степени свободы оказываются эффективно разделены, и спектр заполненных одночастичных уровней ϵ_a (3) может быть приближенно описан как спектр квантового ротатора,

$$\epsilon_{1,l} = \epsilon_{1s} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e \langle r \rangle^2}. \quad (10)$$

При этом, поскольку ширина радиального распределения плотности электронного заряда сравнительно мала, $\delta r \ll R$, приближение

$$\langle 1/r^2 \rangle = 4\pi \int \rho(r) dr / N \simeq 1/\langle r^2 \rangle \simeq 1/\langle r \rangle^2$$

выполняется с высокой точностью. Чтобы продемонстрировать, насколько точно выполняется основанная на модели квантового ротатора оценка (10), на рис. 2 представлен график зависимости энергий $\epsilon_{1,l}$ от углового момента l , полученный в соответствии с приближением (10) исходя из значений $\langle r \rangle$ для системы с $N = 128$. На этом же графике показаны точные положения заполненных уровней энергии, рассчитанных путем численного решения системы уравнений (3) для $N = 128$.

Проведенные численные расчеты показали, что радиальные компоненты волновых функций низших возбужденных состояний также не имеют корней. Таким образом, при дипольном возбуждении системы невзаимодействующих частиц, энергетический спектр которых описывается соотношением (10), возникает «дырка» (вакансия) на уровне НОМО и «частица» на низшей свободной орбитали (LUMO) с угловым моментом $l_p = l_{max} + 1$. Энергия соответствующего одночастичного перехода равна

$$\Delta = (\epsilon_p - \epsilon_h) = \frac{\hbar^2(l_{max} + 1)}{m_e \langle r \rangle^2}. \quad (11)$$

На рис. 2 положение уровня LUMO показано светлым квадратом, а переход НОМО-LUMO отмечен стрелками.

Помимо численных расчетов электронной структуры основного состояния нами был проведен ее качественный анализ в рамках простой модели. Для

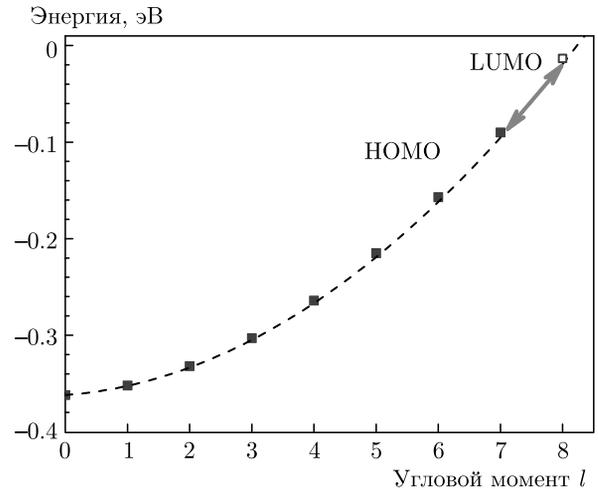


Рис. 2. Одночастичные уровни энергии основного состояния сферического нанокристалла ZnO со 128 электронами фотолегирования: заполненные уровни — синие квадраты, низшая незаполненная орбиталь (LUMO) — светлый квадрат, приближение (10) показано штриховой линией. Межуровневый переход НОМО-LUMO обозначен стрелками

этого потенциал среднего поля V_{mf} был представлен в виде треугольной потенциальной ямы с углом наклона равным напряженности электрического поля $E = eN/\epsilon_1 R^2$ вблизи поверхности нанокристалла. Как можно увидеть на рис. 1, радиальный профиль потенциала среднего поля V_{mf} имеет форму узкой треугольной ямы вблизи поверхности и выходит на постоянное значение в центре, где электронная плотность ничтожно мала. При этом вкладом обменного взаимодействия можно пренебречь, поскольку его учет только незначительно меняет значения δr и Δr , а также энергию квантования в радиальном направлении. В рамках этого приближения радиальная часть волновой функции может быть аппроксимирована функцией Эйри [61], убывающей до нуля на границе сферически-симметричной наночастицы,

$$P_{1,l}(r) = Ai((R-r)/r_0 - x_1), \quad x_1 \simeq 2.34.$$

Здесь $r_0 = r_s(a_0/2R)^{1/3}$ — радиальный масштаб модели, малость которого по отношению к радиусу кристалла,

$$r_0/R = (r_s/R)(a_0/2R)^{1/3} = (a_0/2NR)^{1/3},$$

обеспечивается как большим числом электронов в системе при рассматриваемом уровне легирования, так и выполнением условия (9). Из свойств функции Эйри следует, что

$$\Delta r = R - \langle r \rangle \simeq 1.46r_0, \quad \delta r = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2} \simeq 0.73r_0.$$

Основываясь на этой оценке, можно предсказать, что ширина радиального распределения электронного заряда δr должна быть в два раза меньше, чем смещение среднего электронного радиуса Δr от границы раздела, что согласуется с результатами численных расчетов, представленных на рис. 1. Что касается абсолютных величин для системы, содержащей $N = 128$ электронов, оценка дает значения $\delta r = 0.33$ нм и $\Delta r = 0.66$ нм, что также качественно согласуется с результатами вычислений $\delta r = 0.42$ нм и $\Delta r = 0.86$ нм, причем, как и ожидалось, оценочные данные оказываются несколько заниженными по сравнению с их точными значениями. Энергия размерного квантования радиального движения в рамках этой модели составляет $E_r = \hbar^2/2m_e\delta r^2 \simeq 1.2$ эВ. В случае постоянной концентрации электронов наблюдается очень слабая зависимость значений δr и Δr от размера системы, для всех рассмотренных наночастиц они различаются менее, чем на несколько процентов, и всегда оказываются существенно меньше радиуса нанокристалла R .

3. ГИДРОДИНАМИКА ФЕРМИ-ЖИДКОСТИ

В этом разделе дипольный отклик электронной системы легированной наночастицы на внешнее электромагнитное поле описывается в рамках модели, основанной на разделении радиального и углового движения частиц. Радиальное движение электронов квантовано с энергией размерного квантования $E_r \sim 1$ эВ, и взаимодействие с внешним полем практически не может его возбудить. В то же время угловое движение электронов может быть легко возбуждено, поскольку межуровневый интервал в ротационном спектре (10) много меньше, чем E_r . В связи с этим, описывая линейный отклик на слабое внешнее возмущение, мы рассматриваем только возбуждение угловой степени свободы. При этом радиальное движение электронов остается невозмущенным, т. е. соответствует низшему радиальному квантовому состоянию с $n = 1$. Напротив, в соответствии с (8), число заполненных ротационных уровней оказывается велико, если $N \gg 1$, и, следовательно, угловое движение электронов может быть описано в рамках полуклассического подхода. Подобные многочастичные системы с сильным размерным квантованием в одном направлении и свободным полуклассическим движением в перпендикулярных направлениях описываются как двумерная вырожденная ферми-жидкость [62–65]. Ее локальная энергия Фер-

ми $\varepsilon_F(\mathbf{n})$ определяется локальным значением двумерной электронной плотности, $\sigma(\mathbf{n})$,

$$\varepsilon_F(\mathbf{n}) = \frac{\hbar^2 \pi \sigma(\mathbf{n})}{m_e},$$

$$\sigma(\mathbf{n}) = \int_0^\infty \rho(\mathbf{r}) dr. \quad (12)$$

Для основного состояния электронная плотность равна $\sigma(\mathbf{n}) = \sigma_0 = N/4\pi\langle r \rangle^2$, и соответствующая энергия Ферми, ε_F , совпадает с максимальным значением ротационной энергии НОМО-орбитали в (10).

Плазмонные колебания в нанокристаллах ZnO могут быть описаны как волны плотности заряда в ферми-жидкости, локализованной внутри тонкой сферической оболочки. Данная модель предполагает, что квантовые состояния всех электронов, вовлеченных в плазмонные колебания, описываются одной и той же бескорневой радиальной волновой функцией $P_1(r)$, соответствующей низшему уровню радиального движения электронов. Здесь в обозначении волновой функции мы опускаем индекс орбитального квантового числа, поскольку все радиальные функции $P_{1,l}(r)$ очень близки. Таким образом, радиальное распределение электронной плотности оказывается «замороженным», $\rho(\mathbf{r}) \propto P_1(r)^2/r^2$, и плазмонные колебания электронной плотности $\rho(\mathbf{r})$ происходят только в тангенциальном направлении.

Малые отклонения объемной электронной плотности $\delta\rho(\mathbf{r})$ от равновесного распределения и соответствующие изменения двумерной электронной концентрации $\delta\sigma(\mathbf{n})$ могут быть записаны в виде

$$\delta\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) - \rho_0(r) = \rho_0(r)A(t) \cos\theta,$$

$$\delta\sigma(\mathbf{n}) = \sigma - \sigma_0 = \sigma_0 A(t) \cos\theta, \quad (13)$$

где

$$\rho_0(r) = \frac{N}{4\pi} \frac{P_1(r)^2}{r^2} \quad (14)$$

есть электронная плотность основного состояния, а $A(t) \propto e^{i\omega t}$ — безразмерная нормальная координата плазмонной степени свободы, в рамках представленной модели предполагаемая малой, $A \ll 1$.

Вектор смещения \mathbf{u} ферми-жидкости удовлетворяет соотношению

$$\delta\rho(\mathbf{r}) = \nabla \cdot (\rho_0(r)\mathbf{u}) = \rho_0(r)\nabla\mathbf{u}. \quad (15)$$

Последнее равенство верно, поскольку $\delta\rho(\mathbf{r}) \propto \rho_0(r)$. Таким образом, вектор \mathbf{u} параллелен поверхности оболочки, внутри которой движутся электроны, и, в соответствии с (13) и (15), оказывается равным

$$\mathbf{u} = \mathbf{e}_\theta \frac{rA(t)}{2} \sin\theta, \quad (16)$$

где \mathbf{e}_θ — единичный направляющий вектор в сферической системе координат.

Соотношения (13)–(16) показывают, что рассматриваемая ротационная плазменная мода принципиально отличается от дипольного поверхностного плазмона в однородных металлических наночастицах, где смещение электронной плотности, вызванное дипольными плазмонными колебаниями, является чисто трансляционным, $\mathbf{u} = A\mathbf{e}_z$. Таким образом, в металлических кластерах изменение плотности заряда внутри частицы $\delta\rho = 0$, а возвращающая сила возникает только из-за кулоновского взаимодействия электронного заряда $\delta\rho$, индуцированного на поверхности кластера, с полем положительного ионного остова. Напротив, согласно (13), вращательная плазменная мода имеет компрессионную природу. Помимо кулоновского взаимодействия появляется дополнительный вклад в возвращающую силу, связанный с изменением локальной электронной энергии Ферми при вариации двумерной плотности $\delta\sigma$ (13), т. е. в результате квантового давления. Ротационная кинетическая энергия на одну частицу в двумерной ферми-жидкости в два раза меньше, чем энергия Ферми $\varepsilon_F(\mathbf{n})$ (12). Следовательно, вариация полной ротационной электронной энергии во втором порядке по отношению к $A \ll 1$ равна

$$\delta E_{rot} = \frac{1}{2} \int \frac{\partial \varepsilon_F}{\partial \sigma} \delta \sigma^2 ds = \frac{\hbar^2 N^2 A(t)^2}{24 m_e \langle r \rangle^2}. \quad (17)$$

При этом вариация первого порядка для E_{rot} равна нулю, поскольку при варьировании должно сохраняться полное число электронов N .

Вариация кулоновской потенциальной энергии представляет собой сумму «прямой» и обменной составляющих,

$$\delta E_C = \frac{1}{2} \int \delta \rho(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \quad (18)$$

где

$$v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \frac{\delta V_x[\rho(\mathbf{r})]}{\delta \rho(\mathbf{r})} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (19)$$

Здесь $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ описывает парное «прямое» кулоновское взаимодействие (2), а $V_x(\mathbf{r})$ — локальный обменный потенциал (6). Вычисление вариации δE_C с использованием $\delta\rho$ (13) дает

$$\begin{aligned} \delta E_C &= \frac{1}{2} (K_D + K_x) A(t)^2, \\ K_D &= \left(\frac{4\pi}{3}\right)^2 \frac{e^2}{\varepsilon_1} \int_0^\infty \rho_0(r) \rho_0(r') \times \\ &\quad \times \left(\frac{r_{<}}{r_{>}^2} + \frac{2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) r r'}{(\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2) R^3}\right) r^2 r'^2 dr dr', \quad (20) \\ K_x &= \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty \rho_0^2(r) \frac{\delta V_x[\rho(\mathbf{r})]}{\delta \rho(\mathbf{r})} r^2 dr = \\ &= -\frac{e^2}{3\varepsilon_1} \left(\frac{8\pi}{3}\right)^{2/3} \int_0^\infty \rho_0^{4/3}(r) r^2 dr. \end{aligned}$$

Последний вклад в вариацию полной электронной энергии плазмонных колебаний связан с увеличением их кинетической энергии, T , за счет коллективного движения ферми-жидкости, описываемого уравнением (16),

$$T = \int \frac{m_e \rho_0 \dot{\mathbf{u}}^2}{2} dV = \frac{M \dot{A}^2}{2}, \quad (21)$$

где M — эффективная масса ротационной плазменной моды,

$$M = \frac{N m_e \langle r \rangle^2}{6}. \quad (22)$$

В результате суммирования всех вкладов в вариацию полной энергии плазмонных колебаний (21), (17), (20), эффективный гамильтониан, описывающий вращательную плазмонную моду, приобретает вид

$$H = \frac{M \dot{A}^2}{2} + \frac{M \omega_p^2 A^2}{2}, \quad (23)$$

$$\omega_p^2 = \frac{\hbar^2 N}{2(m_e \langle r \rangle^2)^2} + \frac{K_D + K_x}{M}, \quad (24)$$

где ω_p — частота плазмонного резонанса. Первый член в правой части уравнения (24) определяет вклад квантового давления. С учетом соотношения (8) для полного числа электронов он в точности совпадает с разностью одночастичных энергий Δ (11):

$$\Delta = \hbar \sqrt{\frac{\hbar^2 N}{2(m_e \langle r \rangle^2)^2}} = \frac{\hbar^2 (l_{max} + 1)}{m_e \langle r \rangle^2}. \quad (25)$$

Следует отметить, что $\hbar l_{max}/m_e \langle r \rangle = v_F$ есть скорость Ферми в тангенциальном направлении, а вклад квантового давления в плазмонную частоту $\Delta/\hbar \simeq v_F/R$ по порядку величины близок к частоте стоячей акустической волны в однородной сферической капле ферми-жидкости радиуса R . Второе слагаемое в правой части (24) описывает вклад

кулоновского взаимодействия, причем его «прямая» часть K_D/M всегда больше обменной K_x/M , поэтому при проведении качественного анализа мы будем пренебрегать последней. При фиксированной концентрации электронов n_e влияние квантового давления на величину ω_p^2 уменьшается согласно (11), поскольку $(\Delta/\hbar)^2 \propto 1/R^2$ с увеличением размера наночастицы, в то время как кулоновская составляющая стремится к некоторому асимптотическому пределу. Следовательно, в пределе больших R должно выполняться соотношение $\Delta \ll \omega_p$. Кроме того, при оценке значения K_D можно принять $r, r' = R$ в (20). В этом приближении асимптотическое значение плазменной частоты в больших наночастицах, определяемое формулами (20), (24), стремится к классической частоте дипольных плазменных колебания в тонком сферическом проводящем слое [66, 67],

$$\omega_{cl}^2 = \frac{K_D}{M} = \frac{2e^2 N}{(\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2)m_e R^3}. \quad (26)$$

Важно обратить внимание, что квадрат частоты ротационного плазмона ω_{cl}^2 составляет две трети от квадрата классической плазменной частоты M в однородной проводящей сферической капле радиуса R , содержащей N электронов. Этот результат является очевидным следствием того, что в рассматриваемом случае тонкого сферического слоя одна из электронных степеней свободы, а именно радиальное движение, исключена из участия в коллективных плазменных колебаниях.

В другом пределе очень маленьких нанокристаллов ожидается, что вклад квантового давления будет доминировать по отношению к кулоновскому взаимодействию и, в свою очередь, приводить к изменению характера коллективного движения. В классическом пределе больших систем движущей силой коллективных колебаний является кулоновское взаимодействие, в то время как в пределе сверхмалых наноразмерных частиц роль движущей силы выполняет квантовое давление, связанное с изменением кинетической энергии ферми-жидкости, локализованной в сферической квантовой яме. Этот предельный случай известен также как режим размерного квантования [68–70].

С целью контроля перехода от классического плазмонного предела к режиму размерного квантования введем параметр λ , равный отношению $(\Delta/\hbar)^2$ к ω_{cl}^2 . Для простоты сделаем замену значения среднего радиуса $\langle r \rangle$ в выражении для Δ (11) на R :

$$\lambda = \left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_{cl}} \right)^2 \simeq \frac{a_0}{4R} \left(1 + \frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \right) \simeq \frac{a_0}{2R}. \quad (27)$$

Следует отметить, что полученное значение λ совпадает с параметром, который определяет вращательный характер рассматриваемой плазмонной моды согласно условию (9). Таким образом, ротационная плазмонная мода по своей природе близка к классическому «кулоновскому» плазмону, в то время как квантовые эффекты корректируют ее резонансную частоту, и, как будет показано ниже, отвечают за ее зависимость от размера системы. Важно, что параметр λ не зависит от концентрации электронов в нанокристалле, а определяется только его размерами. Поскольку основной целью данной работы является исследование вращательного плазмона, в дальнейшем анализировать режим размерного квантования не будем и ограничимся предельным случаем $a_0 \ll R$.

Чтобы завершить обсуждение в этом разделе, определим условия, при которых вращательная плазмонная мода может считаться гармонической. Предложена модель, в рамках которой ротационный плазмон описывается гамильтонианом гармонического осциллятора (23) в предположении $A \ll 1$, т. е. пренебрегая членами более высоких порядков. В классическом случае амплитуда колебаний осциллятора A может принимать бесконечно малые значения, в то время как в рамках квантового подхода \hat{A} является оператором и его минимальное собственное значение $\langle 1|\hat{A}|0 \rangle$ соответствует переходу из основного состояния $|0 \rangle$ в первое возбужденное состояние $|1 \rangle$ гамильтониана \hat{H} . Плазмонные колебания являются гармоническими только в том случае, если эта амплитуда мала,

$$\langle 1|\hat{A}|0 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_p}} \simeq \left(\frac{18\lambda}{N^3} \right)^{1/4} \ll 1. \quad (28)$$

Во всех рассматриваемых системах параметр $\lambda \ll 1$ в соответствии с условием (9). Однако один только этот фактор еще не гарантирует выполнения требования (28) по причине наличия степени $1/4$. Более существенную роль играет множитель $N^{-3/4}$. Следовательно, чтобы плазмонные колебания могли считаться гармоническими, число электронов в легированном нанокристалле должно быть достаточно велико, $N \gg 1$.

4. СПЕКТР ДИПОЛЬНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В ПРИБЛИЖЕНИИ СЛУЧАЙНЫХ ФАЗ

В приближении случайных фаз [52, 71–73] коллективные дипольные возбуждения, включая плазменные моды, описываются в виде суперпозиции одночастичных возбуждений. Волновая функция ν -го возбужденного многочастичного состояния строится в виде линейной комбинации

$$|\Psi_\nu\rangle = \sum_{h<F,p>F} \left(X_{ph}^{(\nu)} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_h + Y_{ph}^{(\nu)} \hat{a}_h^\dagger \hat{a}_p \right) |\Psi_0\rangle, \quad (29)$$

где \hat{a}^\dagger и \hat{a} — одночастичные операторы рождения и уничтожения, F обозначает уровни Ферми системы, $|\Psi_0\rangle$ — основное состояние, а $|\Psi_\nu\rangle$ — возбужденное состояние с определенным угловым моментом L и его проекцией M . В нашей работе мы рассматриваем только дипольные возбуждения ($L = 1$), и в данном разделе приводится квантовомеханическое описание оптического спектра исследуемых наночастиц. Индексы h и p обозначают соответственно заполненные («дырки») и незаполненные («электроны») одночастичные уровни и пробегают весь базис одночастичных состояний. Коэффициенты $X_{ph}^{(\nu)}$ (амплитуды «вперед-во-времени») и $Y_{ph}^{(\nu)}$ (амплитуды «назад-во-времени»), характеризующие вклад конкретной электрон-дырочной пары (ph) в многочастичное состояние $|\Psi_\nu\rangle$, определяются путем решения матричного уравнения RPAХ [51, 73, 74] с локальным обменным взаимодействием,

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ -\mathbf{B}^* & -\mathbf{A}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X}^{(\nu)} \\ \mathbf{Y}^{(\nu)} \end{pmatrix} = \hbar\Omega_\nu \begin{pmatrix} \mathbf{X}^{(\nu)} \\ \mathbf{Y}^{(\nu)} \end{pmatrix}. \quad (30)$$

Положительные собственные числа $\hbar\Omega_\nu = E_\nu - E_0$ определяют энергии дипольных переходов между коррелированным основным состоянием $|\Psi_0\rangle$ и возбужденными состояниями $|\Psi_\nu\rangle$ (29). Элементы матриц \mathbf{A} и \mathbf{B} равны соответственно

$$\begin{aligned} A_{im,jn} &= \delta_{ij}\delta_{mn}(\epsilon_m - \epsilon_i) + \langle ij|v|mn\rangle, \\ B_{im,jn} &= \langle in|v|mj\rangle, \end{aligned} \quad (31)$$

где потенциал парного взаимодействия $v(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ определен в соответствии с (19), а собственные вектора удовлетворяют условию нормировки [71, 73],

$$\sum_{h<F,p>F} |X_{hp}^{(\nu)}|^2 - |Y_{hp}^{(\nu)}|^2 = 1. \quad (32)$$

Амплитуды $Y_{hp}^{(\nu)}$ учитывают парные электрон-дырочные корреляции в основном состоянии системы.

Дипольные силы осцилляторов f_ν соответствующих возбужденных состояний выражаются через амплитуды $\mathbf{X}^{(\nu)}$ и $\mathbf{Y}^{(\nu)}$, полученные в результате решения уравнения (30),

$$\begin{aligned} f_\nu &= \frac{2m_e D_\nu^2 \Omega_\nu}{\hbar}, \\ D_\nu &= \sum_{h<F,p>F} \left(X_{hp}^{(\nu)} d_{hp} + Y_{hp}^{(\nu)} d_{ph} \right), \end{aligned} \quad (33)$$

где $d_{im} = \langle i|z|m\rangle$ — одночастичные дипольные матричные элементы. Определенные таким образом силы осцилляторов должны удовлетворять правилу сумм Томаса–Райхе–Куна (TRK) [73],

$$\sum_\nu f_\nu = N, \quad (34)$$

что позволяет проводить оценку точности проведенных численных расчетов.

В общем случае, например, для наночастиц с равномерным распределением электронной плотности, таких как металлические кластеры или объемно-легированные полупроводниковые нанокристаллы, вклад в коллективное возбужденное состояние $|\Psi_\nu\rangle$ (29) дает большое число электрон-дырочных пар. При этом распределение сил осцилляторов в оптическом спектре не может быть описано аналитически, а получается только в результате численного решения уравнения (30). В рассматриваемом случае с поверхностно-легированными нанокристаллами ситуация иная. Благодаря разделению радиального и углового движения электронов в суперпозиции (29) появляется доминирующий член разложения, соответствующий дипольному переходу НОМО-LUMO с энергией возбуждения Δ (11). Действительно, наибольшие дипольные матричные элементы имеют переходы между одночастичными состояниями с одинаковыми радиальными квантовыми числами $n_p = n_h$ и, следовательно, с максимально перекрывающимися волновыми функциями, в то время, как матричные элементы между состояниями с $n_p \neq n_h$ по порядку величины оказываются меньше в $\delta r/R \ll 1$ раз. Таким образом, только состояния с низшими радиальными квантовыми числами $n_p = n_h = 1$ принимают участие в процессе фотопоглощения, и для дипольных возбуждений оказывается эффективно разрешенным только переход между НОМО и LUMO электронными уровнями с угловыми моментами соответственно l_{max} и $l_{max} + 1$. По этой причине корреляции между одночастичным возбуждением НОМО-LUMO и другими электрон-дырочными парами пренебрежимо малы. Кулоновские матричные элемен-

ты V в уравнении RPAX (30) достаточно велики только для электрон-дырочных пар с сильно перекрывающимися волновыми функциями, т.е. в нашем случае для состояний $n_p = n_h = 1$. По сравнению с ними кулоновские матричные элементы для пар с $n_p \neq n_h$ оказываются меньше в $\delta r/R \ll \ll 1$ раз. Этот факт позволяет при описании плазменной моды пренебречь всеми одночастичными p - h -парами за исключением одного единственного НОМО-LUMO-возбуждения. В рамках этой двухуровневой модели уравнение RPAX (30) сводится к системе из двух линейных уравнений

$$\begin{aligned} (\Delta + V - \hbar\Omega) X + VY &= 0, \\ (\Delta + V + \hbar\Omega) Y + VX &= 0, \end{aligned} \quad (35)$$

где V одновременно обозначает как кулоновский матричный элемент $V = \langle ph|v|hp \rangle$ «вперед-во-времени» между двумя одночастичными дипольными возбуждениями $p - h$, так и $V = \langle pp|v|hh \rangle$ «назад-во-времени» между основным состоянием и возбуждением типа «две-частицы-две-дырки», поскольку в случае локального обменного взаимодействия (19) эти матричные элементы равны между собой.

Полученная система уравнений RPAX (35) 2×2 имеет простое аналитическое решение,

$$\hbar^2 \Omega^2 = \Delta^2 + 2\Delta V, \quad (36)$$

$$X = \frac{\hbar\Omega + \Delta}{2\sqrt{\hbar\Omega\Delta}}, \quad Y = -\frac{\hbar\Omega - \Delta}{2\sqrt{\hbar\Omega\Delta}}. \quad (37)$$

Аналитические выражения для матричных элементов V приведены в Приложении, где продемонстрировано, что соотношения (24) и (36) совпадают друг с другом. Этого следовало ожидать, поскольку частота Ω дипольного возбуждения в рамках двухуровневой модели есть не что иное, как резонансная частота ротационной плазменной моды. В большинстве случаев при наличии значительных кулоновских межчастичных корреляций волновые функции и энергии коллективных возбужденных состояний $|\Psi_\nu\rangle$ существенно отличаются от одночастичных. В нашем случае индикатором влияния кулоновского взаимодействия является параметр λ (27), который с использованием обозначений (35) записывается в виде

$$\lambda = \Delta^2 / 2\Delta V = \Delta / 2V.$$

Как уже обсуждалось в разд. 3, в классическом пределе больших систем, при $R \gg a_0$, кулоновское взаимодействие преобладает и $\lambda \ll 1$. Напро-

тив, в режиме размерного квантования, когда $R \ll \ll a_0$, частота Ω определяется одночастичной энергией Δ ($\lambda \gg 1$). При этом из уравнения (36) следует, что учет кулоновских корреляций $2\Delta V$ приводит к смещению частоты плазмонного резонанса в сторону более высоких значений по сравнению с энергией одночастичного возбуждения Δ (11). Важно, что сдвиг энергии возбуждения не сопровождается какой-либо трансформацией волновой функции $|\Psi_\nu\rangle$, поскольку она содержит только электрон-дырочные пары НОМО-LUMO, что не противоречит коллективной природе плазмонного возбуждения. Действительно, суперпозиция (29) содержит большое количество членов, хотя радиальные квантовые числа $n_h = n_p = 1$ и угловые моменты $l_h = = l_p - 1$ остаются фиксированными, а суммирование происходит по проекциям углового момента. Как было показано в разд. 3, дипольное возбужденное состояние может рассматриваться как гармоническая плазменная мода, только если количество свободных электронов в системе, в частности на поверхности Ферми, достаточно велико. Это условие, $2l_{max} + 1 \gg 1$, обеспечивает коллективную природу дипольного возбуждения $|\Psi_\nu\rangle$. Особенностью рассматриваемого вращательного плазмона является то, что суперпозиция (29) определяется только сферической симметрией системы и не зависит от силы кулоновского межчастичного взаимодействия. Амплитуды X и Y связаны с проекциями углового момента через коэффициенты Клебша – Гордона, как показано в Приложении, что обеспечивает сохранение полного углового момента $L = 1$ многочастичного состояния $|\Psi_\nu\rangle$.

Другим важным параметром, который позволяет оценивать вклад кулоновских корреляций в процесс возбуждения дипольной моды, является отношение RPAX амплитуд,

$$\frac{Y}{X} = -\frac{\hbar\Omega - \Delta}{\hbar\Omega + \Delta} = -\frac{\sqrt{\Delta + 2V} - \sqrt{\Delta}}{\sqrt{\Delta + 2V} + \sqrt{\Delta}}. \quad (38)$$

В случае самых маленьких нанокристаллов, $R \ll a_0$ ($\lambda \gg 1$), роль кулоновских корреляций пренебрежимо мала, $X \simeq 1, Y \ll 1$, поскольку энергия межэлектронного взаимодействия мала по сравнению с кинетической энергией электронов, локализованных вблизи непроницаемого потенциального барьера у поверхности частицы. В этом режиме размерного квантования приближение независимых одночастичных электронных состояний хорошо описывает как основное состояние, так и спектр дипольных возбуждений. В другом предельном случае, при $R \gg a_0$ ($\lambda \ll 1$), межэлектронное взаимодействие

играет значительную роль, что подтверждается соотношением $X \simeq -Y \simeq 1$. Возрастание амплитуды «назад-во-времени» свидетельствует о наличии кулоновских корреляций в основном состоянии $|0\rangle$. Трансформация некоррелированного основного состояния системы, сформированного из заполненных одночастичных электронных состояний ниже уровня Ферми, в коррелированное многочастичное основное состояние происходит путем одновременного возникновения возбужденных электрон-дырочных пар, которые в случае двухуровневой модели соответствуют переходам между одночастичными состояниями НОМО и ЛУМО. Эта трансформация приводит как к заметному сдвигу энергии возбуждения $\hbar\Omega$, так и к изменению дипольного матричного элемента D перехода из основного состояния $|0\rangle$ в коллективное возбужденное состояние $|1\rangle$. В соответствии с формулой (36), кулоновские корреляции приводят существенному увеличению энергии перехода $\hbar\Omega$ по сравнению с ее одночастичным значением Δ . Их соотношение можно оценить как

$$\hbar\Omega/\Delta \simeq 2V/\Delta \simeq 1/\lambda \gg 1.$$

В то же время, как следует из (33), сам дипольный матричный элемент уменьшается. В рамках двухуровневой модели, как показано в Приложении, значения одночастичных матричных элементов d_{im} могут быть вычислены аналитически. Поскольку при наличии корреляций выполняется соотношение $X \simeq -Y$, два слагаемых в правой части уравнения (33) компенсируют друг друга, что приводит к уменьшению многочастичного матричного элемента D по сравнению с его одночастичным значением d . Согласно формуле (36), сумма амплитуд X и Y равняется

$$X + Y = \sqrt{\frac{\Delta}{\hbar\Omega}}. \quad (39)$$

Таким образом, одновременное уменьшение дипольного матричного элемента и увеличение энергии перехода $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$ сохраняет неизменным значение силы осциллятора,

$$f = \frac{2m_e\Omega}{\hbar} |D|^2 = \frac{2m_e\Delta}{\hbar^2} |d|^2 = \frac{2}{3} N, \quad (40)$$

как это более детально показано в Приложении. При этом сила осциллятора перехода $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$ составляет $2/3$ от правила сумм (34), что является естественным, поскольку с точки зрения двухуровневой модели этот переход описывает вклад ротационного дипольного плазмона в оптический спектр системы. Вращательная мода включает в себя только угловое движение электронов, в то время как радиальные степени свободы остаются невозбужденными.

По этой же причине квадрат частоты ротационного плазмона в классическом пределе ω_{cl}^2 составляет $2/3$ от квадрата частоты Ми. Этот результат также может быть получен на основе коммутационных соотношений для правила сумм (34) [73], но с учетом только угловых степеней свободы.

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В рамках описанного в разд. 4 подхода были проведены расчеты спектров дипольных возбуждений для всех наночастиц ZnO с замкнутыми электронными оболочками в интервале размеров $2 \text{ нм} < R < 6 \text{ нм}$, т.е. для $N = 8, 18, 32, 50, 72, 98, 128$. Оптические спектры нанокристаллов с разным содержанием электронов проводимости, представлены на рис. 3. На графике $3g$ также сравнивается расчетное сечение фотопоглощения с результатами экспериментальных измерений [24] для нанокристаллов ZnO с $R \simeq 6 \text{ нм}$. Распределения сил осцилляторов в процентах от правила сумм (34), полученных путем численного решения уравнений (30)–(33), показаны сплошными вертикальными линиями. Для сравнения штриховыми вертикальными линиями также показаны силы осцилляторов, соответствующие двухуровневой модели RPAX (36), (40), результаты которой эквивалентны данным, полученным на основе гидродинамического подхода.

Для численного решения уравнения (30) требуется полный одночастичный базис $|h\rangle, |p\rangle$, включающий в себя состояния как дискретного, так и непрерывного спектра. С практической точки зрения, матричное уравнение RPAX удобнее решать, используя только дискретный базис, что позволяет эффективно уменьшить размер диагоналируемой матрицы. Проблема трансформации полного базиса одночастичных состояний в эквивалентный дискретный базис была решена путем использования метода В-сплайнов [75]. Волновые функции дискретных решений уравнений (3) были получены в бесконечно глубокой сферической потенциальной яме конечного, но достаточно большого радиуса [76] путем разложения одночастичных волновых функций в виде линейной комбинации конечного числа В-сплайнов. Необходимая точность вычислений с использованием дискретного базиса достигалась выбором числа и порядка В-сплайнов. При проведении расчетов были использованы 50 В-сплайнов 7-го порядка, что обеспечило достаточную точность вычислений. Для нахождения энергий дипольных переходов Ω_ν и соответствующих сил осцилляторов (33)

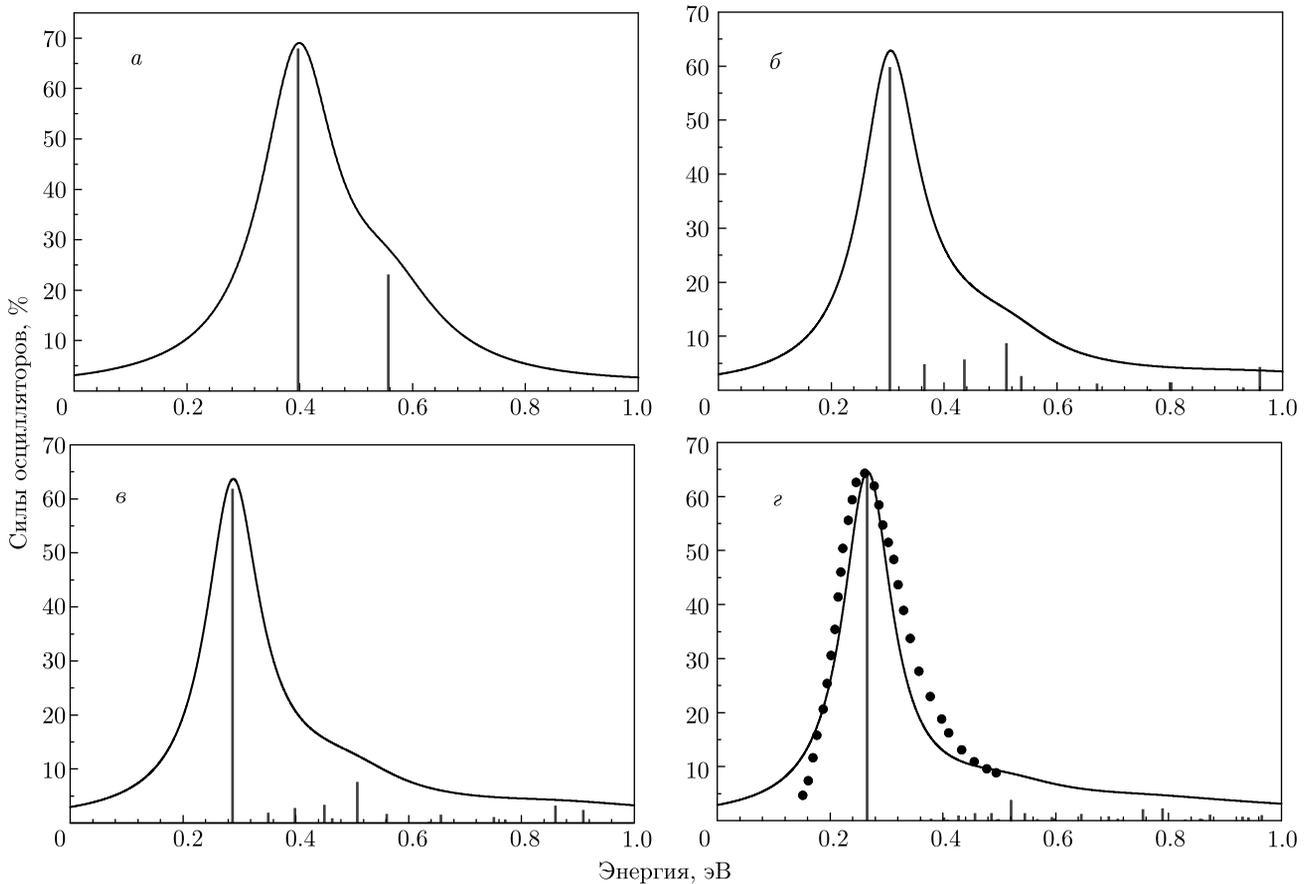


Рис. 3. Распределения сил осцилляторов и соответствующие профили пиков фотопоглощения, рассчитанные в приближении RPAX для нанокристаллов ZnO, с разным содержанием электронов проводимости: *a* — $N = 8$ ($R = 2.4$ нм), *б* — 32 ($R = 3.8$ нм), *в* — 50 ($R = 4.4$ нм), *г* — 128 ($R = 6.0$ нм). Вертикальными штриховыми линиями показаны силы осцилляторов для двухуровневой модели. Для сравнения на рис. *г* приведена экспериментальная зависимость [24] сечения фотопоглощения в окрестности резонансного пика для нанокристалла ZnO с $R \approx 6$ нм

определялись собственные числа и собственные векторы матрицы RPAX (30) с использованием стандартных процедур из библиотеки EISPACK.

Сечения фотопоглощения были получены путем уширения спектральных линий, соответствующих рассчитанным распределениям сил осцилляторов, лоренцевыми профилями с шириной 0.4Ω . Уширение плазмонного резонансного пика имеет множество причин [77–82], детальный анализ которых не входит в число задач, стоящих в данной публикации. Поэтому авторы использовали искусственное уширение резонансных пиков, чтобы добиться согласия с экспериментальными спектрами фотопоглощения. Как видно на рис. 3, оптические спектры всех рассматриваемых нами нанокристаллов ZnO подобны друг другу. Как и в экспериментально наблюдаемых спектрах [24], у всех рассчитанных сече-

ний фотопоглощения есть общая особенность в виде резонансного пика, соответствующего одной ярко выраженной линии оптического перехода. Его положение и сила осциллятора, полученные как в результате численного решения уравнения RPAX (30), так и в рамках двухуровневой модели, хорошо согласуются друг с другом и с экспериментальными данными, что позволяет однозначно классифицировать его как вращательный плазмон. Как следует из графиков, сила осциллятора резонансной моды очень близка к $2/3$ правила сумм, что полностью согласуется с теоретическим значением (40). Оставшаяся $1/3$ суммы сил осцилляторов распределена между оптическими переходами с более высокими частотами, в которых происходит возбуждение радикального движения электронов. Прекрасное согласие между результатами RPAX и двухуровневой моде-

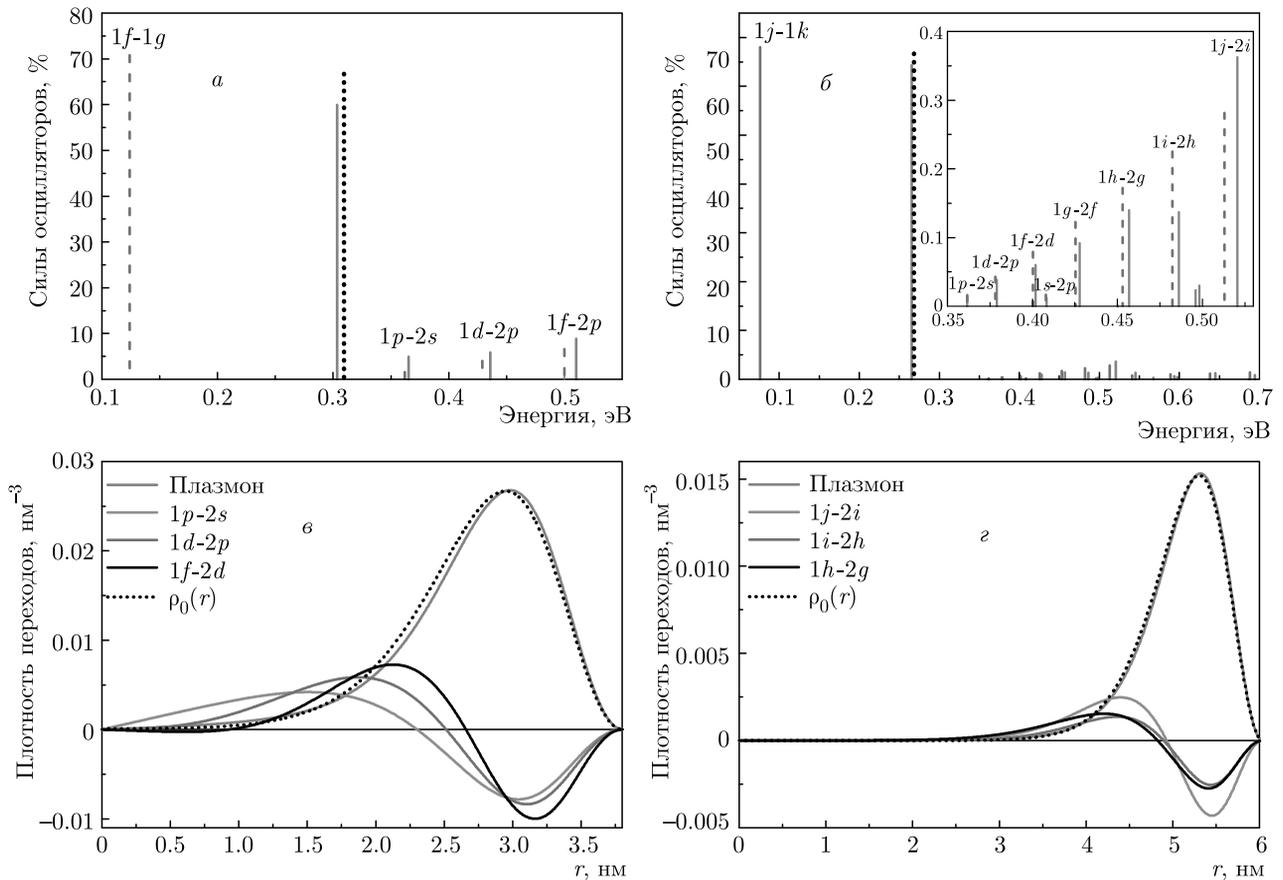


Рис. 4. Распределения сил осцилляторов нанокристаллов ZnO, содержащих $N = 32$ (а) и $N = 128$ (б) электронов: сплошные красные линии — результаты расчетов на основе RPAX (30), черные пунктирные линии — двухуровневая модель, синие штриховые линии — одночастичное приближение. Радиальные распределения плотности дипольных переходов для $N = 32$ (в) и $N = 128$ (г), соответствующие нескольким спектральным линиям. Для сравнения также показаны распределения электронной плотности основного состояния

ли подтверждает факт очень слабой связи между плазменной модой и состояниями, в которых возбуждены радиальные степени свободы.

Чтобы продемонстрировать принципиальное различие между двумя типами оптических переходов на рис. 4 сплошными черными вертикальными линиями показаны распределения сил осцилляторов для двух систем с $N = 32$ и 128 электронами, рассчитанные в рамках RPAX, вместе с их радиальными плотностями переходов и силами осцилляторов одночастичных возбуждений, которые изображены синими штриховыми линиями. Одночастичные возбуждения с низшей энергией, показанные на графиках 4а,б, соответствуют переходам НОМО-LUMO между электронными состояниями с бескорневыми радиальными волновыми функциями. Как видно на графиках, их энергии возбуждения Δ существенно ниже, чем энергии коллективных

плазменных мод $\hbar\Omega = \hbar\omega_p$, показанных вертикальными пунктирными линиями. Согласно формуле (36), этот сдвиг коллективной моды в сторону более высоких энергий по отношению к линии одночастичного перехода обусловлен межчастичными кулоновскими корреляциями, соответствующими второму слагаемому в правой части уравнения (36), и отражает коллективный характер плазменного возбуждения. Это не противоречит тому факту, что смешивание одночастичных состояний, в которых происходит возбуждение радиального движения, с возбуждением перехода НОМО-LUMO в многочастичной волновой функции (29) мало. Несмотря на то, что мы можем пренебречь вкладом в суперпозицию (29) от всех состояний, за исключением пары НОМО-LUMO, сумма будет содержать

$$2l_{max} + 1 = \sqrt{2N} + 1 \gg 1$$

электрон-дырочных возбуждений, которые будут отличаться проекциями углового момента. Таким образом, коллективность плазмонной моды и ее гармоничность обеспечивается большим числом электронов на поверхности Ферми, как было отмечено в разд. 4. Напротив, как видно на графиках, частотные сдвиги, наблюдаемые у линий, соответствующих оптическим переходам между состояниями с разными радиальными квантовыми числами, очень малы. В диапазоне энергий представленных на рис. 4а, б распределений сил осцилляторов показаны линии нескольких оптических переходов между заполненными состояниями с нижним радиальным квантовым числом $n = 1$ и возбужденными уровнями с $n = 2$. Все эти линии лежат выше плазмонного пика, причем, как легко видеть, энергии этих состояний, рассчитанные в рамках RPAX и в одночастичном приближении, лежат очень близко друг к другу. Это означает, что возбуждения радиального движения электронов слабо коррелированы и могут быть описаны как одночастичные состояния в потенциале среднего поля. Этот факт также подтверждается анализом RPAX амплитуд X и Y , значения которых для систем, содержащих $N = 32$ и 128 электронов, представлены соответственно в табл. 1 и 2. Как следует из таблиц, для плазмонных мод амплитуды близки по порядку величины, $X \sim |Y|$, в то время как для других возбужденных состояний наблюдается соотношение $X \gg |Y|$. Большая амплитуда «назад-во-время» свидетельствует о значительном смешивании электрон-дырочных состояний и коллективном характере возбуждения. Напротив, малые значения Y соответствуют одночастичным возбужденным состояниям, для которых межчастичные корреляции практически не играют роли. В табл. 1 и 2 приведены значения сил осцилляторов в процентах от правила сумм (34) для ряда возбужденных состояний с целью продемонстрировать, что плазмонная мода с достаточно большой точностью аккумулирует 2/3 от всей суммы сил осцилляторов, в то время как на долю каждого одночастичного возбуждения приходится лишь малая ее часть.

Природа каждой конкретной спектральной линии также может быть проанализирована путем исследования плотности переходов, которая определяется как

$$\rho_{tr}^{(\nu)}(\mathbf{r}) = \langle \Phi_\nu | \delta\rho(\mathbf{r}) | \Phi_0 \rangle = \sum_{h < F, p > F} \left(X_{ph}^{(\nu)} \psi_p^*(\mathbf{r}) \psi_h(\mathbf{r}) + Y_{ph}^{(\nu)} \psi_p(\mathbf{r}) \psi_h^*(\mathbf{r}) \right), \quad (41)$$

Таблица 1. Параметры дипольных возбуждений системы, содержащей 32 электрона

Возбуждение	Энергия, эВ	% от TRK суммы	$-Y/X$
Плазмон	0.30	62.3	0.40
1p-2s	0.37	5.3	0.05
1d-2p	0.44	6.2	0.08
1f-2d	0.51	8.1	0.09

Таблица 2. Параметры дипольных возбуждений системы, содержащей 128 электронов

Возбуждение	Энергия, эВ	% от TRK суммы	$-Y/X$
Плазмон	0.27	64.4	0.52
1p-2s	0.36	0.2	0.01
1d-2p	0.38	0.4	0.01
1f-2d	0.40	0.6	0.01
1s-2p	0.41	0.2	0.01
1g-2f	0.43	0.9	0.01
1g-2f	0.43	0.9	0.01
1h-2g	0.46	1.4	0.01
1i-3h	0.49	1.4	0.01
1j-2i	0.52	3.6	0.02

где $\psi(\mathbf{r})$ — одночастичные волновые функции (7). В случае, когда электронные оболочки замкнуты и система имеет сферическую симметрию, для дипольного возбуждения выражение (41), как показано в Приложении, может быть приведено к виду

$$\rho_{tr}^{(\nu)}(\mathbf{r}) = \rho_{tr}^{(\nu)}(r) \cos \theta, \quad (42)$$

где

$$\rho_{tr}^{(\nu)}(r) = \frac{\sqrt{6}}{4\pi} \sum_{h < F, p > F} (-1)^{l_h} \frac{P_{n_h, l_h}(r) P_{n_p, l_p}(r)}{r^2} \times \left(X_{ph}^{(\nu)} + Y_{ph}^{(\nu)} \right) \sqrt{l_h + 1}. \quad (43)$$

Для двухуровневой модели радиальная зависимость плотности переходов $\rho_{tr}^{(\nu)}(r)$ может быть получена аналитически. С учетом того, что при суммировании в правой части выражения (43) остается только один член, соответствующий переходу НОМО–LUMO, будем полагать все радиальные вол-

новые функции идентичными и, в соответствии с (14), равными

$$P_{1,l}^2(r)/r^2 = 4\pi\rho_0(r)/N.$$

При этом сумма $X + Y$ определяется соотношением (39). В этом случае выражение (42) принимает вид

$$\begin{aligned} \rho_{tr}(\mathbf{r}) &= \rho_0(r) \sqrt{\frac{3\hbar}{Nm_e R^2 \Omega}} \cos \theta = \\ &= \rho_0(r) \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_p}} \cos \theta, \end{aligned} \quad (44)$$

что в точности совпадает с амплитудой колебаний электронной плотности в гидродинамической модели (13), в которой амплитуда плазмонного осциллятора $\langle 1|\hat{A}|0\rangle$ определяется формулой (28).

На рис. 4б,г представлены радиальные зависимости плотности переходов $\rho_{tr}^{(\nu)}(r)$ для спектральных линий, изображенных на графиках рис. 4а,б. Сплошные линии показывают зависимости $\rho_{tr}^{(\nu)}(r)$, полученные на основе RPAX согласно уравнению (43). Пунктирными линиями для сравнения приведены графики радиального распределения электронной плотности основного состояния $\rho_0(r)$, которая, согласно (44), определяет плотность переходов для гидродинамической и эквивалентной ей двухуровневой моделей (44). Прекрасное согласие между результатами, полученными в рамках двух подходов к описанию ротационной плазменной моды, подтверждает сделанное выше предположение, что для плазменной моды с высокой точностью выполняется соотношение $\rho_{tr}(r) \propto \rho_0(r)$. Следует отметить, что в случае «традиционного» трансляционного поверхностного плазмона Ми распределение плотности переходов оказывается совершенно другим, $\rho_{tr}(r) \propto d\rho_0(r)/dr$ [13]. В классическом пределе чисто трансляционные плазменные колебания однородного электронного облака приводят к вариации электронной плотности вблизи границы, где сильна радиальная зависимость $\rho_0(r)$. В терминах квантового подхода подобная особенность означает, что $\rho_{tr}(r)$ складывается из вкладов от множества одночастичных переходов, при которых меняются как угловое, так и радиальное квантовые числа. Плотности одночастичных переходов, также приведенные на рис. 4б,г, имеют схожие зависимости, поскольку соответствуют дипольным переходам между состояниями с разными радиальными квантовыми числами. Однако их поведение не может быть с хорошей точностью аппроксимировано производной $d\rho_0(r)/dr$, что является подтверждением

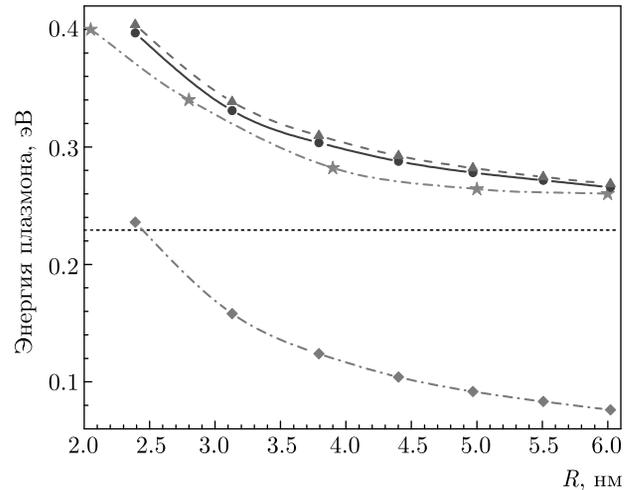


Рис. 5. Зависимости частоты дипольного резонанса от радиуса наночастицы R . Экспериментальные значения [24] — красные звездочки со штрихпунктирными линиями. Двухуровневая модель — сиреневые треугольники со штриховыми линиями. Полный RPAX расчет (30) — синие кружки со сплошными синими линиями. Одночастичная модель невзаимодействующих электронов (11) — зеленые ромбы со штрихпунктирными линиями. Классическая плазменная частота (26) — горизонтальная черная пунктирная линия

того, что эти переходы не могут быть отнесены к коллективным модам.

Применимость предложенной модели, описывающей компрессионный ротационный плазмон, проверена сравнением с экспериментально наблюдаемыми спектрами фотопоглощения нанокристаллов ZnO. Наиболее наглядным примером является зависимость резонансной частоты от размера наночастиц. На рис. 5 приведено сравнение частот резонансных пиков, наблюдаемых в экспериментальных зависимостях [24] и показанных на графике звездочками, с положениями максимумов сечений фотопоглощения, рассчитанных в RPAX (30), которые отмечены синими кружками, для различных радиусов исследуемых наночастиц. На графике также построены зависимости энергии плазмонного резонанса $\hbar\omega_p$ от размера частицы, полученные в рамках гидродинамической модели (24), а также энергии Δ одночастичных переходов НОМО–LUMO. Положение классической энергии плазмона $\hbar\omega_{cl}$ (26) в асимптотическом пределе больших систем показано горизонтальной пунктирной линией. Графики, представленные на рис. 5, демонстрируют хорошее согласие между экспериментальными данными и результатами численных расчетов. При этом квантовомеханические расчеты на основе RPAX и

полуклассическая гидродинамическая модель дают почти идентичные значения плазмонной энергии. Это еще раз подтверждает, что экспериментально наблюдаемый резонансный пик в спектре фотопоглощения нанокристаллов ZnO с поверхностным легированием связан с возбуждением вращательной плазмонной моды. Заметная разность между одночастичными, Δ , и коллективными, $\hbar\Omega$, энергиями возбуждения показывает, что кулоновские межчастичные корреляции играют важную роль при формировании плазмонной моды. Величина этой разности меняется с ростом размера нанокристаллов в соответствии с изменением параметра $\lambda \simeq a_0/2R$ (27). В случае больших систем кулоновские корреляции дают основную составляющую энергии плазмонных колебаний, в то время как вклад квантового давления Δ оказывается минимален, и, таким образом, энергия плазмона стремится к своему классическому пределу $\hbar\omega_{cl}$. Напротив, для самых малоразмерных систем влияние кулоновского взаимодействия существенно уменьшается, в то время как эффект от квантового давления возрастает по мере увеличения параметра λ . Однако в исследованном диапазоне размеров наночастиц мы не наблюдаем перехода от классического предела, $\lambda \ll 1$, к режиму размерного квантования, $\lambda \gg 1$. Действительно, наличие кулоновского взаимодействия, индикатором силы которого служит параметр λ , необходимо для возникновения вращательного плазмона. Исходя из условия (9), плазмонные колебания могут считаться ротационными, если выполняется соотношение $\lambda \ll 1$. При этом все рассмотренные фотолегированные нанокристаллы ZnO, включая самый маленький, содержащий только 8 электронов, для которого $\lambda \simeq 0.14$, удовлетворяют этому требованию. Комбинация кулоновского взаимодействия и квантового давления приводит к появлению зависимости плазмонной частоты от размера системы. Однако помимо квантового давления присутствует еще один дополнительный вклад в размерную зависимость $\hbar\omega_p(R)$, а именно эффект смещения электронной плотности в результате ее отталкивания от границы наночастицы. Как показано на вставке рис.1, квантовое отталкивание приводит к сдвигу $\Delta r \sim a_0$ среднего радиуса электронной системы $\langle r \rangle$ относительно радиуса R . Уменьшение величины $\langle r \rangle$ усиливает межчастичное кулоновское взаимодействие и, в свою очередь, ведет к зависящему от размера системы сдвигу плазмонной частоты ω_p выше ее классического значения ω_{cl} . Этот эффект может быть воспроизведен заменой радиуса наночастицы R средним радиусом $\langle r \rangle < R$ в формуле (26) для классиче-

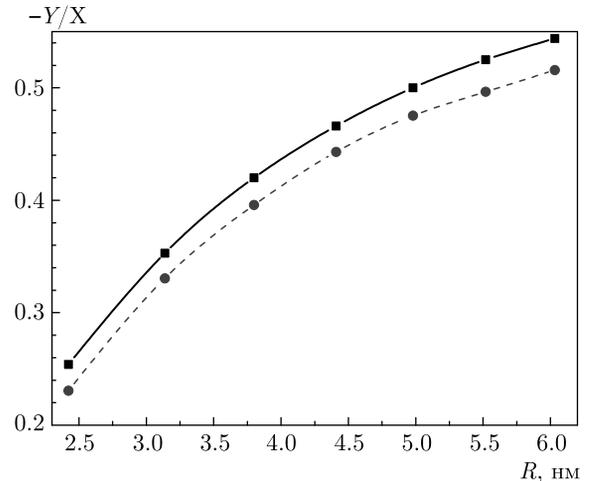


Рис. 6. Зависимость отношения $-Y/X$ дипольной плазмонной моды от радиуса системы: численные результаты RPAX — сплошная кривая; результаты двухуровневой модели (35) — штриховая линия

ской плазмонной частоты ω_{cl} . Следовательно, одновременно присутствуют два квантовых механизма, приводящих к появлению размерной зависимости $\omega_p(R)$, а именно квантовое давление и эффект смещения электронной плотности. Вклад первого механизма описывается, соответственно, первым членом в правой части уравнения (36), в то время как появление второго связано с эффективным увеличением кулоновского матричного элемента V во втором слагаемом уравнения. Оба механизма обеспечивают одинаковую зависимость $\omega_p(R) \sim 1/R$ для больших R , хотя вклад второго превалирует.

Зависимость влияния кулоновских корреляций на процесс формирования плазмонной моды от размера наночастицы также может быть проиллюстрирована на примере сравнительного анализа амплитуд X и Y . На рис. 6 построено отношение $-Y/X$ как функция радиуса нанокристалла R , где представленные результаты были получены как на основе численных расчетов в RPAX (сплошная линия), так и в рамках двухуровневой модели в соответствии с (38) (штриховая линия). Для графика RPAX были взяты значения отношения $-Y/X$ для основного перехода в суперпозиции (29), соответствующего электрон-дырочной паре НОМО–ЛУМО. На рис. 6 видно, что значение отношения $-Y/X$, которое является индикатором влияния кулоновских корреляций, возрастает примерно вдвое при увеличении размера нанокристаллов от наименьших до наибольших из рассмотренных. Важно отметить, что предложенная модель основывает-

ся на предположении, что электроны проводимости полностью делокализованы в объеме наночастицы. Это, по-видимому, верно в случае высоких концентраций электронов, когда их волновые функции перекрываются. Однако при низких электронных концентрациях ситуация может оказаться другой, и, таким образом, необходимо сделать оценку минимальной концентрации, которая будет обеспечивать делокализацию электронов. В обсуждаемом случае нанокристаллов с поверхностным способом легирования движение делокализованных электронов происходит практически только в тангенциальном направлении. Радиальное движение строго ограничено в узком слое шириной $\delta r \ll R$ из-за кулоновского отталкивания и потенциального барьера у поверхности. Используемая сферически-симметричная модель пренебрегает наличием угловой зависимости потенциала среднего поля, в силу чего тангенциальное движение электронов полагается свободным. В этом приближении мы не учитываем поле, создаваемое протонами на внешней поверхности нанокристалла, которые выполняют роль положительно заряженных доноров [24]. Монопольный член кулоновского потенциала протонов наночастицы постоянен внутри объема, но его мультипольные компоненты более высоких порядков — нет. Следует ожидать, что при достаточно низких концентрациях носителей заряда каждый электрон будет связан с соответствующим протоном, и электронная система в целом будет представлять собой систему отдельных нейтральных пар электрон–донор, а не делокализованное электронное облако. Радиусы орбит электронов, связанных с протонами за пределами нанокристалла, больше, чем радиус нейтрального донора в объемном ZnO из-за отталкивания электрона от границы. В предположении нулевых граничных условий для электронной волновой функции на поверхности наночастицы можно оценить средний радиус для пары электрон–протон как средний радиус электрона в p -состоянии нейтрального донора в объемном ZnO: $\langle r \rangle_{ep} \sim 5a_0 \simeq 3.25$ нм. Таким образом, электроны становятся делокализованными, когда начинают перекрываться волновые функции ближайших друг к другу доноров. Это происходит при рассматриваемой электронной концентрации $n_e = 1.4 \cdot 10^{20}$ см⁻³ [24], соответствующей $r_s = 1.2$ нм, что почти втрое меньше, чем $\langle r \rangle_{ep}$. При этом среднее межэлектронное расстояние внутри узкой электронной оболочки еще меньше, и его можно оценить как $2R/\sqrt{N} = 2r_s/N^{1/6}$. Если это значение оказывается меньше радиуса донора, электроны могут считаться делокализованными, в противном

случае они будут связаны с протонами у поверхности. Для нанокристаллов ZnO с радиусом $R = 6$ нм это может произойти при значениях концентрации n_e как минимум на порядок ниже, чем $1.4 \cdot 10^{20}$ см⁻³. Локализацию электронов с образованием вигнеровского кристалла [83] в ZnO также можно ожидать при существенно более низких уровнях легирования.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Наличие дипольных плазменных резонансных мод в спектре фотопоглощения является неотъемлемым свойством наночастиц, содержащих делокализованные электроны. Легированные полупроводниковые нанокристаллы представляют собой перспективную основу для новых материалов, используемых в наноэлектронике, поскольку позволяют варьировать положение линии плазмонного резонанса в широком диапазоне частот. В представленной работе теоретически исследован новый тип коллективного дипольного возбуждения в наноразмерных фотолегированных полупроводниковых кристаллах на примере кристаллов ZnO в растворе толуола. Доказано, что доминирующая в их спектрах фотопоглощения резонансная линия соответствует плазменной моде вращательного типа, в которой возбуждены только угловые степени свободы. Появление такого плазмона в электронной системе фотолегированных нанокристаллов обусловлено особенностью строения их основного состояния, в котором электроны проводимости локализованы в узком приповерхностном слое. В результате коллективные колебания электронной плотности происходят только в тангенциальном направлении, в то время как радиальные степени свободы остаются замороженными. Эта же особенность распределения электронной плотности определяет электронную конфигурацию исследуемых нанокристаллов, у которых распределение заполненных уровней энергии с хорошей точностью воспроизводит спектр квантового ротатора. Это, в свою очередь, приводит к тому, что в формировании коллективной плазмонной моды принимают участие практически только электроны из наружной оболочки, что дает возможность описать резонансный дипольный переход в рамках простой двухуровневой модели. При этом проведенный сравнительный анализ амплитуд «вперед»- и «назад-во-время», а также распределения плотности переходов подтвердил многочастичный характер этого возбужденного состояния.

Важно отметить, что плазменная мода ротационного типа по своей природе принципиально отличается от поверхностных Ми-резонансов и может быть описана как возбужденное состояние в конечной ферми-системе, так и как вращательное движение квантовой жидкости. Было продемонстрировано, что подобные дипольные колебания являются гармоническими, что позволяет их определить как плазмонное резонансное возбуждение. Результаты проведенных теоретических расчетов в рамках обоих подходов продемонстрировали хорошее совпадение с экспериментальными данными, в которых отчетливо наблюдалась зависимость положения резонансной линии от размера наночастицы. При изменении радиуса нанокристалла, как показано в данной работе, резонансная мода претерпевает переход от режима размерного квантования в случае очень маленьких систем к режиму «классических» плазмонных колебаний в пределе больших радиусов. При этом роль параметра, определяющего выбор режима возбуждения электронной системы, играет отношение размера нанокристалла к эффективному борновскому радиусу. С увеличением размера кристалла частота плазмона стремится к своему асимптотическому значению, соответствующему классической частоте плазмонных колебаний в тонкой проводящей сфере, что согласуется с результатами экспериментальных измерений.

Благодарности. Авторы благодарят профессора Claude Guet из Nanyang Technological University за полезные обсуждения.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Коллективное возбужденное состояние в RPAХ $|\Phi_\nu\rangle$ (29) имеет определенные значения полного углового момента L и его проекции M . Это обеспечивается зависимостью амплитуд X и Y от проекций углового момента посредством коэффициентов Клебша – Гордана

$$\begin{aligned} X_{n_p l_p m_p \sigma_p, n_h l_h m_h \sigma_p} &= (-1)^{m_h} C_{l_p m_p, l_h M - m_h}^{LM} \times \\ &\times \frac{\delta \sigma_p \sigma_h}{\sqrt{2}} X_{n_p l_p, n_h l_h}, \\ Y_{n_p l_p m_p \sigma_p, n_h l_h m_h \sigma_p} &= (-1)^{m_p} C_{l_p M - m_p, l_h m_h}^{LM} \times \\ &\times \frac{\delta \sigma_p \sigma_h}{\sqrt{2}} Y_{n_p l_p, n_h l_h}. \end{aligned} \quad (45)$$

В рассматриваемом случае дипольных возбуждений $L = |l_p - l_h| = 1$, а зависимость приведенных час-

тей амплитуд $X_{n_p l_p, n_h l_h}$ и $Y_{n_p l_p, n_h l_h}$ от радиальных квантовых чисел $n_{p,h}$ и орбитальных моментов $l_{p,h}$ одночастичных состояний определяется в результате численного решения матричного уравнения (30).

В рамках двухуровневой 2×2 модели RPAХ в суперпозиции (29) мы учитываем вклад только одного перехода НОМО-LUMO, для которого

$$n_p = n_h = 1, \quad l_p - 1 = l_h = l_{max}.$$

Следовательно, остается только одна пара приведенных амплитуд X и Y , удовлетворяющих уравнениям (35), а их значения в явном виде записываются как (37). Кулоновский матричный элемент V в уравнениях (35), (36) может быть представлен как

$$\begin{aligned} V &= \sum_{m_h m_p m'_h m'_p} (-1)^{m_h + m'_h} C_{l_h - m_h, l_p m_p}^{10} \times \\ &\times C_{l_h - m'_h, l_p m'_p}^{10} \int \psi_{l_h m_h}^*(\mathbf{r}) \psi_{l_p m_p}(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \times \\ &\times \psi_{l_p m'_p}^*(\mathbf{r}') \psi_{l_h m'_h}(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \end{aligned} \quad (46)$$

где результат суммирования по спиновым индексам уже учтен в виде множителя 2. Одночастичные волновые функции определены как произведение (7), причем мы пренебрегаем зависимостью их радиальных компонент от углового момента

$$P_{1, l_{max}}(r) = P_{1, l_{max}+1}(r) = P_1(r).$$

Оператор межчастичного кулоновского взаимодействия $v(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ представлен в виде суммы «прямой» и обменной компонент (19), что позволяет вычислить соответствующие слагаемые по раздельности, $V = V_d + V_x$.

«Прямая» часть оператора, $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, определяется из мультипольного разложения по сферическим гармоникам (2). После интегрирования по угловым переменным [59],

$$\begin{aligned} \langle Y_{l_p m_p}(\mathbf{n}) | Y_{l_m}(\mathbf{n}) | Y_{l_h m_h}(\mathbf{n}) \rangle &= (-1)^{-m_h} \times \\ &\times \sqrt{\frac{(2l_h + 1)(2l_p + 1)}{4\pi(2l + 1)}} C_{l_h - m_h, l_p m_p}^{lm} C_{l_h 0, l_p 0}^{l0}, \end{aligned} \quad (47)$$

$$C_{l_h 0, l_p 0}^{l0} = (-1)^{l_h} \sqrt{\frac{3(l_h + 1)}{(2l_h + 1)(2l_p + 1)}}, \quad (48)$$

и последующего суммирования по $m_{p,h}$ получаем

$$\begin{aligned} V_d &= \frac{2e^2(l_{max} + 1)}{3} \int P_1(r)^2 P_1(r')^2 \times \\ &\times \left(\frac{r_{<}^l}{\varepsilon_1 r_{>}^{l+1}} + \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(l + 1)(r_1 r_2)^l}{\varepsilon_1(l\varepsilon_1 + (l + 1)\varepsilon_2)R^{2l+1}} \right) dr dr'. \end{aligned} \quad (49)$$

Соответствующий вклад $2\Delta V_d/\hbar^2$ в Ω^2 в правой части уравнения (36) с учетом (14), (25), (22), (20) в точности совпадает со слагаемым K_C/M в формуле (24) для ω_p^2 в гидродинамической модели.

Аналогичным образом, обменная часть матричного элемента записывается в виде

$$V_x = -2 \left(\frac{1}{9\pi} \right)^{1/3} \frac{e^2}{\varepsilon_1} \times \sum_{m_h m_p m'_h m'_p} C_{l_h - m_h, l_p m_p}^{10} C_{l_h - m'_h, l_p m'_p}^{10} (-1)^{m_h + m'_h} \times \int \frac{\psi_{l_h m_h}^*(\mathbf{r}) \psi_{l_p m_p}(\mathbf{r}) \psi_{l_p m'_p}^*(\mathbf{r}) \psi_{l_h m'_h}(\mathbf{r})}{\rho_0(r)^{2/3}} d\mathbf{r}, \quad (50)$$

где множитель 2 вновь появляется в результате суммирования по спиновым индексам. Сумма произведения двух сферических гармоник $\psi_{l_h m_h}^*(\mathbf{r}) \psi_{l_p m_p}(\mathbf{r})$ и коэффициента Клебша – Гордана может быть преобразована к виду [59]

$$\sum_{m_h, m_p} C_{l_h - m_h, l_p m_p}^{10} (-1)^{m_h} Y_{l_p, m_p}(\mathbf{n}) Y_{l_h, -m_h}^*(\mathbf{n}) = \sqrt{\frac{(2l_p + 1)(2l_h + 1)}{12\pi}} C_{l_h 0, l_p 0}^{10} Y_{1, 0}(\mathbf{n}). \quad (51)$$

После вычисления угловой части (50) получаем

$$V_x = - \left(\frac{1}{9\pi} \right)^{1/3} \frac{e^2}{\varepsilon_1} \frac{2(l_{min} + 1)}{4\pi} \times \int_0^\infty \frac{P_1^4(r)}{r^2 \rho_0(r)^{2/3}} dr. \quad (52)$$

Таким образом, с учетом (14), (25), (22) и (20), обменный вклад $2\Delta V_x/\hbar^2$ в Ω^2 также в точности совпадает с обменным членом K_x/M в (24).

Выражения (45) для амплитуд РРАХ также использовались при вычислении плотности переходов $\rho_{tr}^{(\nu)}(\mathbf{r}) = \langle \Phi_\nu | \delta\rho(\mathbf{r}) | \Phi_0 \rangle$ С их помощью после суммирования по спиновым индексам формула (41) преобразуется к виду

$$\rho_{tr}^{(\nu)}(\mathbf{r}) = \sqrt{2} \sum_{n_p, l_p, m_p, n_h, l_h, m_h} (-1)^{m_h} \times \left(X_{n_p l_p, n_h l_h}^\nu C_{l_p m_p, l_h - m_h}^{10} \psi_{l_h m_h}(\mathbf{r}) \psi_{l_p m_p}^*(\mathbf{r}) + Y_{n_p l_p, n_h l_h}^\nu C_{l_p - m_p, l_h m_h}^{10} \psi_{l_h m_h}^*(\mathbf{r}) \psi_{l_p m_p}(\mathbf{r}) \right). \quad (53)$$

Суммирование по m_p, m_h проводится с помощью (51) и приводит к окончательному результату

$$\rho_{tr}^{(\nu)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{6\pi r^2}} \sum_{n_p, l_p, n_h, l_h} P_{n_p l_p}(r) P_{n_h l_h}(r) \times \left(X_{n_p l_p, n_h l_h}^\nu + Y_{n_p l_p, n_h l_h}^\nu \right) \sqrt{(2l_h + 1)(2l_p + 1)} \times C_{l_h 0, l_p 0}^{10} Y_{10}(\mathbf{n}), \quad (54)$$

что с учетом (48) в точности дает (42), (43).

ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Климов, *Наноплазмоника*, Физматлит, Москва (2009).
2. *Quantum Plasmonics*, ed. by S. I. Bozhevolniy et al., Springer International Publishing, Switzerland (2016).
3. *Plasmonics. From Basics to Advanced Topics*, ed. by S. Enoch and N. Bonod, Springer Series in Optical Sciences **167**, Berlin, Springer Verlag (2012).
4. M. S. Tame, K. R. McEnery, S. K. Ozdemir et al., *Nature Phys.* **9**, 329 (2013).
5. J. A. Scholl, A. L. Koh, and J. A. Dionne, *Nature* **483**, 421 (2012).
6. M. Brack, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 667 (1993).
7. M. Harb, F. Rabilloud, D. Simon et al., *J. Chem. Phys.* **129**, 194108 (2008).
8. F. Xuan and C. Guet, *Phys. Rev. A* **94**, 043415 (2016).
9. U. Kreibig and M. Vollmer, *Optical Properties of Metallic Clusters*, Springer Series in Materials Science **65**, Springer-Verlag, Berlin (1995).
10. *Clusters of Atoms and Molecules*, ed. by H. Haberland, Vol. I,II, Springer Series in Chemical Physics, Vol. **52, 56**, Springer, Berlin (1994).
11. W. A. de Heer, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 611 (1993).
12. C. R. C. Wang, S. Pollack, D. Cameron, and M. M. Kappes, *J. Chem. Phys.* **93**, 3787 (1993).
13. C. Guet and W. R. Johnson, *Phys. Rev. B* **45**, 11283 (1992).
14. U. Kreibig and P. Zacharias, *Z. Physic* **231**, 128 (1970).
15. I. Kriegel, F. Scotognella, and L. Manna, *Phys. Rep.* **674**, 1 (2017).

16. *Nanocrystal Quantum Dots*, ed. by V. I. Klimov, CRC Press (2010).
17. R. C. Monreal, T. J. Antosiewicz, and S. P. Appel, *New J. Phys.* **15**, 083044 (2013).
18. B. Palpant, B. Prével, J. Lermé et al., *Phys. Rev. B* **57**, 1963 (1998).
19. J. Lermé, B. Palpant, E. Cottancin et al., *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5105 (1998).
20. F. Scotognella, G. Della Valle, A. R. S. Kandada et al., *Eur. Phys. J. B* **86**, 154 (2013).
21. Y. Xie, L. Carbone, C. Nobile et al., *ACS Nano* **7**, 7352 (2013).
22. A. L. Routzahn, S. L. White, L.-K. Fong et al., *Isr. J. Chem.* **52**, 983 (2012).
23. J. M. Luther, P. K. Jain, T. Ewers et al., *Nature Mater.* **10**, 361 (2011).
24. A. MSchimpf, N. Thakkar, C. E. Gunthardt et al., *ACS Nano* **8**, 1065 (2014).
25. H. Zhang, V. Kulkarni, E. Prodan et al., *J. Phys. Chem. C* **118**, 16035 (2014).
26. E. Townsend and G. W. Bryant, *Nano Lett.* **12**, 429 (2012).
27. E. Prodan, P. Nordlander, and N. J. Halas, *Nano Lett.* **3**, 1411 (2003).
28. S. Link and M. A. El-Sayed, *J. Phys. Chem. B* **103**, 4212 (1999).
29. J. A. Faucheaux, A. L. D. Stanton, and P. K. Jain, *J. Phys. Chem. Lett.* **5**, 976 (2014).
30. S. D. Lounis, E. L. Runnerstrom, A. Bergerud et al., *J. Amer. Chem. Soc.* **136**, 7110 (2014).
31. M. A. El-Sayed, *Acc. Chem. Res.* **37**, 326 (2004).
32. S.-W. Hsu, K. On, and A. T. Rao, *J. Amer. Chem. Soc.* **133**, 19072 (2011).
33. X. Liu and M. T. Swihart, *Chem. Soc. Rev.* **43**, 3908 (2014).
34. G. Garcia, R. Buonsanti, E. L. Runnerstrom et al., *Nano Lett.* **11**, 4415 (2011).
35. M. Kanehara, H. Koike, T. Yoshinaga, and T. Teranishi, *J. Amer. Chem. Soc.* **131**, 17736 (2009).
36. D. J. Rowe, J. S. Jeong, K. A. Mkhoyan, and U. R. Kortshage, *Nano Lett.* **13**, 1317 (2013).
37. Zh. Sun and B. Zhao, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 221106 (2007).
38. G. Mie, *Ann. Phys.* **25**, 377 (1908).
39. H. Liu, C. K. Brozek, S. Sun et al., *J. Phys. Chem. C* **121**, 26066 (2017).
40. A. M. Schimpf, C. E. Gunthardt, J. DRinehart et al., *J. Amer. Chem. Soc.* **135**, 16569 (2013).
41. W. Ekardt, *Phys. Rev. B* **31**, 6360 (1985).
42. D. E. Beck, *Phys. Rev. B* **35**, 7325 (1987).
43. L. G. Gerchikov, C. Guet, and A. N. Ipatov, *Phys. Rev. A* **66**, 053202.1 (2002).
44. A. N. Ipatov, L. G. Gerchikov, and C. Guet, *J. Comp. Mat. Sci.* **35**, 347 (2006).
45. U. Banin, Y. Cao, D. Katz, and O. Millo, *Nature* **400**, 542 (1999).
46. L. P. Kouwenhoven, D. G. Austing, and S. Tarucha, *Rep. Prog. Phys.* **64**, 701 (2001).
47. A. N. Ipatov, L. G. Gerchikov, and C. Guet, *Nanoscale Res. Lett.* **13**, 297 (2018).
48. K. Yabana and G. F. Bertsch, *Phys. Scripta* **48**, 633 (1993).
49. N. Ju, A. Bulgac, and J. W. Keller, *Phys. Rev. B* **48**, 9071 (1993).
50. P. Östling, P. Apell, and A. Rosen, *Europhys. Lett.* **21**, 539 (1993).
51. M. Madjet, G. Guet, and W. R. Johnson, *Phys. Rev. A* **51**, 1327 (1995).
52. *Applied Many-Body Methods in Spectroscopy and Electronic Structure*, ed. by D. Mikharjee, Springer Science and Business Media, NY (1992).
53. H. E. Wilhelm, *Phys. Rev. D* **1**, 2278 (1970).
54. G. Guiliani and G. Vignale, *Quantum Theory of Electron Liquid*, Cambridge University Press (2005).
55. T. Ihn, *Semiconductor Nanostructures: Quantum States and Electronic Transport*, Oxford University Press (2010).
56. F. Rossi, *Theory of Semiconductor Quantum Devices: Microscopic Modeling and Simulation Strategies*, Springer Science and Business Media, NY (2011).
57. H. Morko and ÜÖzgür, in *Zinc Oxide*, WILEY-VCH (2009).
58. Ll. Serra, F. Garcias, J. Navarro et al., *Phys. Rev. B* **46**, 9369 (1992).
59. D. A. Varshalovich, A. N. Moscalev, V. K. Khersonskii, *Quantum Theory of Angular Momentum*, World Scientific, Singapore (1988).

60. R. Dreizler and E. Gross, *Density Functional Theory*, Plenum Press, New York (1995).
61. L. D. Landau and E. M. Lifshitz *Quantum Mechanics*, Vol. 3, Pergamon Press (1977).
62. L. D. Landau, Sov. Phys. JETP **3**, 920 (1957).
63. D. P. Grimmer, Physica B+C **106**, 9 (1981).
64. J. Feldman, H. Knörrer, and E. Trubowitz, Commun. Math. Phys. **247**, 1 (2004).
65. B. Fröhlich, M. Feld, E. Vogt et al., Phys. Rev. Lett. **109**, 130403 (2012).
66. C. F. Bohren and D. R. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, Wiley Interscience, New York (1983).
67. F. Alpeggiani, S. D'Agostino, and L. C. Andreani, Phys. Rev. B **86**, 035421 (2012).
68. *Quantum Confinement Effects, Observations and Insights*, ed. by R. Parker, Nova Science Publishers, NY (2017).
69. B. Zorman, M. V. Ramakrishna, and R. A. Freisner, J. Phys. Chem. **99**, 7649 (1995).
70. S. Neeleshwar, C. L. Chen, C. B. Tsai et al., Phys. Rev. B **71**, 201307 (2005).
71. A. Dalgarno and G. A. Victor, Proc. Roy. Soc. A **291**, 291 (1966).
72. D. J. Rowe, Rev. Mod. Phys. **40**, 153 (1968).
73. G. F. Bertsch and R. A. Brorlia, *Oscillations in Finite Quantum Systems*, Cambridge University press, UK (1994).
74. M. Ya. Amusia and L. V. Chernysheva, *Computation of Atomic Processes*, IOP Publishing Ltd (1997).
75. C. de Boor, *A Practical Guide to Splines*, Springer Verlag, New York (1978).
76. J. Sapirstein and W. R. Johnson, J. Phys. B: Atomic, Molec. Opt. Phys. **29**, 5213 (1996).
77. W. E. Ormand, J. M. Pacheco, S. Sanguinetti et al., Z. Phys. D **24**, 401 (1992).
78. G. F. Bertsch and D. Tomanek, Phys. Rev. B **40**, 2749 (1989).
79. J. M. Pacheco and R. A. Broglia, Phys. Rev. Lett. **62**, 400 (1989).
80. J. M. Pacheco and W. D. Schöne, Phys. Rev. Lett. **79**, 4986 (1997).
81. F. Della Salla, R. Rousseau, A. Görling, and D. Marx, Phys. Rev. Lett. **92**, 183401.1 (2004).
82. C. Yannouleas and R. A. Broglia, Ann. Phys. (NY) **217**, 105 (1991).
83. B. Tanatar and D. Ceperley, Phys. Rev. B **39**, 5005 (1989).

БЕЗМАССОВЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В ГРАФЕНЕ В ОКРЕСТНОСТИ КУЛОНОВСКИХ ПРИМЕСЕЙ

А. И. Бреев ^{a*}, Д. М. Гитман ^{a,b**}

^a Томский государственный университет
634050, Томск, Россия

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

Поступила в редакцию 10 января 2021 г.,
после переработки 2 февраля 2021 г.
Принята к публикации 3 февраля 2021 г.

Исследуются низкоэнергетические безмассовые электронные возбуждения в монослое графена в окрестности точечной кулоновской примеси. Предполагается, что такие возбуждения описываются в рамках модели Дирака. Построено семейство самосопряженных гамильтонианов, отвечающих этим возбуждениям для любого заряда примеси, и проведен их спектральный анализ. Показано, что в рассматриваемом случае структура спектров электронных возбуждений качественно другая по сравнению с соответствующими спектрами массивных возбуждений. На основе полученных результатов анализируется локальная поверхностная плотность электронных состояний в графене и ее зависимость от выбора самосопряженных гамильтонианов.

DOI: 10.31857/S0044451021060079

1. ВВЕДЕНИЕ

Присутствие примесей и дефектов может значительно изменять электронные свойства графена. Например, присутствие заряженных примесей, таких как кулоновские центры, оказывает существенное влияние на подвижность носителей заряда [1]. В связи с этим исследование свойств графена при наличии взаимодействия носителей с кулоновскими центрами важно для понимания электронного транспорта в присутствии примесей, см. работы [2–6]. Технически задача облегчается тем обстоятельством, что низкоэнергетические электронные возбуждения в монослое графена во внешнем электромагнитном поле хорошо описываются моделью Дирака, где они представляют собой киральные дираковские фермионы в $2 + 1$ измерениях [7, 8].

Корректное описание таких возбуждений (часто называемых ниже квазичастицами) в окрестности точечной кулоновской примеси требует правильного определения дираковского гамильтониана как само-

сопряженного (в дальнейшем с.с.) оператора в соответствующем гильбертовом пространстве. А для движения электрона в кулоновском поле проблема определения гамильтониана как с.с. оператора является нетривиальной только для ядер с большими Z ($Z > 119$), которые не возникают в лабораторных условиях, для кулоновских примесей в графене этот порог значительно меньше из-за свойств дираковских квазичастиц в дираковской модели графена.

Заметим, что в зависимости от структуры подложки, на которой синтезирован графен, может возникнуть (или не возникнуть) щель в электронном спектре между валентной зоной и зоной проводимости. Это определяется свойствами взаимодействия между слоем графена и подложкой, которое нарушает симметрию между подрешетками, но сохраняет трансляционную симметрию. Для ненулевой щели низкоэнергетические электронные возбуждения в модели Дирака являются массивными фермионами, в то время как, если щель между валентной зоной и зоной проводимости отсутствует, то эти возбуждения являются безмассовыми фермионами. Величину щели можно менять, варьируя химический состав и концентрацию подложки [9].

В предыдущей работе с участием авторов [10] с помощью теории с.с. расширений симметрических

* E-mail: breev@mail.tsu.ru

** E-mail: dmitrygitman@hotmail.com

операторов построено семейство с.с. гамильтонианов, описывающих электронные возбуждения в графене со щелью для любого значения заряда примеси. На основе метода направляющих функционалов Крейна проведен спектральный анализ таких гамильтонианов. В частности, найдены их спектры и соответствующие полные наборы (обобщенных) собственных функций. При этом выбор с.с. гамильтониана из всех математически возможных является отдельной физической задачей. Отметим, что результаты, полученные в работе, не могут быть непосредственным образом использованы в безмассовом случае, так как области определения с.с. дираковских гамильтонианов для графена со щелью обращаются в нуль в безмассовом пределе (для графена с нулевой щелью). Поэтому случай графена с нулевой щелью требует отдельного исследования, которому и посвящена настоящая работа.

В данной работе мы рассматриваем задачу корректного определения дираковского гамильтониана как с.с. оператора для квазичастиц в графене без щели в присутствии кулоновской примеси с произвольным зарядом Z . Представлено рассмотрение всех аспектов этой задачи, основанное на теории с.с. расширений симметрических операторов [11–13]. Строится семейство всех возможных с.с. гамильтонианов, члены которого различаются параметрами соответствующих расширений (таким образом параметризуются ими), и проводится их спектральный анализ. Для этого строятся обобщенные собственные функции всех таких гамильтонианов, причем это делается для любых зарядов примеси. Технически задача сводится к анализу спектров соответствующих с.с. одномерных парциальных радиальных гамильтонианов. Показано, что спектры таких гамильтонианов являются непрерывными и занимают всю вещественную ось \mathbb{R} , в отличие от массивного случая, где имеется как дискретный, так и непрерывный спектр.

Статья организована следующим образом. В разд. 2 приведены определения базовых понятий и соотношений, объясняющих постановку задачи. В разд. 3 описана математически строгая процедура сведения проблемы построения с.с. вращательно-инвариантного дираковского гамильтониана в полном гильбертовом пространстве к задаче построения с.с. одномерных парциальных радиальных гамильтонианов с определенным угловым моментом. Затем, в разд. 4, исследуется общее решение радиальных уравнений для безмассового уравнения Дирака в $2 + 1$ измерении. В разд. 5 строятся с.с. парциальные радиальные гамильтонианы с произ-

вольным допустимым значением углового момента j . Раздел 6 посвящен описанию особенностей полного гамильтониана рассматриваемой модели в зависимости от заряда примеси Z . В разд. 7 с помощью полученных результатов исследуется локальная плотность состояний в графене. Раздел 8 представляет собой краткое заключение.

2. УРАВНЕНИЕ ДИРАКА В $2 + 1$ ИЗМЕРЕНИЯХ ДЛЯ БЕЗМАССОВОЙ ЗАРЯЖЕННОЙ ЧАСТИЦЫ В КУЛОНОВСКОМ ПОЛЕ

Мы работаем в рамках модели Дирака в $2 + 1$ измерении для заряженных квазичастиц в окрестности кулоновской примеси. Пусть в начале декартовой системы координат с осями x и y , лежащими в плоскости графена, находится кулоновская примесь с зарядом Z . Создаваемый ею потенциал с учетом макроскопической диэлектрической проницаемости ϵ имеет вид

$$V(\rho) = -\frac{Ze^2}{\epsilon} \frac{1}{\rho}, \quad \rho = |\mathbf{r}| = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \mathbf{r} = (x, y).$$

Обозначим через \mathbf{K}_s точки Дирака, координаты которых в зоне Бриллюэна выбраны в виде $\mathbf{K}_s = (4\pi s/(3a), 0)$, где $a = 2.46 \text{ \AA}$ — постоянная решетки, а $s = \pm 1$ — изоспиновое квантовое число.

Полное гильбертово пространство \mathfrak{H}_{tot} квантовых состояний квазичастиц является прямой ортогональной суммой двух гильбертовых пространств \mathfrak{H}_s , $s = \pm 1$, каждое из которых связано с соответствующей точкой Дирака \mathbf{K}_s . Пространства \mathfrak{H}_s являются гильбертовыми пространствами двумерных дублетов, так что

$$\mathfrak{H}_{tot} = \mathfrak{H}_1 \oplus \mathfrak{H}_{-1}, \quad \mathfrak{H}_1 = \mathfrak{H}_{-1} = \mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^2) \oplus L^2(\mathbb{R}^2).$$

В силу дальнедействующей природы кулоновского поля, междолинные процессы не учитываются и переходы между гильбертовыми пространствами \mathfrak{H}_s не рассматриваются. Так что полный эффективный гамильтониан \hat{H}_{tot} квазичастиц является прямой ортогональной суммой двух гамильтонианов $\hat{\mathcal{H}}_s$, $s = \pm 1$, каждый из которых действует в соответствующем гильбертовом пространстве \mathfrak{H}_s и может быть рассмотрен отдельно.

В рамках модели Дирака квазичастицы в окрестности каждой точки Дирака \mathbf{K}_s описываются эффективным безмассовым уравнением Дирака [14]:

$$\check{\mathcal{H}}_s \Psi_s = \mathcal{E} \Psi_s, \quad s = \pm 1, \quad (1)$$

где волновые функции Ψ_s являются дублетами, зависящими от \mathbf{r} , $\Psi_s = \Psi_s(\mathbf{r}) = \{\psi_{s\alpha}(\mathbf{r}), \alpha = 1, 2\}$, компоненты $\psi_{s\alpha}(\mathbf{r})$ представляют собой огибающие блоховских функций в двух подрешетках графена A и B соответственно, \check{H}_s — дифференциальные операции, отвечающие уравнению Дирака в $2 + 1$ измерениях,

$$\check{H}_s = \hbar v_F \left(-i [\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y] - \frac{g}{\rho} \right), \quad (2)$$

$$g = \frac{1}{\hbar v_F} \frac{Z e^2}{\epsilon} = \alpha_F \frac{Z}{\epsilon} = \alpha_F Z_{eff}, \quad Z_{eff} = \frac{Z}{\epsilon}.$$

Здесь $v_F \approx 10^6$ см/с — скорость Ферми и $\alpha_F = e^2/(\hbar v_F)$ — «постоянная тонкой структуры» в графене, $\{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$ — матрицы Паули. Вводя обозначения $\hat{H}_s = (\hbar v_F)^{-1} \check{H}_s$, $E = (\hbar v_F)^{-1} \mathcal{E}$, запишем уравнение (1) в следующем виде:

$$\hat{H}_s \Psi_s(\mathbf{r}) = E \Psi_s(\mathbf{r}), \quad s = \pm 1,$$

где дифференциальные операции \hat{H}_s в полярных координатах ρ, ϕ , ($x = \rho \cos \phi$, $y = \rho \sin \phi$) имеют вид

$$\hat{H}_s = -i(s \cos \phi \sigma_x + \sin \phi \sigma_y) \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} (s \sin \phi \sigma_x - \cos \phi \sigma_y) \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{g}{\rho}. \quad (3)$$

Для того чтобы придать физический смысл соответствующей квантовомеханической задаче на собственные значения, мы должны, отправляясь от дифференциальных операций \hat{H}_s , построить соответствующие гамильтонианы \hat{H}_s как с.с. операторы с определенными областями определения в гильбертовом пространстве $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^2) \oplus L^2(\mathbb{R}^2)$. При решении этой задачи мы следуем идеям работы [10], в которой рассмотрена подобная задача для соответствующих массивных квазичастиц.

По определению переменная j принимает полуцелые, положительные и отрицательные, значения, $j = \pm(n + 1/2)$, $n \in \mathbb{Z}_+$, тогда как переменная Z принимает неотрицательные целые значения, $Z \in \mathbb{Z}_+$. В дальнейшем нам будет удобнее рассматривать переменную Z как величину, принимающую непрерывные значения и лежащую на неотрицательной вертикальной полуоси, $Z \in \mathbb{R}_+$, а возвращаться к ее естественным целочисленным значениям в случае необходимости.

3. РЕДУКЦИЯ К РАДИАЛЬНОЙ ЗАДАЧЕ

Начнем с определения начальных симметрических операторов \hat{H}_s^{in} в гильбертовом пространстве

$\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^2) \oplus L^2(\mathbb{R}^2)$, ассоциированных с соответствующими дифференциальными выражениями \hat{H}_s (3). Поскольку коэффициентные функции дифференциальных выражений \hat{H}_s являются гладкими вне начала координат, мы выбираем пространство гладких дублетов с компактным носителем для областей определения $D(\hat{H}_s^{in})$ операторов \hat{H}_s^{in} .

Чтобы обойти проблемы с сингулярностью кулоновского потенциала в начале координат, дополнительно потребуем обращения в нуль дублетов $D(\hat{H}_s^{in})$ в некоторой окрестности начала координат, в общем случае различной для каждого дублета. Заметим, что области определения $D(\hat{H}_s^{in})$ (которые совпадают для обоих значений s) плотны в \mathfrak{H} . Таким образом, операторы \hat{H}_s^{in} определяются как

$$\hat{H}_s^{in} = \left\{ \begin{array}{l} D(\hat{H}_s^{in}) = \{\Psi(\mathbf{r}) : \psi_\alpha(\mathbf{r}) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^2 \setminus \{0\})\}, \\ \hat{H}_s^{in} \Psi(\mathbf{r}) = \hat{H}_s \Psi(\mathbf{r}). \end{array} \right.$$

Очевидно, что так определенный оператор \hat{H}_s^{in} является симметрическим.

Мы строим с.с. гамильтонианы \hat{H}_s как с.с. расширения соответствующих исходных симметрических операторов \hat{H}_s^{in} . Мы требуем, чтобы операторы \hat{H}_s были вращательно-инвариантными, так же как исходные симметрические операторы \hat{H}_s^{in} . Смысл этого требования выяснится ниже.

Существует два различных унитарных представления U_s группы вращений $\text{Spin}(2)$ в \mathfrak{H} , которые связаны с соответствующими операторами \hat{H}_s^{in} . Генератор \hat{J}_s представления группы U_s , называемый оператором углового момента (их два), является с.с. оператором в \mathfrak{H} , определенным на абсолютно непрерывных и периодических по $\phi \in [0, 2\pi]$ дублетах и ассоциированным с дифференциальным выражением

$$\check{J}_s = -i \frac{\partial}{\partial \phi} + s \frac{\sigma_z}{2}.$$

Для каждого s гильбертово пространство \mathfrak{H} представляется в виде прямой ортогональной суммы подпространств \mathfrak{H}_{sj} , которые являются собственными пространствами оператора углового момента \hat{J}_s , соответствующими всем его собственным значениям j ,

$$\mathfrak{H} = \sum_j^\oplus \mathfrak{H}_{-1,j} = \sum_j^\oplus \mathfrak{H}_{+1,j}, \quad (4)$$

$$j = \pm 1/2, \pm 3/2 \dots$$

Подпространство \mathfrak{H}_{sj} с данными s и j состоит из дублетов Ψ_{sj} вида

$$\Psi_{sj}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho}} e^{ij\phi} \begin{pmatrix} e^{-is\phi/2} f(\rho) \\ -ise^{is\phi/2} g(\rho) \end{pmatrix} \in \mathfrak{H}_{sj}, \quad (5)$$

являющихся собственными функциями оператора \hat{J}_s ,

$$\hat{J}_s \Psi_{sj}(\mathbf{r}) = \check{J}_s \Psi_{sj}(\mathbf{r}) = j \Psi_{sj}(\mathbf{r}).$$

Отметим, что спектры операторов \hat{J}_{-1} и \hat{J}_1 совпадают. Функции $f(\rho)$ и $g(\rho)$ называются радиальными функциями. На физическом языке разложения (4) и (5) соответствуют разложению дублетов $\Psi(\mathbf{r}) \in \mathfrak{H}$ по собственным функциям двух разных операторов углового момента \hat{J}_{-1} и \hat{J}_1 .

В дальнейшем для нас является существенным следующий факт. Пусть $L^2(\mathbb{R}_+)$ есть гильбертово пространство радиальных дублетов,

$$F(\rho) = \begin{pmatrix} f(\rho) \\ g(\rho) \end{pmatrix} \in L^2(\mathbb{R}_+),$$

со скалярным произведением

$$\begin{aligned} (F_1, F_2) &= \int_0^\infty F_1^+(\rho) F_2(\rho) d\rho = \\ &= \int_0^\infty [f_1(\rho) f_2(\rho) + g_1(\rho) g_2(\rho)] d\rho, \end{aligned}$$

так что $L^2(\mathbb{R}_+) = L^2(\mathbb{R}_+) \oplus L^2(\mathbb{R}_+)$. Тогда (5) и соотношение

$$\|\Psi_{sj}\|^2 = \int_0^\infty [|f(\rho)|^2 + |g(\rho)|^2] d\rho$$

означают, что пространство $\mathfrak{H}_{sj} \subset \mathfrak{H}$ унитарно эквивалентно гильбертовому пространству $L^2(\mathbb{R}_+)$,

$$\Psi_{sj}(\mathbf{r}) = V_{sj} F(\rho), \quad F(\rho) = V_{sj}^{-1} \Psi_{sj}(\mathbf{r}). \quad (6)$$

Начальные симметрические операторы \hat{H}_s^{in} являются вращательно-инвариантными. А именно, каждый оператор \hat{H}_s^{in} инвариантен относительно представления U_s группы вращений. Таким образом, каждое подпространство \mathfrak{H}_{sj} (собственное пространство генератора \hat{J}_s с собственным значением j) приводит оператор \hat{H}_s^{in} . Другими словами, оператор \hat{H}_s^{in} коммутирует с проекторами P_{sj} на подпространства \mathfrak{H}_{sj} , см. [15]. Это, в свою очередь, означает следующее. Пусть

$$\Psi_s(\mathbf{r}) = \sum_j \Psi_{sj}(\mathbf{r}) \in D(\hat{H}_s^{in}).$$

Тогда

$$\Psi_{sj} = P_{sj} \Psi_s \in D(\hat{H}_s^{in}), \quad \hat{H}_s^{in} \Psi_s = \sum_j \hat{H}_{sj}^{in} \Psi_{sj},$$

где операторы $\hat{H}_{sj}^{in} = P_{sj} \hat{H}_s^{in} P_{sj} = \hat{H}_s^{in} P_{sj}$ представляют собой так называемые части оператора \hat{H}_s^{in} , действующие в \mathfrak{H}_{sj} . Их правило действия дается дифференциальной операцией первого порядка по переменной ρ , которое будет приведено ниже. Итак, каждый начальный симметрический оператор \hat{H}_s^{in} является прямой ортогональной суммой своих частей,

$$\hat{H}_s^{in} = \sum_j \oplus \hat{H}_{sj}^{in},$$

так что исследование вращательно-инвариантного оператора \hat{H}_s^{in} сводится к изучению операторов \hat{H}_{sj}^{in} .

Каждый оператор \hat{H}_{sj}^{in} является симметрическим оператором, действующим в подпространстве \mathfrak{H}_{sj} . Очевидно, он индуцирует симметрический оператор $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ в гильбертовом пространстве $L^2(\mathbb{R}_+)$, который унитарно эквивалентен оператору \hat{H}_{sj}^{in} ,

$$\hat{h}_{in}(Z, j, s) F = V_{sj}^{-1} \hat{H}_{sj}^{in} \Psi_{sj}, \quad \Psi_{sj} = V_{sj} F.$$

Оператор $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{h}_{in}(Z, j, s) &= \\ &= \begin{cases} D_{\hat{h}_{in}(Z, j, s)} = \mathbb{C}_0^\infty(\mathbb{R}_+), \\ \hat{h}_{in}(Z, j, s) F(\rho) = \check{h}(Z, j, s) F(\rho), \end{cases} \quad (7) \end{aligned}$$

где $\mathbb{C}_0^\infty(\mathbb{R}_+) = C_0^\infty(\mathbb{R}_+) \oplus C_0^\infty(\mathbb{R}_+)$. Дифференциальную операцию $\check{h}(Z, j, s)$,

$$\begin{aligned} \check{h}(Z, j, s) &= -i\sigma_y \frac{d}{d\rho} + \frac{\kappa}{\rho} \sigma_x - \frac{g}{\rho}, \\ \kappa &= -sj, \quad g = \alpha_F \epsilon^{-1} Z, \end{aligned} \quad (8)$$

будем называть парциальной радиальной дифференциальной операцией.

Построение с.с. вращательно-инвариантных гамильтонианов \hat{H}_s как с.с. расширений начальных симметрических операторов \hat{H}_s^{in} сводится к построению с.с. парциальных радиальных гамильтонианов $\hat{h}(Z, j, s)$ в $L^2(\mathbb{R}_+)$ как с.с. расширений начальных симметрических парциальных радиальных операторов $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$. А именно, пусть операторы $\hat{h}(Z, j, s)$ являются такими расширениями. Они, очевидно, индуцируют с.с. расширения $\hat{H}_{sj} = V_{sj} \hat{h}(Z, j, s) V_{sj}^{-1}$ начальных симметрических операторов \hat{H}_{sj}^{in} в подпространствах \mathfrak{H}_{sj} . Тогда прямая ортогональная сумма парциальных операторов \hat{H}_{sj} ,

$$\hat{H}_s = \sum_j \oplus \hat{H}_{sj}, \quad (9)$$

представляет собой вращательно-инвариантное расширение начального симметрического оператора \hat{H}_s^{in} . И любое с.с. вращательно-инвариантное расширение начального симметрического оператора \hat{H}_s^{in} имеет структуру (9). Спектр гамильтониана \hat{H}_s дается объединением спектров парциальных радиальных гамильтонианов,

$$\text{spec } \hat{H}_s = \cup_j \text{spec } \hat{h}(Z, j, s),$$

а соответствующие собственные функции, связанные с \mathfrak{H}_{sj} , получаются из собственных функций операторов $\hat{h}(Z, j, s)$ в $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$ с помощью преобразования V_{sj} , см. (6).

4. ОБЩЕЕ РЕШЕНИЕ РАДИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Перейдем к общему решению системы двух линейных обыкновенных дифференциальных уравнений для функций $f(\rho)$ и $g(\rho)$,

$$\begin{aligned} \hat{h}(Z, j, s)F(\rho) &= WF(\rho), \\ F(\rho) &= \begin{pmatrix} f(\rho) \\ g(\rho) \end{pmatrix}, \quad W \in \mathbb{C}, \end{aligned} \tag{10}$$

которое необходимо при исследовании спектра и собственных функций парциальных радиальных гамильтонианов. Действительные значения W в дальнейшем будут обозначаться буквой E . Для наших целей достаточно рассмотреть значения W , принадлежащие верхней комплексной полуплоскости, $W = E + iy, y \geq 0$. Также нас будет интересовать предел $W \rightarrow E + i0$.

Система (10), записанная покомпонентно, имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{df}{d\rho} + \frac{\kappa}{\rho}f(\rho) - \left(W + \frac{g}{\rho}\right)g(\rho) &= 0, \\ \frac{dg}{d\rho} - \frac{\kappa}{\rho}g(\rho) + \left(W + \frac{g}{\rho}\right)f(\rho) &= 0. \end{aligned} \tag{11}$$

Далее, мы называем уравнения (11) радиальными уравнениями. Приведем общее решение радиальных уравнений, следуя стандартной процедуре [12, 16]. Сделаем следующую замену функций и переменных:

$$\begin{aligned} f(\rho) &= z^\Upsilon e^{-z/2} [Q(z) + P(z)], \\ g(\rho) &= iz^\Upsilon e^{-z/2} [Q(z) - P(z)], \\ z &= -2iW\rho, \quad \Upsilon^2 = \kappa^2 - g^2. \end{aligned}$$

В новых переменных и для новых функций получим

$$\begin{aligned} z \frac{d^2 Q(z)}{dz^2} + (\beta - z) \frac{dQ(z)}{dz} - \alpha Q(z) &= 0, \\ P(z) &= -\frac{1}{\kappa} \left(z \frac{d}{dz} + \alpha \right) Q(z), \\ \beta &= 1 + 2\Upsilon, \quad \alpha = \alpha_+, \quad \alpha_+ = \Upsilon - ig. \end{aligned} \tag{12}$$

Видно, что уравнение (12) для функции $Q(z)$ представляет собой известное конфлюэнтное гипергеометрическое уравнение. Пусть $\Upsilon \neq -n/2, n \in \mathbb{N}$. В этом случае общее решение конфлюэнтного гипергеометрического уравнения является линейной комбинацией стандартных гипергеометрических функций $\Phi(\alpha, \beta; z)$ и $\Psi(\alpha, \beta; z)$,

$$Q(z) = A\Phi(\alpha, \beta; z) + B\Psi(\alpha, \beta; z),$$

где A, B — произвольные постоянные, а

$$\begin{aligned} \Psi(\alpha, \beta; z) &= \frac{\Gamma(1 - \beta)}{\Gamma(\alpha - \beta + 1)} \Phi(\alpha, \beta; z) + \\ &+ \frac{\Gamma(\beta - 1)}{\Gamma(\alpha)} z^{1-\beta} \Phi(\alpha - \beta + 1, 2 - \beta; z). \end{aligned}$$

Используя соотношения

$$\begin{aligned} \left(z \frac{d}{dz} + \alpha \right) \Phi(\alpha, \beta; z) &= \alpha \Phi(\alpha + 1, \beta; z), \\ \left(z \frac{d}{dz} + \alpha \right) \Psi(\alpha, \beta; z) &= \alpha(\alpha - \beta + 1) \Psi(\alpha + 1, \beta; z), \\ \alpha - \beta + 1 &= -\alpha_-, \quad \alpha_+ \alpha_- = \kappa^2, \\ \alpha_- &= \Upsilon + ig, \quad a = \frac{\alpha}{\kappa}, \end{aligned}$$

найдем общее решение системы (11) в виде

$$\begin{aligned} Q(z) &= \tilde{A}\Phi(\alpha, \beta; z) + B\Psi(\alpha, \beta; z), \\ P(z) &= -\tilde{A}a\Phi(\alpha + 1, \beta; z) + B\kappa\Psi(\alpha + 1, \beta; z). \end{aligned}$$

Как следует из равенств

$$\begin{aligned} \Phi(\alpha + 1, \beta; z) &= e^z \Phi(\beta - \alpha - 1, \beta; -z), \\ i \frac{1 + a}{1 - a} &= \frac{\kappa + \Upsilon}{g}, \end{aligned}$$

общее решение радиальных уравнений можно представить в следующей форме:

$$\begin{aligned} F(\rho, \Upsilon, W) &= AX(\rho, \Upsilon, W) + \\ &+ Bz^\Upsilon e^{-z/2} [\Psi(\alpha, \beta; z) \varrho_+ - \kappa \Psi(\alpha + 1, \beta; z) \varrho_-], \\ \varrho_\pm &= (\pm 1, i)^T, \quad \tilde{A} = \frac{(-2iW)^{-\Upsilon}}{1 - a} A, \end{aligned} \tag{13}$$

где введен дублет $X(\rho, \Upsilon, W)$,

$$X(\rho, \Upsilon, W) = z^\Upsilon \left[e^{-z/2} \Phi(\alpha, \beta; z) \varrho_+ + ae^{z/2} \Phi(\alpha + 1, \beta; z) \varrho_- \right] = \frac{1-a}{2} (-2iW\rho)^\Upsilon [\Phi_+(\rho, \Upsilon, W) + \Phi_-(\rho, \Upsilon, W) \Xi] d_+,$$

$$\Phi_+(\rho, \Upsilon, W) = e^{iW\rho} \Phi(\alpha, 1 + 2\Upsilon, -2iW\rho) + e^{-iW\rho} \Phi(\alpha_-, 1 + 2\Upsilon, 2iW\rho),$$

$$\Phi_-(\rho, \Upsilon, W) = \frac{1}{iW} [e^{iW\rho} \Phi(\alpha, 1 + 2\Upsilon, -2iW\rho) - e^{-iW\rho} \Phi(\alpha_-, 1 + 2\Upsilon, 2iW\rho)],$$

$$\Xi = \begin{pmatrix} 0 & W \\ -W & 0 \end{pmatrix}, \quad d_\pm = \left(1, \frac{\kappa \pm \Upsilon}{g} \right)^T.$$

В дальнейшем будем использовать некоторые частные решения радиальных уравнений, соответствующие определенному выбору констант A и B и параметра Υ .

Введем новую величину Υ_+ следующим образом:

$$\Upsilon_+ = \Upsilon_+(g, j) = \begin{cases} \gamma = \sqrt{\kappa^2 - g^2} \geq 0, & g \leq |\kappa|, \\ i\sigma = i\sqrt{g^2 - \kappa^2}, & \sigma > 0. \end{cases}$$

Эта величина как функция параметра g имеет нули в точках $g = g_c(j) = |\kappa| = |j|$. В случае $\Upsilon_+ \neq 0$ ($g \neq g_c(j)$) мы имеем два линейно независимых решения F_1 и F_2 , образующих фундаментальную систему решений системы (11),

$$F_1(\rho; W) = F(\rho, \Upsilon_+, W)|_{A=1, B=0} = \rho^{\Upsilon_+} d_+ + O(\rho^{\Upsilon_++1}), \quad \rho \rightarrow 0, \\ F_2(\rho; W) = F(\rho, -\Upsilon_+, W)|_{A=1, B=0} = \rho^{-\Upsilon_+} d_- + O(\rho^{-\Upsilon_++1}), \quad \rho \rightarrow 0.$$

Заметим, что оба дублета F_1 и F_2 являются вещественными целыми функциями от W . Их вронскиан легко находится, $\text{Wr}(F_1, F_2) = -2\Upsilon_+ g^{-1}$. Если $\text{Im } W > 0$, то оба дублета $F_1(\rho; W)$ и $F_2(\rho; W)$ экспоненциально растут при $\rho \rightarrow \infty$. Для вещественных значений $W = E$ дублеты F_1 и F_2 могут быть записаны в терминах кулоновских функций [17],

$$\mathcal{F}_\alpha(\eta; r) = \frac{|\Gamma(\alpha + 1 + i\eta)|}{\Gamma(2\alpha + 2)} (2r)^\alpha r e^{-\pi\eta/2 - ir} \times \Phi(\alpha + 1 - i\eta, 2\alpha + 2, 2ir).$$

Для $\Upsilon_+ = \gamma$ имеем

$$F_1(\rho; E) = \frac{2\Gamma(2\gamma)e^{-\pi\tilde{g}/2}}{|\Gamma(\gamma - i\tilde{g})|} \times |2E|^{-\gamma} (u_+(\gamma)\mathcal{F}_{\gamma-1}(-\tilde{g}, |E|\rho) - \text{sgn}(sjE)u_-(\gamma)\mathcal{F}_\gamma(-\tilde{g}, |E|\rho)), \\ F_2(\rho; E) = F_1(\rho; E)|_{\gamma \rightarrow -\gamma}, \quad (14) \\ u_+(\Upsilon) = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\Upsilon - sj}{g} \end{pmatrix}, \quad u_-(\Upsilon) = \begin{pmatrix} \frac{\Upsilon - sj}{g} \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \tilde{g} = \text{sgn}(E)g.$$

При $\Upsilon_+ = i\sigma$, $\sigma > 0$ имеем другое представление:

$$F_1(\rho; E) = 2\Gamma(2i\sigma) \sqrt{\frac{(\sigma - \tilde{g}) \text{sh}(\sigma - \tilde{g})}{\pi}} \times e^{-\pi\tilde{g}/2} |2E|^{-i\sigma} \left[u_+(i\sigma)\mathcal{F}_{i\sigma-1}(-\tilde{g}, |E|\rho) - \frac{sj}{\tilde{g} - \sigma} u_-(i\sigma)\mathcal{F}_{i\sigma}(-\tilde{g}, |E|\rho) \right], \\ F_2(\rho; E) = \overline{F_1(\rho; E)}.$$

Еще одно полезное решение F_3 дается выражением (13) при $A = 0$, $\Upsilon = \Upsilon_+$ и специальном выборе параметра $B = B(W)$,

$$F_3(\rho; W) = B(W)z^\Upsilon e^{-z/2} [\Psi(\alpha, \beta; z) \varrho_+ - b_- \Psi(\alpha + 1, \beta; z) \varrho_-] = \Gamma(-2\Upsilon_+) F_1(\rho; W) - \frac{g\omega(W)}{2\Upsilon_+} F_2(\rho; W),$$

где

$$\omega(W) = -i \frac{\Gamma(1 + 2\Upsilon_+) \Gamma(-\alpha_-)}{a\Gamma(\alpha) [\kappa - \Upsilon_+]} \left(2e^{-i\pi/2} W \right)^{-2\Upsilon_+} = -\text{Wr}(F_1, F_3), \\ B(W) = \frac{1}{2} \Gamma(-\alpha_-) \left[1 + \frac{\kappa + \Upsilon_+}{ig} \right] \left(2e^{-i\pi/2} W \right)^{-\Upsilon_+}.$$

Если $\text{Im } W > 0$, то дублет $F_3(\rho; W)$ убывает экспоненциально при $\rho \rightarrow \infty$ (с точностью до некоторого полинома).

5. САМОСОПРЯЖЕННЫЕ РАДИАЛЬНЫЕ ГАМИЛЬТониАНЫ

Поскольку все возможные с.с. парциальные радиальные гамильтонианы $\hat{h}(Z, j, s)$ ассоциируются с общим дифференциальным выражением $\hat{h}(Z, j, s)$ в (8), их определение сводится к указанию их области определения $D_{h(Z,j,s)} \subset \mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$. Каждый оператор $\hat{h}(Z, j, s)$ представляет собой с.с. расширение

начального симметрического оператора $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ в (7), определенного в пространстве $\mathbb{C}_0^\infty(\mathbb{R}_+)$ гладких дублетов с компактным носителем на полуоси \mathbb{R}_+ . В то же время каждый оператор $\hat{h}(Z, j, s)$ есть с.с. сужение сопряженного оператора $\hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$, который действует на так называемой естественной области определения $D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$ для $\check{h}(Z, j, s)$, состоящей из дублетов $F(\rho) \in \mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$, абсолютно непрерывных в пространстве \mathbb{R}_+ , и таких, что

$$\check{h}(Z, j, s)F(\rho) \in \mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+),$$

$$D_{\hat{h}_{in}(Z, j, s)} \subset D_{\hat{h}(Z, j, s)} \subseteq D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+).$$

Поскольку коэффициентные функции дифференциальной операции $\check{h}(Z, j, s)$ действительны, индексы дефекта исходного симметрического оператора $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ равны, так что с.с. расширения $\hat{h}(Z, j, s)$ существуют для любых значений параметров Z и j .

Согласно работам [10, 12], с.с. расширения $\hat{h}(Z, j, s)$ оператора $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ будем строить как с.с. сужения сопряженного оператора $\hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$, которые определяются некоторыми асимптотическими с.с. граничными условиями.

Оценим асимметрию оператора $\hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$ в терминах (асимптотических) граничных значений дублетов из его области определения $D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$. Для этого введем квадратичную форму асимметрии Δ_* для оператора $\hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$ соотношением

$$\Delta_*(F) = (F, \hat{h}_{in}^+ F) - (\hat{h}_{in}^+ F, F) = 2i \operatorname{Im} (F, \hat{h}_{in}^+ F) = \int_0^\infty F^+(\rho) (\check{h}F)(\rho) d\rho - \int_0^\infty (\check{h}F)^+(\rho) F(\rho) d\rho. \quad (15)$$

Форма (15) показывает, в какой мере оператор $\hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$ отклоняется от симметрического оператора. Если $\Delta_* \equiv 0$, то оператор $\hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$ является симметрическим и поэтому с.с. оператором. Тогда $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ является существенно с.с. оператором и его единственным с.с. расширением является сопряженный ему оператор $\hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$. Если $\Delta_* \neq 0$, то с.с. оператор $\hat{h}(Z, j, s)$ находится как сужение оператора $\hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$ на область $D_{\hat{h}(Z, j, s)} \subseteq D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$, такую, что сужение формы Δ_* на $D_{\hat{h}(Z, j, s)}$ равно нулю, и область $D_{\hat{h}(Z, j, s)}$ нельзя расширить с сохранением условия $\Delta_* \equiv 0$.

При помощи интегрирования по частям в правой части (15) и с учетом (8) легко увидеть, что форма асимметрии Δ_* задается выражением

$$\Delta_*(F) = [F](\infty) - [F](0), \quad [F](\infty) = \lim_{\rho \rightarrow \infty} [F](\rho),$$

$$[F](0) = \lim_{\rho \rightarrow 0} [F](\rho),$$

$$[F](\rho) = -iF^+(\rho)\sigma_y F(\rho) = -\left[\overline{f(\rho)}g(\rho) - \overline{g(\rho)}f(\rho)\right].$$

Из квадратичной интегрируемости дублета $\check{h}(Z, j, s)F$ для $F \in D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$ следует квадратичная интегрируемость производной $F'(\rho)$ на бесконечности. Отсюда следует, что любой дублет $F \in D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$ убывает на бесконечности, $[F](\infty) = 0$, и форма асимметрии Δ_* определяется поведением данных дублетов в нуле:

$$\Delta_*(F) = -[F](0) = \lim_{\rho \rightarrow 0} \left(\overline{f(\rho)}g(\rho) - \overline{g(\rho)}f(\rho)\right). \quad (16)$$

Для вычисления формы асимметрии (16) нам необходимо иметь явный вид дублетов F из области определения $D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$. В связи с этим заметим, что данные дублеты можно рассматривать как квадратично интегрируемые решения неоднородного дифференциального уравнения $\check{h}(Z, j, s)F(\rho) = G(\rho)$ с правой частью G , принадлежащей $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$. Любое решение данного неоднородного дифференциального уравнения может быть представлено в виде

$$F(\rho) = c_1 u_1(\rho) + c_2 u_2(\rho) + I_1(\rho) + I_2(\rho),$$

$$c_1, c_2 = \text{const},$$

$$u_1(\rho) = d_+ \rho^{\Upsilon_+},$$

$$u_2(\rho) = \begin{cases} d_- \rho^{-\Upsilon_+}, & g \neq g_c(j), \\ d_0(\rho), & g = g_c(j), \end{cases}$$

$$\check{h}(Z, j, s)u_k(\rho) = 0, \quad (17)$$

$$d_\pm = \begin{pmatrix} 1 \\ (\kappa \pm \Upsilon_+)/g \end{pmatrix},$$

$$d_0(\rho) = \begin{pmatrix} \ln \rho - \zeta(j, s)g_c^{-1}(j) \\ \zeta(j, s) \ln \rho \end{pmatrix},$$

$$\zeta(j, s) = \operatorname{sgn}(\kappa) = -s \operatorname{sgn}(j),$$

где $I_1(\rho)$ и $I_2(\rho)$ — частные решения неоднородного уравнения,

$$I_1(\rho) = \begin{cases} \frac{g}{2\Upsilon_+} \int_{\rho}^{\rho_0} [u_1(\rho) \otimes u_2(\rho')] G(\rho') d\rho', & \Upsilon = \Upsilon_+ \geq 1/2, \quad \rho_0 > 0, \\ -\frac{g}{2\Upsilon_+} \int_0^{\rho} [u_1(\rho) \otimes u_2(\rho')] G(\rho') d\rho', & \Upsilon = \Upsilon_+ < 1/2, \quad \Upsilon = i\sigma, \quad \sigma > 0, \\ g_c(j) \int_0^{\rho} [u_1(\rho) \otimes u_2(\rho')] G(\rho') d\rho', & \Upsilon = 0, \end{cases} \quad (18)$$

$$I_2(\rho) = \begin{cases} \frac{g}{2\Upsilon_+} \int_{\rho}^0 [u_2(\rho) \otimes u_1(\rho')] G(\rho') d\rho', & \Upsilon \neq 0, \\ -g_c(j) \int_0^{\rho} [u_2(\rho) \otimes u_1(\rho')] G(\rho') d\rho', & \Upsilon = 0. \end{cases}$$

Выражения (17) и (18) позволяют найти асимптотическое поведение дублетов в нуле и вычислить форму асимметрии (16). Из (17) и (18) следует, что поведение дублетов F в нуле существенным образом зависит от значений параметров j и Z .

Удобно разбить верхнюю полуплоскость (j, Z) на так называемую несингулярную и сингулярную области, в которых проблема нахождения с.с. расширений $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ имеет принципиально разные решения. Эти области разделяются симметричной сингулярной кривой $Z = Z_s(j)$, где $Z_s(j) = \alpha_F^{-1} \epsilon \sqrt{j^2 - 1/4}$, на которой $g = g_s(j) = \sqrt{j^2 - 1/4}$ и $\Upsilon_+ = \gamma = 1/2$. Несингулярная область определяется неравенством $Z \leq Z_s(j)$, что эквивалентно неравенству $\Upsilon_+ = \gamma \geq 1/2$. Сингулярная область определяется неравенством $Z > Z_s(j)$, что равносильно соотношению $0 \leq \Upsilon_+ = \gamma < 1/2$ или $\Upsilon_+ = i\sigma, \sigma > 0$. Так как сингулярная кривая является верхней границей несингулярной области, значение $Z_s(j)$ будем называть максимальным несингулярным значением Z для данного j .

Мы делим сингулярную область на три подмножества: субкритическую, критическую и сверхкритическую. Субкритическая область определяется неравенствами $Z_s(j) < Z < Z_c(j)$, что эквивалентно $0 < \Upsilon_+ = \gamma < 1/2$, где $Z_c(j) = \alpha_F^{-1} \epsilon |j|$. Значение $Z_c(j)$ будем называть критическим значением Z для данного j . Критическая область представляет собой критическую кривую $Z = Z_c(j)$, что равносильно $g = g_c(j) = |j|$ или $\Upsilon_+ = \gamma = 0$. Сверхкритическая область определяется неравенством $Z > Z_c(j) = \alpha_F^{-1} \epsilon |j|$, которое эквивалентно тому, что $\Upsilon_+ = i\sigma$, где $\sigma = \sqrt{g^2 - j^2} > 0$.

Далее, будем строить с.с. радиальные гамильтонианы $\hat{h}(Z, j, s)$ как с.с. расширения оператора

$\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ в каждой из четырех областей изменения заряда примеси Z .

5.1. Несингулярная область

Вычислим форму асимметрии (16) для несингулярной области $Z \leq Z_s(j), \Upsilon_+ = \gamma \geq 1/2$. Для интегралов (18) справедлива оценка

$$I_1(\rho) = O(\rho^{1/2}), \quad I_2(\rho) = O(\rho^{1/2}), \quad \rho \rightarrow 0. \quad (19)$$

Из (17) следует, что функция $u_2(\rho) \sim \rho^\gamma$ квадратично интегрируема в начале координат, а функция $u_2(\rho) \sim \rho^{-\gamma}$ не является квадратично интегрируемой. Дублеты $F \in D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$ определяются выражением (17) с $c_2 = 0$ и ведут себя как $O(\rho^{1/2})$ при $\rho \rightarrow 0$. Тогда форма асимметрии равна нулю во всей области $D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$.

Отсюда следует, что в несингулярной области каждый парциальный радиальный гамильтониан определяется единственным образом, $\hat{h}_1(Z, j, s) = \hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$. Здесь нижний индекс «1» используется как символ несингулярной области (нижние индексы «2», «3», «4» вместе с другими соответствующими индексами будут относиться к определенным подобластям сингулярной области).

Другими словами, начальный симметрический оператор $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ является существенно с.с. оператором, так как его индексы дефекта равны $(0, 0)$, а область определения оператора $\hat{h}_1(Z, j, s)$ является естественной областью определения для $\check{h}(Z, j, s), D_{\hat{h}_1(Z, j, s)} = D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$.

Проведем спектральный анализ с.с. оператора $\hat{h}_1(Z, j, s)$. Построим функцию Грина данного оператора:

$$G(\rho, \rho'; W) = \omega^{-1}(W) \begin{cases} F_3(\rho; W) \otimes F_1(\rho'; W), & \rho > \rho', \\ F_1(\rho; W) \otimes F_3(\rho'; W), & \rho < \rho'. \end{cases}$$

В качестве дублета, определяющего направляющий функционал, выберем вещественно-целый дублет $U_1(\rho; W) = F_1(\rho; W)$. Так же как и в массивном случае, можно показать, что данный направляющий функционал является простым (см. [12]). Производная $\sigma'(E)$ спектральной функции связана с функцией Грина и простым направляющим функционалом $U_1(\rho; W)$ соотношением

$$U_1(c; E) \otimes U_1(c; E) \sigma'(E) = \pi^{-1} \operatorname{Im} G(c-0, c+0; E+i0),$$

где c — произвольная точка в интервале $(0; \infty)$.

Случай полуцелых значений параметра $\gamma = \ell/2$, $\ell \in \mathbb{N}$, требует дополнительного исследования, так как дублет $F_2(\rho; W)$ имеет сингулярность вида $\Gamma(-2\gamma)$ в точке $\gamma = \ell/2$,

$$\lim_{\gamma \rightarrow \ell/2} \frac{F_2(\rho; W)}{\Gamma(-2\gamma)} = -a_\ell(W) F_1(\rho; W)|_{\gamma=\ell/2},$$

$$a_\ell(W) = 2\gamma \left[g \omega(W)|_{\gamma=\ell/2} \right]^{-1},$$

где функция $a_\ell(W)$ представляет собой полином по W с вещественными коэффициентами:

$$a_\ell(W) = \frac{2^\ell \pi \gamma}{g \ell!} \left(2 - \frac{\ell}{\kappa} \right) \times \frac{e^{-\pi g} - (-1)^\ell e^{\pi g}}{[(-1)^\ell - \operatorname{ch}(2\pi g)] |\Gamma(ig - \ell/2)|^2} W^\ell.$$

В окрестности $\ell - 1 < 2\gamma < \ell + 1$, $\ell \in \mathbb{N}$, точки $\gamma = \ell/2$ дублет $F_2(\rho; W)$ может быть представлен в виде

$$F_2(\rho; W) = -a_\ell(W) \Gamma(-2\gamma) F_1(\rho; W) + U_\ell(\rho; W), \quad (20)$$

где дублет $U_\ell(\rho; W)$ является вещественно-целым, имеет конечный предел при $\gamma \rightarrow \ell/2$ и удовлетворяет радиальным уравнениям (11). Из (20) следует, что

$$U_\ell(\rho; W) = d_- \rho^{-\gamma} + O(\rho^{1-\gamma})$$

при $\rho \rightarrow 0$.

Так как дублеты $F_1(\rho; W)$ и $U_\ell(\rho; W)$ линейно независимы, $\operatorname{Wr}(F_1, U_\ell) = -2\gamma/g \neq 0$, то в окрестности $\ell - 1 < 2\gamma < \ell + 1$ точки $\gamma = \ell/2$ дублет $F_3(\rho; W)$ допускает разложение:

$$F_3(\rho; W) = \omega(W) \left[A_\ell(W) F_1(\rho; W) + \frac{g}{2\gamma} U_\ell(\rho; W) \right],$$

$$A_\ell(W) = \Gamma(-2\gamma) \left[\omega^{-1}(W) - \omega^{-1}(W) \Big|_{\gamma=\ell/2} \right].$$

Тогда для $\ell - 1 < 2\gamma < \ell + 1$ имеем

$$G(c-0, c+0, E+i0) = A_\ell(E+i0) F_1(c; E) \otimes F_1(c; E) + \frac{g}{2\gamma} F_1(c; E) \otimes U_\ell(c; E).$$

В силу действительности дублетов $F_1(c; E)$ и $U_\ell(c; E)$ производная спектральная функция представима следующим образом:

$$\sigma'_1(E) = \pi^{-1} \operatorname{Im} A_\ell(E+i0).$$

Заметим, что функция $A_\ell(E+i0)$ непрерывна по γ в точке $\gamma = \ell/2$. Поэтому мы можем положить

$$\sigma'_1(E)|_{\gamma=\ell/2} = \lim_{\gamma \rightarrow \ell/2} \sigma'_1(E)|_{\gamma \neq \ell/2},$$

$$\sigma'_1(E)|_{\gamma \neq \ell/2} = \pi^{-1} \Gamma(-2\gamma) \operatorname{Im} \omega^{-1}(E+i0).$$

В тех точках, в которых $\omega(E+i0)$ отлична от нуля, спектральная функция имеет вид

$$\sigma'_1(E) = \pi^{-1} \Gamma(-2\gamma) \operatorname{Im} \omega^{-1}(E) = \left[\frac{|2E|^\gamma}{|\Gamma(ig - \gamma)| |\Gamma(2\gamma + 1)|} \right]^2 \times \frac{\pi(\kappa - \gamma) e^{\operatorname{sgn}(E)\pi g}}{\kappa (\operatorname{ch}(2\pi g) - \cos(2\pi\gamma))} > 0.$$

Так как функция $\omega(E)$ отлична от нуля для всех E , непрерывна на $(-\infty, 0) \cup (0; \infty)$ и принимает комплексные значения, то значения $E \in (-\infty, \infty)$ являются точками непрерывного спектра оператора $\hat{h}_1(Z, j, s)$. В данных точках спектра функция $\sigma'_1(E)$ положительна, $\sigma'_1(E) = Q_1^2(E) > 0$, где $Q_1(E) = \sqrt{\sigma'_1(E)}$ — нормировочный множитель для соответствующей (обобщенной) собственной функции $U_1(\rho; E)$ непрерывного спектра.

Таким образом, спектр каждого парциального радиального гамильтониана $\hat{h}_1(Z, j, s)$ в несингулярной области является простым (невыврожденным) и состоит только из непрерывного спектра,

$$\operatorname{spec} \hat{h}_1(Z, j, s) = (-\infty, \infty).$$

Ортонормированные (обобщенные) собственные функции $U_{1E}(\rho)$, $|E| \geq 0$ непрерывного спектра, отвечающие парциальным радиальным гамильтонианам $\hat{h}_1(Z, j, s)$, образуют полную ортонормированную систему в пространстве $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$ в смысле формулы обращения (см. [12]) и имеют вид

$$\begin{aligned}
 U_{1E}(\rho) &= Q_1(E)F_1(\rho; E), \quad Q_1(E) = \sqrt{\sigma_1'(E)} = \\
 &= \frac{|2E|^\gamma e^{\text{sgn}(E)\pi g/2}}{|\Gamma(ig - \gamma)| \Gamma(2\gamma + 1)} \times \\
 &\quad \times \sqrt{\frac{\pi(\kappa - \gamma)}{\kappa [\text{ch}(2\pi g) - \cos(2\pi\gamma)]}}. \quad (21)
 \end{aligned}$$

5.2. Субкритическая область

В субкритической области изменения заряда, $Z_s(j) < Z < Z_c(j)$, выполняется соотношение $0 < \Upsilon_+ = \gamma < 1/2$. Здесь для интегралов (18) остается справедливой оценка (19). Так как функции $u_1(\rho) \sim \rho^\gamma$ и $u_2(\rho) \sim \rho^{-\gamma}$ квадратично интегрируемы в начале координат для $\gamma < 1/2$, то для дублетов $F \in D_{h(Z,j,s)}^*(\mathbb{R}_+)$ имеем

$$F(\rho) = c_1\rho^\gamma + c_2\rho^{-\gamma} + O(\rho^{1/2}), \quad \rho \rightarrow 0. \quad (22)$$

Отсюда следует, что форма асимметрии является нетривиальной антиэрмитовой квадратичной формой по коэффициентам асимптотики (22):

$$\Delta_*(F) = \frac{2\gamma}{g} (\bar{c}_2 c_1 - \bar{c}_1 c_2).$$

Это означает, что индексы дефекта оператора $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ равны (1, 1) и существует семейство с.с. расширений $\hat{h}_{2,\nu}(Z, j, s)$ данного оператора, которые параметризуются параметром $\nu \in [-\pi/2, \pi/2]$, $-\pi/2 \sim \pi/2$, и характеризуются с.с. граничными условиями в начале координат,

$$F(\rho) = c[\rho^\gamma d_+ \cos \nu + \rho^{-\gamma} d_- \sin \nu] + O(\rho^{1/2}), \quad \rho \rightarrow 0, \quad (23)$$

где c — произвольное комплексное число. Таким образом, область определения $D_{h_{2,\nu}(Z,j,s)}$ гамильтониана $\hat{h}_{2,\nu}(Z, j, s)$ имеет вид

$$\begin{aligned}
 D_{h_{2,\nu}(Z,j,s)} &= \left\{ F(\rho) : F(\rho) \in D_{h(Z,j,s)}^*(\mathbb{R}_+), \right. \\
 &\quad \left. F \text{ удовлетворяет (23)} \right\}.
 \end{aligned}$$

Обратимся к спектральному анализу с.с. операторов $\hat{h}_{2,\nu}(Z, j, s)$. В качестве дублета, определяю-

щего простой направляющий функционал, выберем вещественно-целый дублет

$$U_{2,\nu}(\rho; W) = F_1(\rho; W) \cos \nu + F_2(\rho; W) \sin \nu.$$

Построим соответствующую функцию Грина:

$$\begin{aligned}
 G(\rho, \rho'; W) &= \\
 &= \omega_1^{-1}(W) \begin{cases} F_3(\rho; W) \otimes U_{2,\nu}(\rho'; W), & \rho > \rho', \\ U_{2,\nu}(\rho; W) \otimes F_3(\rho'; W), & \rho < \rho', \end{cases}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \omega_1(W) &= -\text{Wr}(F_1, F_3) = \\
 &= \omega(W) \cos \nu + g^{-1}\Gamma(1 - 2\gamma) \sin \nu,
 \end{aligned}$$

а дублет $F_3(\rho; W)$ запишем в форме

$$\begin{aligned}
 F_3(\rho; W) &= \frac{g}{2\gamma} [\tilde{\omega}_1 U_{2,\nu}(\rho; W) + \omega_1 \tilde{U}_{2,\nu}(\rho; W)], \\
 \tilde{U}_{2,\nu}(\rho; W) &= -F_1(\rho; W) \sin \nu + F_2(\rho; W) \cos \nu, \\
 \tilde{\omega}_1(W) &= \omega(W) \sin \nu - g^{-1}\Gamma(1 - 2\gamma) \cos \nu.
 \end{aligned}$$

Тогда

$$\begin{aligned}
 G(c - 0, c + 0, E + i0) &= \\
 &= \omega_{2,\nu}^{-1}(E + i0) U_{2,\nu}(c; E) \otimes U_{2,\nu}(c; E) + \\
 &\quad + \frac{g}{2\gamma} U_{2,\nu}(c; E) \otimes \tilde{U}_{2,\nu}(c; E),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \omega_2(W) &= \frac{2\gamma \omega_1(W)}{g \tilde{\omega}_1(W)} = \\
 &= \frac{2\gamma \omega(W) \cos \nu + g^{-1}\Gamma(1 - 2\gamma) \sin \nu}{g \omega(W) \sin \nu - g^{-1}\Gamma(1 - 2\gamma) \cos \nu}.
 \end{aligned}$$

Дублеты $U_{2,\nu}(\rho; E)$ и $\tilde{U}_{2,\nu}(\rho; E)$ действительны и производная $\sigma'_{2,\nu}(E)$ спектральной функции имеет вид

$$\sigma'_{2,\nu}(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\omega_{2,\nu}(E + i0)}.$$

Функция $\omega_2(E)$ непрерывна, отлична от нуля и $\omega_{2,\nu}(E + i0) = \omega_{2,\nu}(E)$. Тогда для производной спектральной функции имеем выражение

$$\sigma'_{2,\nu}(E) = \frac{A(E) [\text{ctg}(\pi g) + \delta \text{sh}(\pi g)] \sin(2\pi\gamma)}{[\text{ch}(2\pi g) - \cos(2\pi\gamma)] \cos \nu + A^2(E)(\pi\gamma/g)^2(1 - \cos(2\nu)) + B_\delta A(E) \text{ch}(2\nu)},$$

$$A(E) = \frac{\kappa - \gamma}{2\gamma\kappa} |\Gamma(ig - \gamma)|^2 \frac{\Gamma(1 - 2\gamma)}{\Gamma(1 + 2\gamma)} |2E|^{2\gamma}, \quad \delta = \text{sgn}(E),$$

$$B_\delta = \frac{4\pi\gamma}{g} [\cos^2(\pi\gamma) \text{sh}(\pi g) - \delta \sin^2(\pi\gamma) \text{ch}(\pi g)].$$

Функция $\sigma'_{2,\nu}(E)$ непрерывна и, следовательно, спектр оператора $\hat{h}_{2,\nu}(Z, j, s)$ является непрерывным и простым,

$$\text{спес } \hat{h}_{2,\nu}(Z, j, s) = (-\infty, \infty).$$

В итоге нормированные (обобщенные) собственные функции $U_{2,\nu}(\rho)$, соответствующие непрерывному спектру и дающиеся выражениями

$$\begin{aligned} U_{2,\nu,E}(\rho) &= Q_{2,\nu}(E)U_{2,\nu}(\rho; E) = \\ &= Q_{2,\nu}(E) [F_1(\rho; E) \cos \nu + F_2(\rho; E) \sin \nu], \quad (24) \\ Q_{2,\nu}(E) &= \sqrt{\sigma'_{2,\nu}(E)}, \end{aligned}$$

образуют полную ортонормированную систему в пространстве $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$ в смысле формул обращения.

5.3. Критическая область

Критическая область определяется критической кривой $Z = Z_c(j)$, на которой $g = g_c(j)$ и $\Upsilon_+ = \gamma = 0$. Отметим, что в данной области физические значения пар j (полуцелое число) и Z (целое число) лежат на критической кривой для очень специальных значений «постоянной тонкой структуры» в графене, α_F/ϵ , $\alpha_F/\epsilon = |j|/Z$. В частности, если α_F/ϵ — иррациональное число, никакая физическая пара (j, Z) не лежит на критической кривой.

В этой области асимптотическое поведение дублетов $F \in D_{\hat{h}(Z,j,s)}^*(\mathbb{R}_+)$ дается формулами (17) с учетом того, что

$$I_1(\rho) = O(\rho^{1/2} \ln \rho), \quad I_2(\rho) = O(\rho^{1/2} \ln \rho),$$

при $\gamma = 0, \rho \rightarrow 0$:

$$F(\rho) = c_1 d_+ + c_2 d_0(\rho) + O(\rho^{1/2} \ln \rho), \quad \rho \rightarrow 0.$$

Отсюда для формы асимметрии получаем

$$\Delta_*(F) = g_c^{-1}(j) (\overline{c_1} c_2 - \overline{c_2} c_1).$$

Следовательно, в этой области также имеется однопараметрическое семейство с.с. расширений $\hat{h}_{3,\nu}(Z, j, s)$, $\nu \in [-\pi/2, \pi/2]$, $-\pi/2 \sim \pi/2$, которые задаются асимптотическими с.с. граничными условиями

$$\begin{aligned} F(\rho) &= c[d_0(\rho) \cos \nu + d_+ \sin \nu] + \\ &+ O(\rho^{1/2} \ln \rho), \quad \rho \rightarrow 0, \quad (25) \end{aligned}$$

где постоянный дублет $d_+ = d_+|_{\gamma=0} = (1, \zeta)^T$ и дублет $d_0(\rho)$, зависящий от ρ , определяется в (17).

Таким образом, область определения $D_{h_{3,\nu}(Z,j,s)}$ гамильтониана $\hat{h}_{3,\nu}(Z, j, s)$ имеет вид

$$\begin{aligned} D_{h_{3,\nu}(Z,j,s)} &= \left\{ F(\rho) : F(\rho) \in D_{\hat{h}(Z,j,s)}^*(\mathbb{R}_+), \right. \\ &\left. F \text{ удовлетворяет (25)} \right\}. \end{aligned}$$

Отметим, что в случае $\Upsilon_+ = \gamma = 0$ дублеты F_1 и F_2 совпадают. Поэтому в качестве двух линейно независимых решений радиальных уравнений (11) при $\gamma = 0$ выберем два линейно независимых вещественно-целых решения $F_1^{(0)}(\rho; W)$, $F_2^{(0)}(\rho; W)$ и их линейную комбинацию $F_3^{(0)}$. А именно:

$$\begin{aligned} F_1^{(0)}(\rho; W) &= F_1(\rho; W)|_{\gamma=0} = d_+ + O(\rho), \quad \rho \rightarrow 0, \\ F_2^{(0)}(\rho; W) &= \partial_\gamma F_1(\rho; W)|_{\gamma=0} - \frac{\zeta(j, s)}{g_c(j)} F_1^{(0)}(\rho; W) = \\ &= d_0(\rho) + O(\rho \ln \rho), \quad \rho \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Соответствующий вронскиан имеет вид

$$\text{Wr}(F_1^{(0)}, F_2^{(0)}) = g_c^{-1}(j).$$

В качестве аналога дублета $F_3(\rho; W)$ при $\gamma = 0$ возьмем дублет

$$\begin{aligned} F_3^{(0)}(\rho; W) &= -\lim_{\gamma \rightarrow 0} F_3(\rho; W) = \\ &= F_2^{(0)}(\rho; W) + f(W)F_1^{(0)}(\rho; W), \end{aligned}$$

где

$$f(W) = g_c(j)\omega^{(0)}(W),$$

$$\begin{aligned} \omega^{(0)}(W) &= -\text{Wr}(F_2^{(0)}, F_3^{(0)}) = \\ &= g_c^{-1}(j) \left[\ln \left(2e^{-i\pi/2} W \right) + \right. \\ &\left. + \frac{\zeta(j, s) + i}{2g_c(j)} + \psi(-ig_c(j)) - 2\psi(1) \right], \end{aligned}$$

$$\psi(x) = \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)}.$$

Спектральный анализ операторов $\hat{h}_{3,\nu}(Z, j, s)$ проводится аналогично случаю субкритической области и мы представим здесь только его окончательные результаты. В качестве дублета, определяющего простой направляющий функционал, выберем величину

$$U_{3,\nu}(W) = F_1^{(0)}(\rho, W) \sin \nu + F_2^{(0)}(\rho, W) \cos \nu,$$

которая является вещественно-целой по W и удовлетворяет с.с. асимптотическим граничным условиям (25). Функция Грина оператора $\hat{h}_{3,\nu}(Z, j, s)$ дается выражением

$$G(\rho, \rho'; W) = \omega_3^{-1}(W) \begin{cases} F_3^{(0)}(\rho; W) \otimes U_{3,\nu}(\rho'; W), & \rho > \rho', \\ U_{3,\nu}(\rho; W) \otimes F_3^{(0)}(\rho'; W), & \rho < \rho', \end{cases}$$

$$\omega_3(W) = -\text{Wr}(U_{3,\nu}, F_3^{(0)}) = g_c^{-1}(j) [f(W) \cos \nu - \sin \nu].$$

Тогда

$$G(c-0, c+0, E+i0) = \omega_{3,\nu}^{-1}(E+i0) U_{3,\nu}(c; E) \otimes U_{3,\nu}(c; E) + g_c(j) U_{3,\nu}(c; E) \otimes \tilde{U}_{3,\nu}(c; E),$$

$$\omega_{3,\nu}(W) = g_c^{-1}(j) \frac{f(W) \cos \nu - \sin \nu}{f(W) \sin \nu + \cos \nu},$$

$$\tilde{U}_{3,\nu}(\rho; W) = F_1^{(0)}(\rho, W) \cos \nu - F_2^{(0)}(\rho, W) \sin \nu.$$

Производная $\sigma'_{3,\nu}(E)$ этой спектральной функции имеет вид

$$\sigma'_{3,\nu}(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\omega_{3,\nu}(E+i0)}.$$

Базисная функция $\omega_{3,\nu}(E)$ отлична от нуля для всех E , непрерывна и принимает комплексные значения. Следовательно,

$$\sigma'_{3,\nu}(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\omega_{3,\nu}(E)} = -\frac{g_c(j) B_\delta / \pi}{(A_\zeta^2 + B_\delta^2) \cos^2 \nu - A_\zeta \sin(2\nu) + \sin^2 \nu},$$

$$A_\zeta = \text{Re} f(W) = -2\psi(1) + \zeta(j, s) g_c^{-1}(j) / 2 + \ln |2E| + \text{Re} \psi(-ig_c(j)),$$

$$B_\delta = \text{Im} f(W) = (g_c^{-1}(j) - \pi) \frac{\delta}{2} + \text{Im} \psi(-ig_c(j)), \quad \delta = \text{sgn}(E).$$

Простой спектр гамильтониана $\hat{h}_{3,\nu}(Z, j, s)$ дается выражением

$$\text{спес } \hat{h}_{3,\nu}(Z, j, s) = (-\infty, \infty).$$

Нормированные (обобщенные) собственные функции $U_{3,\nu}(\rho)$, отвечающие непрерывному спектру, имеют вид

$$U_{3,\nu,E}(\rho) = Q_{3,\nu}(E) U_{3,\nu}(\rho; E) = Q_{3,\nu}(E) [F_1^{(0)}(\rho; E) \cos \nu + F_2^{(0)}(\rho; E) \sin \nu], \quad (26)$$

$$Q_{3,\nu}(E) = \sqrt{\sigma'_{3,\nu}(E)},$$

и образуют полную ортонормированную систему в пространстве $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$ в смысле формул обращения.

5.4. Сверхкритическая область

Сверхкритическая область определяется условиями $Z > Z_c(j)$ и $\Upsilon_+ = i\sigma$, где $\sigma = \sqrt{g^2 - j^2} > 0$. В этой области асимптотическое поведение дублетов $F \in D_{\hat{h}(Z,j,s)}^*(\mathbb{R}_+)$ определяется выражением (17), где $I_1(\rho) = O(\rho^{1/2})$, $I_2(\rho) = O(\rho^{1/2})$, при $\rho \rightarrow 0$:

$$F(\rho) = c_1 \rho^{i\sigma} d_+ + c_2 \rho^{-i\sigma} d_- + O(\rho^{1/2}), \quad \rho \rightarrow 0.$$

Для формы асимметрии получаем

$$\Delta_*(F) = 2i\sigma g^{-1} (|c_1|^2 - |c_2|^2).$$

В этой области мы снова имеем однопараметрическое семейство с.с. расширений $\hat{h}_{4,\nu}(Z, j, s)$, $\nu \in [-\pi/2, \pi/2]$, $-\pi/2 \sim \pi/2$, которые задаются асимптотическими с.с. граничными условиями:

$$F(\rho) = c[ie^{i\nu} \rho^{i\sigma} d_+ - ie^{-i\nu} \rho^{-i\sigma} d_-] + O(\rho^{1/2}), \quad \rho \rightarrow 0. \quad (27)$$

Отсюда следует, что область определения $D_{h_{4,\nu}(Z,j,s)}$ гамильтониана $\hat{h}_{4,\nu}(Z, j, s)$ имеет вид

$$D_{h_{4,\nu}(Z,j,s)} = \left\{ F(\rho) : F(\rho) \in D_{\hat{h}(Z,j,s)}^*(\mathbb{R}_+) \text{ и } F \text{ удовлетворяет (27)} \right\}.$$

Спектральный анализ операторов $\hat{h}_{4,\nu}(Z, j, s)$ проводится аналогично предыдущим случаям, представляем здесь только окончательные результаты. В качестве дублета, определяющего простой направляющий функционал, выберем

$$U_{4,\nu}(\rho; W) = ie^{i\nu} F_1(\rho, W) \sin \nu - ie^{-i\nu} F_2(\rho, W),$$

который является вещественно-целым по W и удовлетворяет с.с. асимптотическим граничным условиям (27). Функция Грина оператора $\hat{h}_{4,\nu}(Z, j, s)$ определяется выражением

$$G(\rho, \rho'; W) = \omega_4^{-1}(W) \begin{cases} F_3(\rho; W) \otimes U_{4,\nu}(\rho'; W), & \rho > \rho', \\ U_{4,\nu}(\rho; W) \otimes F_3(\rho'; W), & \rho < \rho', \end{cases}$$

$$\omega_4(W) = -\text{Wr}(U_{4,\nu}, F_3) = -ie^{-i\nu} \frac{\Gamma(1-2i\sigma)}{g} \left[1 - \frac{g\omega(W)}{\Gamma(1-2i\sigma)} e^{2i\nu} \right],$$

из которого следует

$$\begin{aligned}
 G(c-0, c+0, E+i0) &= \\
 &= \omega_{4,\nu}^{-1}(E+i0)U_{4,\nu}(c;E) \otimes U_{4,\nu}(c;E) - \\
 &\quad - \frac{g}{4\sigma}U_{4,\nu}(c;E) \otimes \tilde{U}_{4,\nu}(c;E), \\
 \omega_{4,\nu}(W) &= -4i\sigma g^{-1} \frac{1 - e^{2i\nu}g\omega(W)/\Gamma(1-2i\sigma)}{1 + e^{2i\nu}g\omega(W)/\Gamma(1-2i\sigma)}, \\
 \tilde{U}_{4,\nu}(\rho;W) &= e^{i\nu}F_1(\rho,W) + e^{-i\nu}F_2(\rho,W).
 \end{aligned}$$

Производная $\sigma'_{4,\nu}(E)$ спектральной функции имеет вид

$$\sigma'_{4,\nu}(E) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{\omega_{4,\nu}(E+i0)}.$$

Базисная функция $\omega_{4,\nu}(E)$ отлична от нуля, непрерывна и принимает комплексные значения. Тогда

$$\begin{aligned}
 \sigma'_{4,\nu}(E) &= \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{\omega_{4,\nu}(E)} = -\frac{\delta}{4\sigma} \frac{A_-}{A_+ + B_s(\nu;E)}, \\
 A_{\pm} &= \frac{\pi g^2}{4\sigma j} [\operatorname{sh}^{-1}(\pi\sigma) - \operatorname{ch}^{-1}(\pi\sigma)] \times \\
 &\quad \times \{e^{2\pi\sigma} \operatorname{sh}^{-1}(\pi[g - \delta\sigma]) \pm \operatorname{sh}^{-1}(\pi[g + \delta\sigma])\}, \\
 B_s(\nu;E) &= 2 \operatorname{Re} \{(j + i\sigma)\Gamma(-i(g - \sigma))\Gamma(i(g + \sigma))\} \times \\
 &\quad \times \Gamma^2(-2i\sigma) \exp(2i\sigma \ln|2E| - 2i\nu), \\
 \delta &= \operatorname{sgn}(E).
 \end{aligned}$$

Спектр гамильтониана $\hat{h}_{4,\nu}(Z, j, s)$ является простым и задается выражением

$$\operatorname{спес} \hat{h}_{4,\nu}(Z, j, s) = (-\infty, \infty).$$

Нормированные (обобщенные) собственные функции $U_{4,\nu}(\rho)$, отвечающие непрерывному спектру, имеют вид

$$\begin{aligned}
 U_{4,\nu}(\rho) &= Q_{4,\nu}(E)U_{4,\nu}(\rho;E) = \\
 &= iQ_{4,\nu}(E) [e^{i\nu}F_1(\rho,W) - e^{-i\nu}F_2(\rho,W)], \quad (28) \\
 Q_{4,\nu}(E) &= \sqrt{\sigma'_{4,\nu}(E)}.
 \end{aligned}$$

Они образуют полную ортонормированную систему в пространстве $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$ в смысле формул обращения.

6. САМОСПРЯЖЕННЫЕ ПОЛНЫЕ ГАМИЛЬТониАНЫ

В разд. 5.1–5.4 мы построили все с.с. парциальные радиальные гамильтонианы $\hat{h}(Z, j, s)$ для всех значений заряда Z как с.с. расширения исходных симметрических операторов $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ для любых значений j и s и исследовали спектральные задачи для этих гамильтонианов.

Было показано, что в сингулярной области изменения заряда примеси с.с. парциальные радиальные гамильтонианы $\hat{h}(Z, j, s)$ как с.с. расширения начальных симметрических операторов $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ не определены однозначно для каждой тройки параметров Z, j и s . Поскольку индексы дефекта m_+, m_- каждого симметрического оператора $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ равны (1, 1) и, следовательно, существует однопараметрическое семейство расширений, такое семейство параметризуется параметром $\nu \in [-\pi/2, \pi/2]$, $-\pi/2 \sim \pi/2$. Парциальные радиальные гамильтонианы с одинаковыми значениями Z, j и s , но с разными значениями ν , ассоциированы с одним и тем же дифференциальным выражением $\hat{h}(Z, j, s)$, но различаются своими областями определения, которые являются подмножествами естественной области определения $D_{\hat{h}(Z,j,s)}^*(\mathbb{R}_+)$ для $\hat{h}(Z, j, s)$ и задаются некоторыми асимптотическими граничными условиями в начале координат, содержащими явно параметр ν .

Как и в массивном случае [10] и трехмерной кулоновской задаче [12], сингулярная область делится на три подмножества, которые отличаются характером асимптотических с.с. граничных условий в начале координат. Во всех трех подобластях сингулярной области для каждого оператора $\hat{h}_{k,\nu}$ существует простой направляющий функционал. Отсюда следует, что спектр оператора $\hat{h}_{k,\nu}$ является простым (невыврожденным в физической терминологии). В таком случае основным инструментом спектрального анализа является спектральная функция $\sigma_{k,\nu}(E)$ и ее (обобщенная) производная $\sigma'_{k,\nu}(E)$, где $E, E \in \mathbb{R}$, — вещественная переменная.

Формула (9) позволяет нам восстановить все с.с. операторы \hat{H}_s , ассоциированные с дифференциальным выражением (3) для любого значения параметра g , а также описать решение соответствующих спектральных задач для всех гамильтонианов \hat{H}_s .

Введем согласно работе [10] множества значений заряда, для которых спектральная задача описывается похожим образом. Эти множества определяются при помощи функций $g_c(k)$ и $g_s(k)$, принимающих значения в характеристических точках $k = l + 1/2$, $l \in \mathbb{Z}_+$,

$$g_c(k) = k, \quad g_s(k+1) = \sqrt{(k+1)^2 - \frac{1}{4}}$$

и удовлетворяющих следующим неравенствам:

$$g_c(k) < g_s(k+1) < g_c(k+1) < g_s(k+2). \quad (29)$$

Введем интервалы $\Delta(k)$:

$$\begin{aligned} \Delta(0) &= (0; 1/2), \\ \Delta(k) &= (g_c(k), g_c(k+1)] = (k, k+1], \\ (0, \infty) &= \Delta(0) \cup \left\{ g_c\left(\pm\frac{1}{2}\right) \right\} \cup \left(\bigcup_k \Delta(k) \right). \end{aligned}$$

Как следует из (29), каждый интервал $\Delta(k)$ представим в виде $\Delta(k) = \cup_{i=1,2,3} \Delta_i(k)$, где

$$\Delta_1(k) = (g_c(k), g_s(k+1)],$$

$$\begin{aligned} \Delta_2(k) &= (g_s(k+1), g_c(k+1)), \\ \Delta_3(k) &= \{g_c(k+1)\}. \end{aligned}$$

В соответствии с этим разложением, определим три множества $G_i = \bigcup_k \Delta_i(k)$, $i = 1, 2, 3$, изменения параметров связи g , таких что любому значению $g > g_c(\pm 1/2) = 1/2$ можно сопоставить пару двух целых чисел, k и $i = 1, 2, 3$: $g \implies (k, i)$, такую что $g \in G_i$. Тогда, как следует из результатов разд. 5.1, 5.2, получим следующую классификацию:

$$\begin{aligned} U_E(\rho) &= \begin{cases} U_{4,\nu,E}(\rho), & |j| \leq k, \\ U_{1E}(\rho), & |j| \geq k+1, \end{cases} & g \in \Delta_1(k), \\ U_E(\rho) &= \begin{cases} U_{4,\nu,E}(\rho), & |j| \leq k, \\ U_{2,\nu,E}(\rho), & |j| = k+1, \\ U_{1E}(\rho), & |j| > k+1, \end{cases} & g \in \Delta_2(k), \\ U_E(\rho) &= \begin{cases} U_{4,\nu,E}(\rho), & |j| \leq k, \\ U_{3,\nu,E}(\rho), & |j| = k+1, \\ U_{1E}(\rho), & |j| > k+1, \end{cases} & g \in \Delta_3(k), \\ U_E(\rho) &= \begin{cases} U_{2,\nu,E}(\rho), & |j| = 1/2, \\ U_{1E}(\rho), & |j| > 1/2, \end{cases} & g \in \Delta(0), \\ U_E(\rho) &= \begin{cases} U_{3,\nu,E}(\rho), & |j| = 1/2, \\ U_{1E}(\rho), & |j| > 1/2, \end{cases} & g = g_c(\pm 1/2). \end{aligned} \tag{30}$$

Теперь мы можем описать спектральную проблему для всех с.с. дираковских гамильтонианов для всех значений g . Отметим, что из неравенства $g > g_s(\pm 1/2) = 0$ и (9) следует важный факт: полный с.с. дираковский гамильтониан \hat{H}_s не определен однозначно для каждого заряда $Z = (\epsilon g)/\alpha_F$.

Рассмотрим собственные векторы $\Psi_{sj}(\mathbf{r})$ для с.с. дираковского гамильтониана \hat{H}_s , которые удовлетворяют следующей системе уравнений (см. разд. 3):

$$\hat{H}_s \Psi_{sj}(\mathbf{r}) = E \Psi_{sj}(\mathbf{r}), \quad \hat{J}_s \Psi_{sj}(\mathbf{r}) = j \Psi_{sj}(\mathbf{r}),$$

и имеют вид $\Psi_{sj}(\mathbf{r}) = V_{sj} U_E(\rho)$, см. (6).

Для любых констант связи g энергетический спектр любого с.с. дираковского гамильтониана \hat{H}_s состоит из непрерывного спектра, занимающего ось $(-\infty, \infty)$. Все дублеты $U_E(\rho)$ зависят от параметров расширения, от квантовых чисел j , параметра s и константы связи g согласно (30). Отметим, что параметры расширения зависят как от квантовых чисел j , так и от параметра s .

7. ЛОКАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ

Локальная плотность состояний на единицу поверхности в графене определяется выражением

$$\begin{aligned} N(\rho; E) &= \sum_{E'} |\Psi(\rho; E')|^2 \delta(E - E') = \\ &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} n_j(\rho; E), \\ n_j(\rho; E) &= |\Psi_{sj}(\rho; E)|^2, \end{aligned} \tag{31}$$

см. [8]. Величина $N(\rho; E)dE$ имеет смысл вероятности нахождения квазичастицы на элементарной поверхности графена в данной точке (ϕ, ρ) в диапазоне энергий от E до $E + dE$. Отметим, что существует другое определение локальной плотности состояний в графене, основанное на вычислении мнимой части функции Грина [18]. Подставляя (5) в (31), получим

$$n_j(\rho; E) = \frac{1}{2\pi r} |U_E(\rho)|^2,$$

где дублеты $U_E(\rho)$ для различных значений заряда g и углового момента j определяются выражением

(30). Из равенства $\check{h}(Z, j, s) = \check{h}(Z, -j, -s)$ следует $n_j(\rho; E)|_{s=+1} = n_{-j}(\rho; E)|_{s=-1}$. Отсюда очевидно, что сумма $n_j(\rho; E) + n_{-j}(\rho; E)$ не зависит от выбора параметра $s = \pm 1$. Таким образом, имеет место сохранение симметрии между выбором двух подрешеток в графене в поведении локальной плотности состояний (31).

Рассмотрим сначала случай малых значений параметра связи $g \in \Delta(0)$. В этом случае локальная плотность состояний определяется только некритической и субкритической областями изменения заряда:

$$N(\rho; E) = N_0(\rho, \nu_1; E) = \sum_{|j|>1/2} n_j^1(\rho; E) + n_{j=-1/2}^{2,\nu_1}(\rho; E) + n_{j=1/2}^{2,\nu_1}(\rho; E), \quad (32)$$

где парциальная локальная плотность состояний $n_j^1(\rho; E)$ отвечает некритической области,

$$n_j^1(\rho; E) = \frac{1}{2\pi\rho} |U_{1E}(\rho)|^2 = |F_1(\rho; E)|^2 \sigma_1'(E) = \frac{(2\rho|E|)^{2\gamma} |\Phi_\gamma(\rho)|^2 e^{\pi g \delta}}{\rho \Gamma^2(1+2\gamma) |\Gamma(ig-\gamma)|^2 [\text{ch}(2\pi g) - \cos(2\pi\gamma)]}, \quad (33)$$

$$\Phi_\gamma(\rho) = \Phi(\gamma - ig, 1 + 2\gamma, -2iE\rho),$$

а $n_j^{2,\nu_1}(\rho; E)$ соответствует парциальному гамильтониану $\hat{h}_{2,\nu_1}(Z, j, s)$ субкритической области, который параметризуется параметром с.с. расширения ν_1 ,

$$n_j^{2,\nu_1}(\rho; E) = \frac{1}{2\pi\rho} |U_{2\nu_1,E}(\rho)|^2 \frac{1}{2\pi^2\rho} \frac{\varrho_\gamma(\rho) \cos^2 \nu_1 + \varrho_{-\gamma}(\rho) \sin^2 \nu_1 + \text{Re}(\varrho(\rho)) \sin(2\nu_1)/g}{\varrho_\gamma(\infty) \cos^2 \nu_1 + \varrho_{-\gamma}(\infty) \sin^2 \nu_1 + \text{Re}(\varrho(\infty)) \sin(2\nu_1)/g},$$

$$\varrho_\gamma(\rho) = \frac{|\Phi_\gamma(\rho)|^2}{j+s\gamma} \rho^{2\gamma}, \quad \varrho(\rho) = \frac{g-i\gamma}{j} \Phi_\gamma(\rho) \Phi_{-\gamma}^*(\rho), \quad (34)$$

$$\varrho_\gamma(\infty) = \lim_{\rho \rightarrow \infty} \varrho_\gamma(\rho) = \frac{\Gamma^2(1+2\gamma) e^{-\delta\pi g} |2E|^{-2\gamma}}{(j+s\gamma)\Gamma(1-ig+\gamma)\Gamma(1+ig+\gamma)},$$

$$\varrho(\infty) = \lim_{\rho \rightarrow \infty} \varrho(\rho) = \frac{2\gamma \text{sh}(\pi[g-i\gamma])}{j \sin(2\pi\gamma)} e^{-\delta\pi(g+i\gamma)}.$$

В пределе $g \rightarrow 0$ величина $n_j^1(\rho; E)$ выражается через функции Бесселя:

$$\lim_{g \rightarrow 0} n_j^1(\rho; E) = [J_{|j|-1/2}(E\rho) + J_{|j|+1/2}(E\rho)] \frac{|E|}{4\pi},$$

а суммирование по j , без учета вклада $n_j^{2,\nu_1}(\rho; E)$ от субкритической области, приводит к выражению для свободной плотности состояний квазичастиц в графене:

$$\lim_{g \rightarrow 0} \sum_{j=-\infty}^{\infty} n_j^1(\rho; E) = \frac{|E|}{2\pi}. \quad (35)$$

На рис. 1 показаны зависимости плотности состояний $N_0(\rho, \nu_1; E)$ от энергии квазичастицы для $\rho = 1$, $g = 0.3$. Для малых энергий, $E \rightarrow 0$, имеем

$$n_j^1(\rho; E) \sim \frac{(2\rho|E|)^{2\gamma} e^{\pi g \delta}}{\rho} \Gamma^{-2}(1+2\gamma) |\Gamma(ig-\gamma)|^{-2} = [\text{ch}(2\pi g) - \cos(2\pi\gamma)]^{-1}.$$

Заметим, что если параметр с.с. расширения ν_1 равен нулю, то вклад от субкритической области совпадает с вкладом от некритической области,

$$n_j^{2,\nu_1}(\rho; E) \Big|_{\nu_1=0} = n_j^1(\rho; E)$$

и плотность состояний определяется только некритической областью,

$$N_0(\rho, 0; E) = \sum_j n_j^1(\rho; E).$$

Если параметр ν_1 не равен нулю, то даже для малых зарядов примеси вклад слагаемых

$$N_{subcr}(\rho, \nu_1, E) = n_{j=-1/2}^{2,\nu_1}(\rho; E) + n_{j=1/2}^{2,\nu_1}(\rho; E)$$

в локальную плотность состояний $N_0(\rho, \nu_1; E)$ приводит к появлению локальных максимумов (см. рис. 1, 2). На рис. 2 изображены зависимости величины $N_{subcr}(\rho, \nu_1, E)$ от энергии для различных значений параметра ν_1 для $\rho = 1$, $g = 0.3$. Мы видим, что функция $N_{subcr}(\rho, \nu_1, E)$ имеет выраженный локальный максимум при различных значениях параметра ν_1 , отличных от нуля.

В окрестности точки $E = 0$ величина имеет асимптотику $N_{subcr}(\rho, \nu_1, E)$,

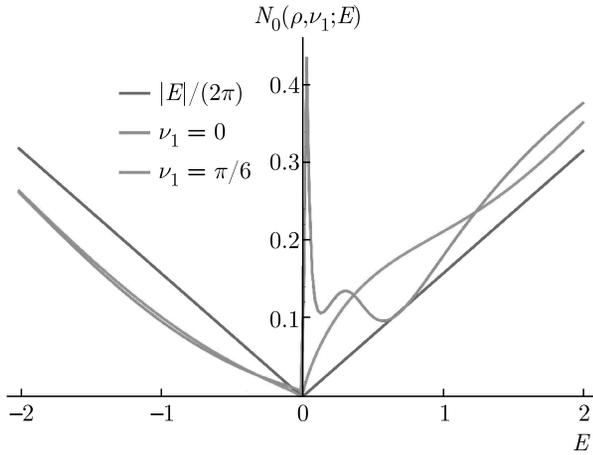


Рис. 1. (В цвете онлайн) Зависимости локальной плотности состояний $N_0(\rho, \nu_1; E)$ для $\rho = 1, g = 0.3$ и $\nu_1 = 0, \pi/6$. Синяя линия описывает локальную плотность состояний в отсутствие поля

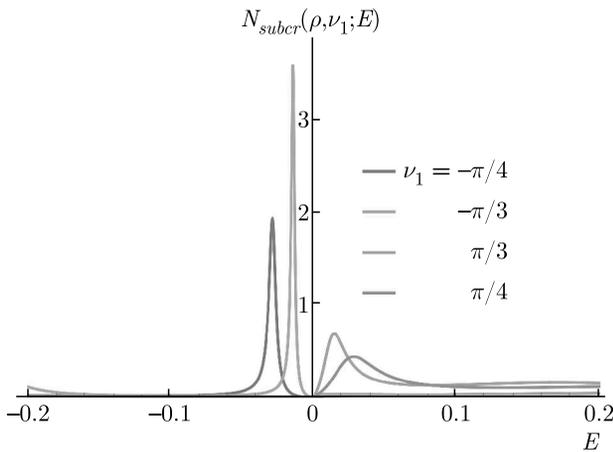


Рис. 2. (В цвете онлайн) Зависимости вклада $N_{subcr}(\rho, \nu_1; E)$ от энергии E для $\rho = 1, g = 0.3$ и различных значений параметра с. с. расширения ν_1

$$N_{subcr}(\rho, \nu_1, E) \sim \frac{1}{C(g)\rho} \times \left[4 \operatorname{tg} \nu + 2\rho^{2\gamma} + \frac{(1-2g^2) \operatorname{tg}^2 \nu}{g^2} \rho^{-2\gamma} \right] |2E|^{2\gamma} e^{\delta\pi g} + O(|2E|^{2\gamma+1}), \quad \gamma = \sqrt{1/4 - g^2} < 1/2,$$

$$C(g) = [\operatorname{ch}(2\pi g) - \cos(2\pi\gamma)] \Gamma(1 + 2\gamma)^2 [\Gamma(ig - \gamma)]^2.$$

Отсюда следует, что даже при $g \rightarrow 0$ и $E \rightarrow 0$ при $\nu_1 \neq 0$ вклад субкритической области отличается от выражения (35) для локальной плотности состояний свободной частицы наличием расходимости по g :

$$N_{subcr}(\rho, \nu_1, E) \sim \frac{|E|}{2\pi} \left[1 + \frac{2 \operatorname{tg} \nu}{\rho} + \frac{1}{2} \left(\frac{\operatorname{tg} \nu}{g\rho} \right)^2 \right],$$

$$E \rightarrow 0, \quad g \rightarrow 0.$$

Тем не менее для любых значений параметра ν_1 величина $N_{subcr}(\rho, \nu_1, E)$ при $E \rightarrow 0$ с точностью до множителя ведет себя как $|E|^{2\gamma}$, что согласуется с результатом работы [8]. Используя представление (14), выражение для $n_j^1(\rho; E)$ можно представить через кулоновские функции (что также согласуется с результатами работы [8]):

$$n_j^1(\rho; E) = \frac{1}{2\pi^2 \rho} \frac{j^2}{\gamma^2} \left(\mathcal{F}_{\gamma-1}^2 + \mathcal{F}_\gamma^2 + \frac{2\tilde{g}}{|j|} \mathcal{F}_{\gamma-1} \mathcal{F}_\gamma \right), \quad \mathcal{F}_\alpha = \mathcal{F}_\alpha(-\tilde{g}; |E|\rho).$$

Для параметров связи $g = g_c(\pm 1/2)$ имеем вклад в локальную плотность состояний от критической области:

$$N(\rho; E) = N_1(\rho, \nu_2; E) = \sum_{|j| > 1/2} n_j^1(\rho; E) + n_{j=-1/2}^{3, \nu_2}(\rho; E) + n_{j=1/2}^{3, \nu_2}(\rho; E), \quad (36)$$

где $n_j^{3, \nu_2}(\rho; E)$ соответствует парциальному гамильтониану $\hat{h}_{3, \nu_2}(Z, j, s)$ в критической области, который параметризуется параметром с.с. расширения ν_2 ,

$$n_j^{3, \nu_2}(\rho; E) = \frac{1}{2\pi\rho} |U_{3, \nu_2, E}(\rho)|^2 = \frac{1}{2\pi^2\rho} \times \frac{\varrho_1^{(0)}(\rho) \sin^2 \nu_2 + \varrho_2^{(0)}(\rho) \cos^2 \nu_2 + \operatorname{Re} \varrho_3^{(0)}(\rho) \sin(2\nu_2)}{\varrho_1^{(0)}(\infty) \sin^2 \nu_2 + \varrho_2^{(0)}(\infty) \cos^2 \nu_2 + \operatorname{Re} \varrho_3^{(0)}(\infty) \sin(2\nu_2)},$$

$$\varrho_1^{(0)}(\rho) = |F_1^{(0)}(\rho)|^2, \quad \varrho_1^{(0)}(\infty) = -[g_c(j) \operatorname{Im} f(W)]^{-1},$$

$$\varrho_2^{(0)}(\rho) = |F_2^{(0)}(\rho)|^2, \quad \varrho_2^{(0)}(\infty) = -g_c^{-1}(j) \frac{|f(W)|^2}{\operatorname{Im} f(W)},$$

$$\varrho_3^{(0)}(\rho) = F_1^{(0)}(\rho) F_2^{(0)*}(\rho),$$

$$\operatorname{Re} \varrho_3^{(0)}(\infty) = g_c^{-1}(j) \frac{\operatorname{Re} f(W)}{\operatorname{Im} f(W)}.$$

Вклад критической области при $E \rightarrow 0$ расходится как квадрат логарифма:

$$n_{j=-1/2}^{3, \nu_2}(\rho; E) + n_{j=1/2}^{3, \nu_2}(\rho; E) \sim \frac{2 + (\ln \rho + \operatorname{tg} \nu)^2}{\pi^2 \rho} |\operatorname{Im} f(W)| \ln^{-2}(2|E|).$$

На рис. 3 показаны зависимости плотности состояний $N_1(\rho, \nu_2; E)$ от энергии квазичастицы для $\rho = 1, g = 0.5$.

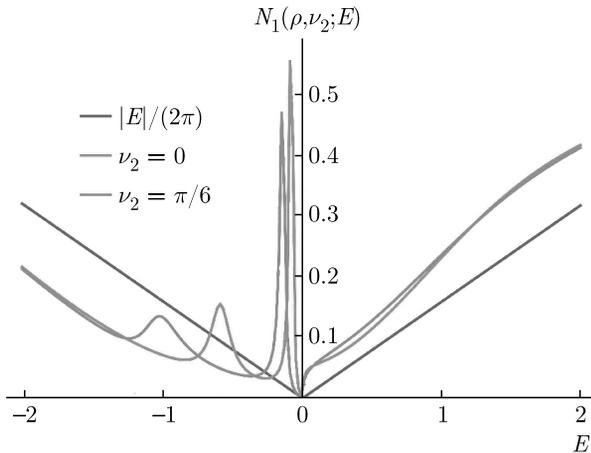


Рис. 3. (В цвете онлайн) Зависимости локальной плотности состояний $N_1(\rho, \nu_2; E)$ для $\rho = 1, g = 0.5$ и $\nu_2 = 0, \pi/6$. Синяя линия описывает локальную плотность состояний в отсутствие поля

Для полупелых значений параметра $g \in \Delta_3(k), g = g_c(k), k = 3/2, 5/2, \dots$, вклад в локальную плотность состояний дает субкритическая и сверхкритическая области, в связи с чем эта плотность параметризуется двумя параметрами с.с. расширения ν_2 и ν_3 :

$$N(\rho; E) = N_2(\rho, \nu_2, \nu_3; E) = \sum_{|j| > k+1}^{\infty} n_j^1(\rho, \nu_2, \nu_3; E) + n_{-(k+1)}^{3, \nu_2}(\rho; E) + n_{k+1}^{3, \nu_2}(\rho; E) + \sum_{|j| \leq k} n_j^{4, \nu_3}(\rho; E), \quad (37)$$

где $n_j^{4, \nu_3}(\rho; E)$ соответствует парциальному гамильтониану $\hat{h}_{4, \nu_3}(Z, j, s)$ в сверхкритической области, который параметризуется параметром с.с. расширения ν_3 ,

$$n_j^{4, \nu_3}(\rho; E) = \frac{1}{2\pi\rho} |U_{4, \nu_3, E}(\rho)|^2 \sigma'_{4, \nu_3}(E) = \frac{1}{2\pi^2\rho} \times \frac{\varrho_1(\rho) - \text{Re} \{ \varrho_2(\rho) \exp(2i[\nu_3 + \sigma \ln(\rho)]) \}}{\varrho_1(\infty) - \text{Re} \{ \varrho_2(\infty) \exp(2i[\nu_3 + \sigma \ln(\rho)]) \}}. \quad (38)$$

Здесь

$$\varrho_1(\rho) = \frac{g}{2j} \left[\left(1 - \frac{\sigma}{g} \right) |\Phi_{-i\sigma}(\rho)|^2 + \left(1 + \frac{\sigma}{g} \right) |\Phi_{i\sigma}(\rho)|^2 \right],$$

$$\varrho_2(\rho) = \frac{j - i\sigma}{g} \Phi_{i\sigma}(\rho) \Phi_{-i\sigma}^*(\rho)$$

и

$$\varrho_1(\infty) = \lim_{\rho \rightarrow \infty} \varrho_1(\rho) = -\frac{\delta\sigma}{j} \frac{e^{-\pi\sigma} \text{sh}(\pi[g - \delta\sigma]) + e^{\pi\sigma} \text{sh}(\pi[g + \delta\sigma])}{e^{-\pi\sigma} \text{sh}(\pi[g - \delta\sigma]) - e^{\pi\sigma} \text{sh}(\pi[g + \delta\sigma])},$$

$$\varrho_2(\infty) = \lim_{\rho \rightarrow \infty} \varrho_2(\rho) = \frac{j - i\sigma}{g} \frac{\Gamma^2(1 + 2i\sigma) e^{-\delta\pi g}}{\Gamma(1 - i(g - \sigma)) \Gamma(1 + i(g + \sigma))}.$$

В терминах кулоновских волновых функций имеем

$$n_j^{4, \nu_3}(\rho; E) = \frac{1}{2\pi^2\rho} \times \frac{\tilde{\varrho}_1(\rho) - s \text{sgn}(jE) \text{Re} \{ \tilde{\varrho}_2(\rho) \exp(2i[\nu_3 + \sigma \ln(\rho)]) \}}{\tilde{\varrho}_1(\infty) - s \text{sgn}(jE) \text{Re} \{ \tilde{\varrho}_2(\infty) \exp(2i[\nu_3 + \sigma \ln(\rho)]) \}},$$

$$\tilde{\varrho}_1(\rho) = |\mathcal{F}_{i\sigma}|^2 + |\mathcal{F}_{i\sigma-1}|^2 + \frac{2|j|}{\tilde{g}} \text{Re}[\mathcal{F}_{i\sigma-1}^* \mathcal{F}_{i\sigma}],$$

$$\tilde{\varrho}_2(\rho) = \left(2\mathcal{F}_{i\sigma-1} \mathcal{F}_{i\sigma} + \frac{|j|}{\tilde{g}} [\mathcal{F}_{i\sigma}^2 + \mathcal{F}_{i\sigma-1}^2] \right) \times \frac{sj - i\sigma}{g} \frac{\Gamma(2i\sigma)}{\Gamma(-2i\sigma)} \exp[-2i\sigma \ln(2\rho|E|)],$$

$$\mathcal{F}_{i\sigma} = \left(\frac{\tilde{g} + \sigma}{\tilde{g} - \sigma} \right)^{1/4} \mathcal{F}_{i\sigma}(-\tilde{g}; |E| \rho),$$

$$\mathcal{F}_{i\sigma-1} = \left(\frac{\tilde{g} - \sigma}{\tilde{g} + \sigma} \right)^{1/4} \mathcal{F}_{i\sigma-1}(-\tilde{g}; |E| \rho).$$

Из (38) следует, что изменение параметра с.с. расширения приводит к сдвигу фазы $\delta_j(\rho)$. На рис. 4 показаны зависимости плотности состояний $N_2(\rho, \nu_2, \nu_3; E)$ от энергии квазичастицы для $\rho = 1, g = 3.5$.

Пусть существует полупелое число $k > 1/2$, такое что $g \in \Delta_1(k) = (g_c(k), g_s(k + 1)]$. Тогда в локальную плотность состояний вносит вклад только сверхкритическая область:

$$N(\rho; E) = N_3(\rho, \nu_3; E) = \sum_{|j| \geq k+1} n_j^1(\rho; E) + \sum_{|j| < k} n_j^{4, \nu_3}(\rho; E). \quad (39)$$

На рис. 5 показаны зависимости плотности состояний $N_3(\rho, \nu_3; E)$ от энергии квазичастицы для $\rho = 3, g = 3.7$.

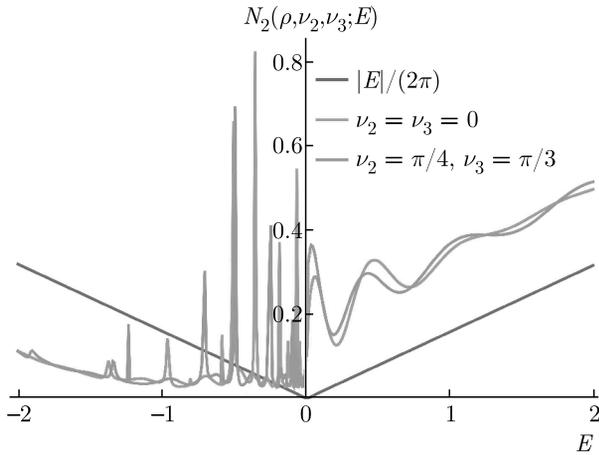


Рис. 4. (В цвете онлайн) Зависимости локальной плотности состояний $N_2(\rho, \nu_2, \nu_3; E)$ для $\rho = 1, g = 3.5$ для $\nu_2 = \nu_3 = 0$ и $\nu_2 = \pi/6, \nu_3 = \pi/3$. Синяя линия описывает локальную плотность состояний в отсутствие поля

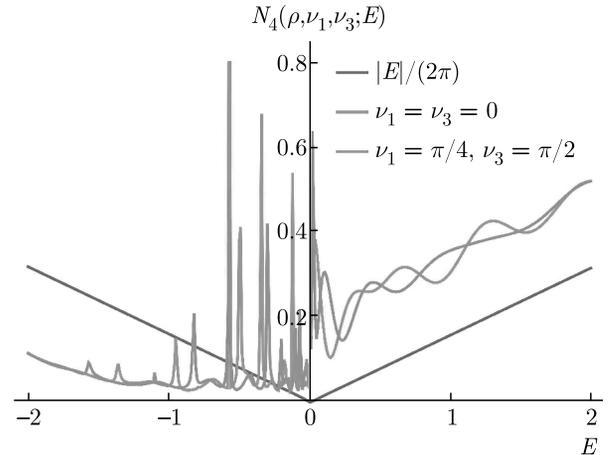


Рис. 6. (В цвете онлайн) Зависимости локальной плотности состояний $N_4(\rho, \nu_1, \nu_3; E)$ для $\rho = 3, g = 3.48$ для случаев $\nu_1 = \nu_3 = 0$ и $\nu_1 = \pi/4, \nu_3 = \pi/2$. Синяя линия описывает локальную плотность состояний в отсутствие поля

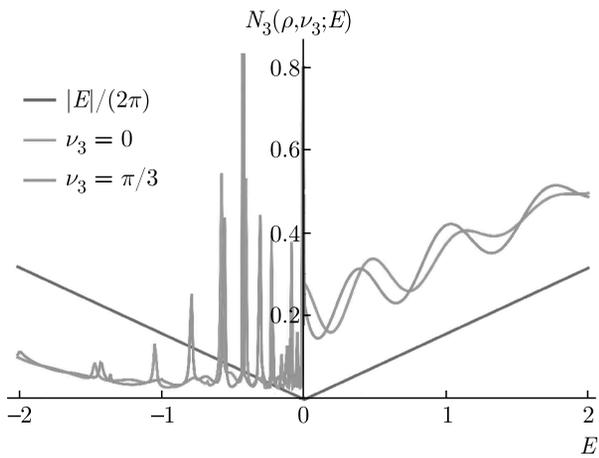


Рис. 5. (В цвете онлайн) Зависимости локальной плотности состояний $N_3(\rho, \nu_3; E)$ для $\rho = 3, g = 3.7$ и $\nu_3 = 0, \pi/3$. Синяя линия описывает локальную плотность состояний в отсутствие поля

Если же существует полуцелое число $k > 1/2$, такое что $g \in \Delta_2(k) = (g_s(k+1), g_c(k+1))$, то локальная плотность состояний параметризуется двумя параметрами с.с. расширения ν_1 и ν_3 :

$$\begin{aligned}
 N(\rho; E) &= N_4(\rho, \nu_1, \nu_3; E) = \\
 &= \sum_{|j| > k+1} n_j^1(\rho; E) + n_{-(k+1)}^{2, \nu_1}(\rho; E) + \\
 &\quad + n_{k+1}^{2, \nu_1}(\rho; E) + \sum_{|j| < k} n_j^{4, \nu_3}(\rho; E). \quad (40)
 \end{aligned}$$

На рис. 6 показаны зависимости плотности состояний $N_4(\rho, \nu_1, \nu_3; E)$ от энергии квазичастицы для $\rho = 3$ и $g = 3.48$.

Отметим, что для всех значений заряда примеси Z имеется нарушение электронно-дырочной симметрии: для положительных и отрицательных значений энергии локальная плотность состояний ведет себя различным образом. Притягивающий кулоновский потенциал примеси приводит к уменьшению локальной плотности состояний для отрицательных значений энергии (дырочной) $E < 0$ относительно состояний с положительной энергией $E > 0$. Данный эффект наиболее сильно проявляется вблизи примеси.

Отметим, что, ввиду экспоненциального множителя $\exp(\delta\pi g)$ в выражении (33), вклад несингулярной области экспоненциально подавлен при отрицательных значениях энергии и основной вклад в локальную плотность состояний $N_3(\rho, \nu_3; E)$ и $N_4(\rho, \nu_1, \nu_3; E)$ вносит конечное число слагаемых $\sum_{|j| < k} n_j^{4, \nu_3}(\rho; E)$, отвечающих сверхкритической области. На рис. 7 представлены зависимости вкладов каждой области отдельно для плотности состояний $N_4(\rho, \nu_1, \nu_3; E)$ от энергии квазичастицы для $\rho = 3$ и $g = 3.48$. Из рис. 7 видно, что вклад несингулярной и субкритической областей сильно подавлен в отрицательной области энергий.

Вклад сверхкритической области в (37), (39) и (40) приводит к перестройке плотности состояний вблизи примеси гораздо сильнее, чем вклад субкритической области (34) для малых зарядов $g \in \Delta(0)$. На рис. 3–5 вклад сверхкритической области приводит к наличию резонансов в области отрицательных энергий, которые затухают при удалении от примеси. С увеличением заряда примеси Z количество

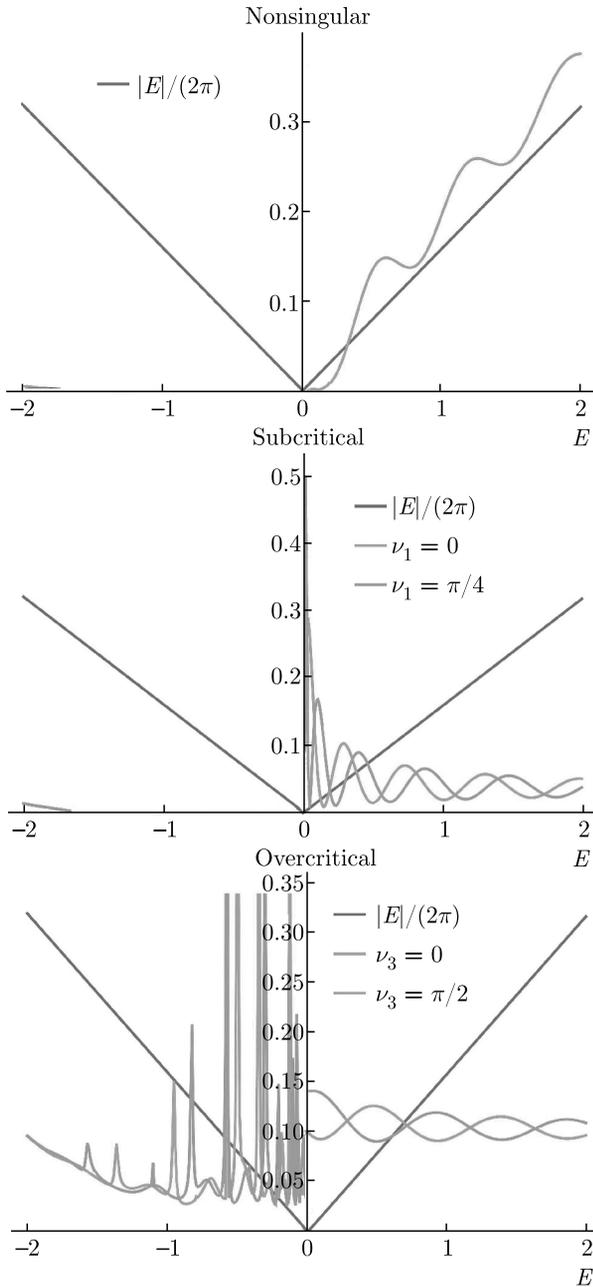


Рис. 7. (В цвете онлайн) Вклады несингулярной (Nonsingular), субкритической (Subcritical) и сверхкритических (Overcritical) областей в $N_4(\rho, \nu_1, \nu_3; E)$

резонансов растет и они сдвигаются вниз по энергии. Точку Дирака можно рассматривать как точку накопления бесконечного множества резонансов [8, 19]. Это объясняется тем, что функции $n_j^{4, \nu_3}(\rho; E)$ в сверхкритической области осциллируют с логарифмически расходящейся частотой $2[\sigma \ln |2E| - \nu_3]$ при $E \rightarrow 0$ для всех значений параметра с.с. расширения ν_3 .

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Отметим, что предыдущая работа с участием авторов [10] была посвящена исследованию спектров массивных квазичастиц в графене в окрестности кулоновской примеси. Настоящая работа является ее естественным продолжением. Здесь исследован случай, когда эффективная масса квазичастиц в графене равна нулю, и показано, что в этом случае структура спектров электронных возбуждений качественно другая. В частности, построено семейство всех возможных с.с. гамильтонианов, отвечающих безмассовым носителям заряда в графене с кулоновскими примесями, которые параметризуются параметрами расширения, и проведен их спектральный анализ. Показано, что спектр с.с. парциальных гамильтонианов является непрерывным, $\text{sp} \hat{h}(Z, j, s) = (-\infty, \infty)$, в отличие от массивного случая, где имеются дискретный и непрерывный спектры.

Вычислены обобщенные собственные функции, отвечающие с.с. парциальным гамильтонианам для любого заряда примеси (см. (30)). А именно, для несингулярной области ($g \leq g_s(j)$) нормированные (обобщенные) собственные функции даются формулой (21), для субкритической области ($g_s(j) < g < g_c(j)$) — формулой (24), для критической области ($g = g_c(j)$) — формулой (26), а для сверхкритической области ($g > g_c(j)$) — формулой (28). Полученные собственные функции оказались существенными для анализа локальной плотности состояний (см. (32), (36), (37) и (40)), которая зависит от параметров с.с. расширения.

Следует отметить, что в работе [20] также рассматривались с.с. дираковские гамильтонианы, отвечающие безмассовым носителям заряда в графене с кулоновскими центрами в сочетании с полем Ааронова–Бома (в $2 + 1$ измерении) за исключением критической области, когда $Z = Z_c(j)$. Однако не были приняты во внимание существенные особенности данной задачи в недопированном графене. Из-за этого радиальные гамильтонианы, которые рассматривались в [20], параметризованы особым образом, что не позволяет отождествить их с соответствующими гамильтонианами реальной задачи в графене.

Финансирование. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-12-00042).

ЛИТЕРАТУРА

1. K. Nomura and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 076602 (2007).
2. V. N. Kotov, B. Uchoa, V. M. Pereira et al., *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1067 (2012).
3. V. M. Pereira, V. N. Kotov, and A. C. Neto, *Phys. Rev. B* **78**, 085101 (2008).
4. E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, and O. O. Sobol, *Low Temp. Phys.* **44**, 371 (2018).
5. O. V. Gamayun, E. V. Gorbar, and V. P. Gusynin, *Phys. Rev. B* **80**, 165429 (2009).
6. A. H. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
7. M. I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions*, Cambridge Univ. Press, New York (2012).
8. V. M. Pereira, V. M. Nilsson, and A. C. Neto, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 166802 (2007).
9. D. Haberer, D. V. Vyalikh, S. Taioli et al., *Nano Lett.* **10**, 3360 (2010).
10. А. И. Бреев, Р. Феррейра, Д. М. Гитман, Б. Л. Воронов, *ЖЭТФ* **157**, 847 (2020).
11. Б. Л. Воронов, Д. М. Гитман, И. В. Тютин, *ТМФ* **150**, 41 (2007).
12. D. M. Gitman, I. V. Tyutin, and B. L. Voronov, *Self-adjoint Extensions in Quantum Mechanics: General Theory and Applications to Schrödinger and Dirac Equations with Singular Potentials*, Birkhäuser, New York (2012).
13. D. M. Gitman, A. D. Levin, I. V. Tyutin et al., *Phys. Scripta* **87**, 038104 (2013).
14. *Graphene Nanoelectronics. Metrology, Synthesis Properties, and Applications*, ed. by H. Raza, Springer, New York (2012).
15. N. I. Akhiezer and I. M. Glazman, *Theory of Linear Operators in Hilbert Space*, Pitman, Boston (1981).
16. A. I. Akhiezer and V. B. Berestetskii, *Elements of Quantum Electrodynamics*, Israel Program for Sci. Tr., London (1962).
17. M. Abramovitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Nat. Bureau Stand. (1972).
18. A. Cortijo and M. A. H. Vozmediano, *Europhys. Lett.* **77**, 47002 (2007).
19. A. V. Shytov, M. I. Katsnelson, and L. S. Levitov, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 246802 (2007).
20. V. R. Khalilov and K. E. Lee, *Int. J. Mod. Phys. A* **27**, 1250169 (2012).

ГИДРОМАГНИТНЫЕ НЕУСТОЙЧИВОСТИ В НЕОДНОРОДНО ВРАЩАЮЩЕМСЯ СЛОЕ ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩЕЙ НАНОЖИДКОСТИ

М. И. Копп^{a*}, *А. В. Тур*^{c**}, *В. В. Яновский*^{a,b***}

^a *Институт монокристаллов Национальной академии наук Украины
61001, Харьков, Украина*

^b *Харьковский национальный университет им. В. Н. Каразина
61000, Харьков, Украина*

^c *Université de Toulouse [UPS], CNRS, Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie
BP 44346, 31028 Toulouse Cedex 4, France*

Поступила в редакцию 15 декабря 2020 г.,
после переработки 15 декабря 2020 г.
Принята к публикации 11 января 2021 г.

Исследуется устойчивость замагниченных потоков неоднородно вращающегося слоя электропроводящей наножидкости с учетом эффектов броуновской диффузии и термофореза. В отсутствие градиента температуры рассмотрены новые виды магнитовращательной неустойчивости в аксиальном, азимутальном и спиральном магнитных полях в тонких слоях наножидкости. Получены инкременты и области развития этих неустойчивостей в зависимости от профиля угловой скорости вращения (числа Россби Ro) и радиального волнового числа k . При наличии градиентов температуры и концентрации наночастиц исследуются стационарные режимы неоднородно вращающейся конвекции в аксиальном и спиральном магнитных полях. Получены выражения для критических чисел Рэлея Ra_{st} и построены кривые нейтральной устойчивости в зависимости от профиля угловой скорости вращения, профиля внешнего азимутального магнитного поля (магнитного числа Россби Rb) и радиального волнового числа k . Определены условия стабилизации и дестабилизации стационарной конвекции в аксиальном и спиральном магнитных полях.

DOI: 10.31857/S0044451021060080

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время, в связи с ростом производительности электронных устройств и развитием высокоэнергетичных технологий, возникает необходимость создания эффективных охлаждающих систем. Перспективным направлением интенсификации теплообмена является повышение теплопроводности жидкости (газа) путем добавления наночастиц с высокой теплопроводностью. Такая смесь жидкости (газа) с частицами твердой фазы получила название наножидкости [1]. В качестве наночастиц используются керамические частицы (оксиды алюминия, меди, кремния), металлические частицы (алюминий, железо, медь) и углеродные нанотрубки,

ки, в качестве базовых жидкостей — вода, этиленгликоль, машинное масло. Добавление наночастиц приводит к повышению теплопроводности базовой жидкости на десятки процентов, а в случае углеродных нанотрубок — в несколько раз. Исследования, проведенные в [2] (см. цитируемую там литературу), показали, что коэффициенты переноса наножидкостей зависят не только от концентрации наночастиц, но и от их размера и материала. В работе [3] было показано, что на перенос тепла может оказывать влияние пространственная неоднородность концентрации наночастиц, которая возникает под действием броуновской диффузии и термофореза (возникновения потока частиц под действием градиента температуры). В связи с этим исследование влияния диффузии и термофореза наночастиц на вынужденную конвекцию наножидкостей в теплообменных устройствах является актуальной задачей.

* E-mail: michaelkopp0165@gmail.com

** E-mail: Anatoly.Tour@irap.omp.eu

*** E-mail: yanovsky@isc.kharkov.ua

Наряду с вязкостью и теплопроводностью наножидкостей для различных приложений большую роль играет свойство электропроводности наножидкостей. В недавней работе [4] проведены экспериментальные исследования электропроводности наножидкостей на основе воды и этиленгликоля с частицами меди и алюминия. Там же было показано, что электропроводность наножидкостей практически линейно растет с увеличением концентрации наночастиц и, в отличие от теплопроводности, растет с уменьшением размера частиц. С учетом этого был сделан вывод [4], что механизмы электропроводности и теплопроводности наножидкостей существенно различаются.

Кроме того, возрастает интерес к исследованиям механизма теплопередачи электропроводящих наножидкостей под воздействием магнитного поля с эффектами броуновской диффузии и термофореза [5, 6]. Конвективная неустойчивость в наножидкостном слое с вертикальным магнитным полем для свободных, жестких-жестких и жестких-свободных границ изучалась в работе [7]. Там же показано, что устойчивость наножидкости возрастает с увеличением значения магнитного поля, в то время как увеличение концентрации наночастиц приводит к ускорению начала конвекции. Условия возникновения конвекции в чистых средах в поле силы тяжести при наличии однородного вращения и внешнего магнитного поля изучены достаточно подробно [8–10]. Поэтому представляет интерес исследование конвективной неустойчивости во вращающемся слое наножидкости в присутствии магнитного поля. Впервые эта задача была рассмотрена в работе [11], где исследовано совместное влияние вращения и магнитного поля на возникновение конвекции в горизонтальном слое электропроводящей наножидкости с учетом эффекта броуновского движения наночастиц и термофореза. В работе [11] было установлено, что критическое число Рэлея Ra_c для наножидкости ниже по сравнению с Ra_c для обычной жидкости при одинаковых значениях числа Чандрасекара Q (характеризует меру влияния силы Лоренца) и числа Тейлора Ta (характеризует меру влияния силы Кориолиса). Как было показано [11], увеличение концентрации наночастиц оказывает дестабилизирующее влияние на начало конвекции, а вращение — стабилизирующее.

В работах [12–14] впервые рассматривалась конвективная неустойчивость неоднородно вращающегося слоя электропроводящей жидкости в постоянном вертикальном магнитном поле $\mathbf{H}_0 = \text{const}$, а

в работе [15] — в спиральном магнитном поле. Результаты работ [12–15] показали, что при отсутствии градиента температуры $Ra = 0$, т.е. когда нет подогрева, критерии конвективной неустойчивости переходят в известные критерии возникновения стандартной магнитовращательной неустойчивости (МВН) и спиральной МВН в диссипативной электропроводящей среде (плазме) [16, 17]. Еще одним фактором, влияющим на устойчивость неоднородно вращающейся электропроводящей жидкости, является градиент концентрации наночастиц в жидкости. Использование электропроводящих наножидкостей, возможно, решит проблемы, возникающие при использовании жидких металлов для лабораторного моделирования МВН. Кратко остановимся на основных проблемах лабораторного моделирования МВН.

В лабораторных экспериментах неоднородное (дифференциальное) вращение среды моделируется течением Куэтта, заключенным между двумя вращающимися с разной угловой скоростью цилиндрами. Угловая скорость вращения жидкости в такой конфигурации описывается соотношением

$$\Omega(R) = \frac{\Omega_2 R_2^2 - \Omega_1 R_1^2}{R_2^2 - R_1^2} + \frac{(\Omega_1 - \Omega_2) R_1^2 R_2^2}{R^2 (R_2^2 - R_1^2)} = a + \frac{b}{R^2},$$

где $R_{1,2}$ и $\Omega_{1,2}$ — соответственно радиус и угловая скорость вращения внутреннего и внешнего цилиндров. Устойчивость такого течения для идеально проводящей среды в магнитном поле была впервые рассмотрена в работах [19, 20]. Там же показано, что слабое осевое магнитное поле дестабилизирует азимутальное дифференциальное вращение плазмы и при выполнении условия $d\Omega^2/dR < 0$ в бездиссипативной плазме возникает МВН, или стандартная МВН. Поскольку это условие выполняется и для кеплеровских течений ($\Omega \propto R^{-3/2}$), МВН является наиболее вероятным источником турбулентности в аккреционных дисках. Открытие МВН послужило толчком к многочисленным теоретическим и лабораторным исследованиям по вращению жидких металлов (натрия, галлия) [21–27]. В этих работах показано, что из-за сильного стабилизирующего эффекта, обусловленного магнитной диффузией или малыми значениями магнитного числа Прандтля ($Pm \ll 1$) МВН возникает лишь при достаточно больших угловых скоростях жидкого металла, для которых число Рейнольдса $Re = \Omega_1 R_1 (R_2 - R_1) / \nu$ (ν — коэффициент кинематической вязкости) является величиной порядка 10^6 . При таких больших числах Рейнольдса ламинарность течения жидкос-

ти маловероятна, так как оно становится турбулентным из-за нелинейных неустойчивостей и из-за взаимодействия с цилиндрами.

Теоретический анализ, выполненный в работах [22–24, 26], показал, что среди гидродинамически устойчивых профилей вращения самый низкий порог устойчивости имеет место для профиля угловой скорости вращения $a = 0$, соответствующего границе гидродинамической устойчивости (линия Рэлея). При этом критическое число Рейнольдса оказывается по величине на два порядка меньше, т. е. $Re \sim 10^4$ для жидкого натрия. Однако из-за малости магнитного числа Прандтля Pm порог МВН возрастает на два порядка с $Re \approx 10^4$ до $Re \approx 10^6$ при малейшем отклонении профиля угловой скорости вращения от $\Omega \propto R^{-2}$ в область гидродинамической устойчивости: $\Omega \propto R^{-2} \rightarrow \Omega \propto R^{-2+\alpha}$, $\alpha > 0$ [27]. В силу недостижимости поддержания профиля вращения в эксперименте с такой точностью в работе [27] было сделано утверждение о невозможности наблюдения МВН в эксперименте с профилем угловой скорости, соответствующим линии Рэлея $\Omega = b/R^2$, но эта проблема была решена в работах [28, 29]. Там же было показано, что рост величины аксиального магнитного поля приводит к тому, что изменение порога МВН при отклонении профиля вращения от линии Рэлея перестает быть таким резким, как в случае слабого поля. Вместе с тем, сам порог неустойчивости на линии Рэлея увеличивается пропорционально величине магнитного поля.

В работах [30, 31] было предложено изучать неустойчивость азимутального вращения жидкого галлия в спиральном магнитном поле, т. е. наряду с аксиальным магнитным полем приложено дополнительное внешнее азимутальное магнитное поле. Численные расчеты, проведенные в этих работах, показали, что критическое число Рейнольдса Re_c в спиральном магнитном поле уменьшается по величине на два порядка. Анализ природы наблюдаемых в эксперименте мод был выполнен в работах [17, 32]. В последней было получено выражение для порога спиральной МВН.

Однако малость магнитного числа Прандтля ($Pm \ll 1$) для жидких металлов является также препятствием для дестабилизации кеплеровских потоков в экспериментах с азимутальными и спиральными полями. Поэтому эксперименты с жидкими металлами нуждаются в дальнейшем улучшении [33]. Аналог астрофизической МВН рассматривался в работе [34], где исследовалось течение Куэтта в вязко-упругой полимерной жидкости. Как утверж-

далось в работах [35, 36], лабораторные эксперименты с полимерными жидкостями позволяют лучше понять физический механизм магнитогиродинамических неустойчивостей.

На основании проведенных в настоящей работе теоретических исследований по реализации стандартной МВН, азимутальной МВН и спиральной МВН в неоднородно вращающемся слое электропроводящей наножидкости предлагается использование электропроводящих наножидкостей для лабораторного моделирования МВН. Содержание работы изложено в следующих разделах. В разд. 2 описана постановка задачи и получены уравнения эволюции малых возмущений в приближении Буссинеска во вращающемся слое несжимаемой электропроводящей наножидкости, находящейся в поле силы тяжести с постоянными градиентами температуры и концентрации наночастиц. Неоднородно вращающийся слой наножидкости находится во внешнем спиральном магнитном поле. В разд. 3 решается задача Рэлея – Бенара для слоя электропроводящей наножидкости, заключенной между двумя вращающимися цилиндрами и подогреваемой снизу. Получено общее дисперсионное уравнение для осесимметричных возмущений с учетом эффектов броуновской диффузии наночастиц и термофореза. В разд. 4–6 рассматриваются гидромагнитные неустойчивости при условии равенства температуры ($Ra = 0$) на границах слоя наножидкости. В разд. 4 проведен анализ дисперсионного уравнения для случая, когда отсутствует азимутальная компонента магнитного поля, $H_{0\varphi} = 0$. Получен критерий развития аналога стандартной МВН в тонком слое наножидкости. В разд. 5 проведен анализ дисперсионного уравнения для случая, когда отсутствует аксиальная компонента магнитного поля, $H_{0z} = 0$, и получен критерий развития аналога азимутальной МВН в тонком слое наножидкости. В разд. 6 проведен анализ дисперсионного уравнения при наличии внешнего спирального магнитного поля. Также получены критерии развития аналога спиральной МВН в тонком слое наножидкости. В разд. 7 исследуются стационарные режимы конвекции в однородном аксиальном и неоднородном спиральном магнитных полях. Там же получены критические значения чисел Рэлея для стационарной конвективной неустойчивости. Проведен анализ развития этих неустойчивостей для различных профилей угловой скорости вращения $\Omega(R)$ в зависимости от профиля внешнего азимутального магнитного поля $B_{0\varphi}(R)$. В заключении приводятся основные выводы, полученные в настоящей работе.

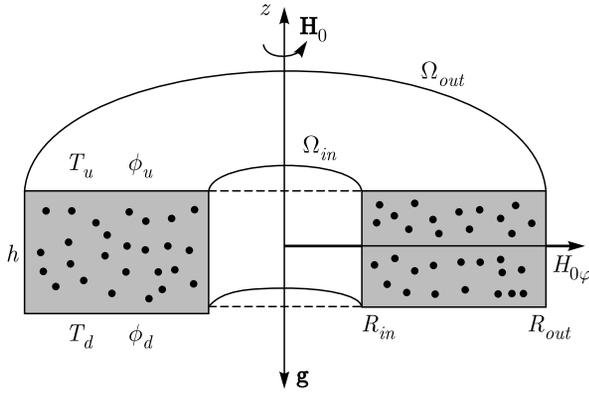


Рис. 1. Электропроводящая наножидкость заполняет слой между двумя вращающимися цилиндрами с угловыми скоростями Ω_{in} и Ω_{out} и находится в спиральном магнитном поле $\mathbf{H}_0 = H_{0\varphi}(R)\mathbf{e}_\varphi + H_{0z}\mathbf{e}_z$. Нижняя поверхность слоя имеет температуру T_d и объемную долю наночастиц ϕ_d , а верхняя — T_u и ϕ_u ; $T_d > T_u$, $\phi_d < \phi_u$

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И УРАВНЕНИЯ ЭВОЛЮЦИИ МАЛЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ

Рассмотрим слой несжимаемой вязкой электропроводящей наножидкости толщины h , которая заключена между двумя вращающимися цилиндрами с внутренним R_{in} и внешним R_{out} радиусами, причем $h \ll (R_{out} - R_{in})$. Наножидкость заключена между двумя параллельными плоскостями $z = 0$ и $z = h$, где температура T и объемная доля ϕ наночастиц поддерживаются постоянными: $T = T_d$, $\phi = \phi_d$ при $z = 0$ и $T = T_u$, $\phi = \phi_u$ при $z = h$, причем $T_d > T_u$, $\phi_u > \phi_d$ (рис. 1). Считаем, что жидкость находится в постоянном гравитационном поле \mathbf{g} , направленном по оси z вертикально вниз: $\mathbf{g} = (0, 0, -g)$. Электропроводящая жидкость вращается с угловой скоростью Ω , направленной вертикально вверх по оси z . Вращение жидкости создает стационарный поток в азимутальном направлении: $\mathbf{V}_0 = \mathbf{e}_\varphi \Omega(R)R$, где $\Omega(R)$ — угловая скорость вращения с произвольной зависимостью от координаты R . Кроме того, мы полагаем, что наножидкость находится в спиральном магнитном поле \mathbf{H}_0 , которое представимо в виде суммы неоднородного азимутального $H_{0\varphi}(R)$ и однородного аксиального H_{0z} полей:

$$\mathbf{H}_0 = H_{0\varphi}(R)\mathbf{e}_\varphi + H_{0z}\mathbf{e}_z, \quad H_{0z} = \text{const.} \quad (1)$$

Топологической характеристикой силовых линий спирального магнитного поля (1) является псевдоскалярная величина — магнитная спиральность [37]:

$$\mathbf{H}_0 \cdot \text{rot } \mathbf{H}_0 = \frac{H_{0z}}{R} \frac{\partial}{\partial R}(RH_{0\varphi}). \quad (2)$$

Очевидно, что для исследования данного типа течения удобно использовать цилиндрическую систему координат (R, φ, z) , выбор которой обусловлен возможностью практического применения развиваемой здесь теории.

Для описания конвективных процессов будем использовать уравнения гидродинамики Буссинеска–Обербека несжимаемой электропроводящей наножидкости [7], записанные для цилиндрической системы координат:

$$\begin{aligned} & \rho_0 \left(\frac{\partial V_R}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla)V_R - \frac{V_\varphi^2}{R} \right) - \\ & - \frac{\mu_e}{4\pi} \left((\mathbf{H} \cdot \nabla)H_R - \frac{H_\varphi^2}{R} \right) = -\frac{\partial}{\partial R} \left(P + \frac{\mu_e H^2}{8\pi} \right) + \\ & + \mu \left(\nabla^2 V_R - \frac{2}{R^2} \frac{\partial V_\varphi}{\partial \varphi} - \frac{V_R}{R^2} \right), \quad (3) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \rho_0 \left(\frac{\partial V_\varphi}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla)V_\varphi + \frac{V_\varphi V_R}{R} \right) - \\ & - \frac{\mu_e}{4\pi} \left((\mathbf{H} \cdot \nabla)H_\varphi + \frac{H_\varphi H_R}{R} \right) = \\ & = -\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(P + \frac{\mu_e H^2}{8\pi} \right) + \\ & + \mu \left(\nabla^2 V_\varphi + \frac{2}{R^2} \frac{\partial V_R}{\partial \varphi} - \frac{V_\varphi}{R^2} \right), \quad (4) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \rho_0 \left(\frac{\partial V_z}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla)V_z \right) - \frac{\mu_e}{4\pi} (\mathbf{H} \cdot \nabla)H_z = \\ & = -\frac{\partial}{\partial z} \left(P + \frac{\mu_e H^2}{8\pi} \right) + \mu \nabla^2 V_z - \\ & - [\phi \rho_p + (1 - \phi)\rho_0(1 - \beta(T - T_u))]g, \quad (5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & (\rho c)_f \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla)T \right) = k_f \nabla^2 T + \\ & + (\rho c)_p \left(D_B \nabla \phi \cdot \nabla T + D_T \frac{\nabla T \cdot \nabla T}{T_u} \right), \quad (6) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla)\phi = D_B \nabla^2 \phi + \frac{D_T}{T_u} \nabla^2 T, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial H_R}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla)H_R - (\mathbf{H} \cdot \nabla)V_R = \\ & = \eta \left(\nabla^2 H_R - \frac{2}{R^2} \frac{\partial H_\varphi}{\partial \varphi} - \frac{H_R}{R^2} \right), \quad (8) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial H_\varphi}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) H_\varphi - (\mathbf{H} \cdot \nabla) V_\varphi + \frac{1}{R} (V_\varphi H_R - V_R H_\varphi) = \eta \left(\nabla^2 H_\varphi + \frac{2}{R^2} \frac{\partial H_R}{\partial \varphi} - \frac{H_\varphi}{R^2} \right), \quad (9)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) H_z - (\mathbf{H} \cdot \nabla) V_z = \eta \nabla^2 H_z, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial V_R}{\partial R} + \frac{V_R}{R} + \frac{1}{R} \frac{\partial V_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial V_z}{\partial z} &= 0, \\ \frac{\partial H_R}{\partial R} + \frac{H_R}{R} + \frac{1}{R} \frac{\partial H_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial H_z}{\partial z} &= 0, \end{aligned} \quad (11)$$

где скалярное произведение $\mathbf{A} \cdot \nabla$ и лапласиан $\Delta \equiv \nabla^2$ соответственно равны

$$\mathbf{A} \cdot \nabla = A_R \frac{\partial}{\partial R} + \frac{A_\varphi}{R} \frac{\partial}{\partial \varphi} + A_z \frac{\partial}{\partial z},$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Здесь $\rho_0 = \phi \rho_p + (1 - \phi) \rho_f$ — плотность наножидкости при контрольной температуре T_u , ρ_p — плотность наночастиц, ρ_f — плотность базовой жидкости при температуре T_u , ϕ — объемная доля наночастиц, β — коэффициент теплового расширения, $(\rho c)_f$ и $(\rho c)_p$ — эффективные теплоемкости базовой жидкости и наночастиц, D_B — коэффициент броуновской диффузии, D_T — коэффициент термофоретической диффузии. Знаки коэффициентов D_B и D_T положительные, а сами коэффициенты равны

$$D_B = \frac{k_B T}{3\pi \mu d_p}, \quad D_T = \frac{\mu}{\rho_f} \frac{0.26 k_f}{2k_f + k_p},$$

где d_p — диаметр наночастиц, k_B — постоянная Больцмана, k_f и k_p — коэффициенты теплопроводности базовой жидкости и наночастиц, μ — вязкость базовой жидкости. Коэффициенты магнитной проницаемости μ_e , магнитной вязкости η и электропроводности равны

$$\mu_e = \phi \mu_{ep} + (1 - \phi) \mu_{ef}, \quad \eta = \frac{1}{4\pi \mu_e \sigma} = \phi \eta_p + (1 - \phi) \eta_f,$$

$$\sigma = \phi \sigma_p + (1 - \phi) \sigma_f,$$

где μ_{ep} и μ_{ef} — магнитные проницаемости наночастиц и базовой жидкости, η_p и η_f — магнитные вязкости наночастиц и базовой жидкости, σ_p и σ_f — коэффициенты электропроводности наночастиц и базовой жидкости.

Представим все величины в уравнениях (3)–(11) в виде суммы стационарной и возмущенной частей:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} V_R \\ V_\varphi \\ V_z \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ \Omega(R)R \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} u_R \\ u_\varphi \\ u_z \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} H_R \\ H_\varphi \\ H_z \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ H_{0\varphi} \\ H_{0z} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_R \\ b_\varphi \\ b_z \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (12)$$

$$P = P_b + p, \quad T = T_b + T', \quad \phi = \phi_b + \phi'.$$

Равновесие стационарного течения обеспечивается балансом сил в радиальном направлении:

$$\Omega^2 R = \frac{1}{\rho_0} \frac{dP_b}{dR} + \frac{\mu_e H_{0\varphi}}{4\pi \rho_0 R} \frac{d}{dR} (R H_{0\varphi}). \quad (13)$$

В вертикальном направлении стационарному состоянию удовлетворяет уравнение гидростатики

$$\frac{dP_b}{dz} = -g[\phi_b(\rho_p - \rho_0) + \rho_0 - \rho_0 \beta(T_b - T_u)]. \quad (14)$$

Стационарные профили температуры $T_b = T_b(z)$ и объемной доли наночастиц $\phi_b = \phi_b(z)$ находятся из решений уравнений

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{k_f}{(\rho c)_f} \frac{d^2 T_b}{dz^2} + \frac{(\rho c)_p}{(\rho c)_f} \times \\ &\times \left(D_B \frac{d\phi_b}{dz} \frac{dT_b}{dz} + \frac{D_T}{T_u} \left(\frac{dT_b}{dz} \right)^2 \right), \quad (15) \\ 0 &= D_B \frac{d^2 \phi_b}{dz^2} + \frac{D_T}{T_u} \frac{d^2 T_b}{dz^2}. \end{aligned}$$

С учетом граничных условий находим линейные зависимости от z для $T_b(z)$ и $\phi_b(z)$:

$$T_b(z) = T_d - \frac{T_d - T_u}{h} z, \quad \phi_b(z) = \phi_d - \frac{\phi_d - \phi_u}{h} z.$$

Далее нас будет интересовать вопрос об устойчивости малых возмущений физических величин $(\mathbf{u} = (u_R, u_\varphi, u_z), \mathbf{b} = (b_R, b_\varphi, b_z), p, T', \phi')$ на фоне стационарного состояния. Подставляя уравнения (12) в (3)–(11), получим уравнения эволюции малых возмущений в линейном приближении:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_R}{\partial t} + \Omega \frac{\partial u_R}{\partial \varphi} - 2\Omega u_\varphi - \frac{\mu_e}{4\pi \rho_0} \times \\ \times \left(\frac{H_{0\varphi}}{R} \frac{\partial b_R}{\partial \varphi} - \frac{2H_{0\varphi} b_\varphi}{R} + H_{0z} \frac{\partial b_R}{\partial z} \right) &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial R} + \\ + \nu \left(\nabla^2 u_R - \frac{2}{R^2} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} - \frac{u_R}{R^2} \right), \quad \nu &= \frac{\mu}{\rho_0}, \quad (16) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial u_\varphi}{\partial t} + \Omega \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + 2\Omega(1 + \text{Ro})u_R - \\ & - \frac{1}{4\pi\rho_0} \left(\frac{H_{0\varphi}}{R} \frac{\partial b_R}{\partial \varphi} + \frac{2H_{0\varphi}}{R} (1 + \text{Rb}) + H_{0z} \frac{\partial b_\varphi}{\partial z} \right) = \\ & = -\frac{1}{\rho_0 R} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial \varphi} + \nu \left(\nabla^2 u_\varphi + \frac{2}{R^2} \frac{\partial u_R}{\partial \varphi} - \frac{u_\varphi}{R^2} \right), \quad (17) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial u_z}{\partial t} + \Omega \frac{\partial u_z}{\partial \varphi} - \frac{\mu_e}{4\pi\rho_0} \left(\frac{H_{0\varphi}}{R} \frac{\partial b_z}{\partial \varphi} + H_{0z} \frac{\partial b_z}{\partial z} \right) = \\ & = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial z} + \nu \nabla^2 u_z - \frac{g}{\rho_0} [\phi'(\rho_p - \rho_0) - \rho_0 \beta T'], \quad (18) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial T'}{\partial t} + \Omega \frac{\partial T'}{\partial \varphi} - u_z \left(\frac{T_d - T_u}{h} \right) = \chi_f \nabla^2 T' - \\ & - \frac{(\rho c)_p}{(\rho c)_f} \left[D_B \left(\frac{T_d - T_u}{h} \right) \frac{d\phi'}{dz} + D_B \left(\frac{\phi_d - \phi_u}{h} \right) \frac{dT'}{dz} + \right. \\ & \left. + \frac{2D_T}{T_u} \left(\frac{T_d - T_u}{h} \right) \frac{dT'}{dz} \right], \quad \chi_f = \frac{k_f}{(\rho c)_f}, \quad (19) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \phi'}{\partial t} + \Omega \frac{\partial \phi'}{\partial \varphi} + u_z \left(\frac{\phi_u - \phi_d}{h} \right) = \\ & = D_B \nabla^2 \phi' + \frac{D_T}{T_u} \nabla^2 T', \quad (20) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial b_R}{\partial t} + \Omega \frac{\partial b_R}{\partial \varphi} - \frac{H_{0\varphi}}{R} \frac{\partial u_R}{\partial \varphi} - H_{0z} \frac{\partial u_R}{\partial z} = \\ & = \eta \left(\nabla^2 b_R - \frac{2}{R^2} \frac{\partial b_\varphi}{\partial \varphi} - \frac{b_R}{R^2} \right), \quad (21) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial b_\varphi}{\partial t} + \Omega \frac{\partial b_\varphi}{\partial \varphi} - \frac{H_{0\varphi}}{R} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} - H_{0z} \frac{\partial u_\varphi}{\partial z} - 2\Omega \text{Rb} b_R + \\ & + \frac{2H_{0\varphi}}{R} \text{Rb} u_R = \eta \left(\nabla^2 b_\varphi + \frac{2}{R^2} \frac{\partial b_R}{\partial \varphi} - \frac{b_\varphi}{R^2} \right), \quad (22) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial b_z}{\partial t} + \Omega \frac{\partial b_z}{\partial \varphi} - \frac{H_{0\varphi}}{R} \frac{\partial u_z}{\partial \varphi} - H_{0z} \frac{\partial u_z}{\partial z} = \eta \nabla^2 b_z, \quad (23)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial u_R}{\partial R} + \frac{u_R}{R} + \frac{1}{R} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0, \\ & \frac{\partial b_R}{\partial R} + \frac{b_R}{R} + \frac{1}{R} \frac{\partial b_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial b_z}{\partial z} = 0, \quad (24) \end{aligned}$$

где $\tilde{p} = p + (1/4\pi) \mathbf{H}_0 \cdot \mathbf{b}$ — общее возмущенное давление,

$$\text{Ro} = \frac{R}{2\Omega} \frac{\partial \Omega}{\partial R}$$

— гидродинамическое число Россби, характеризующее неоднородность вращения среды,

$$\text{Rb} = \frac{R}{2H_{0\varphi} R^{-1}} \frac{\partial}{\partial R} (H_{0\varphi} R^{-1})$$

— магнитное число Россби, характеризующее свойства азимутального магнитного поля [17].

Отметим, что для твердотельного вращения параметр Россби равен нулю, $\text{Ro} = 0$, в случае кеплеровского вращения, $\Omega(R) \propto R^{-3/2}$, параметр Россби равен $\text{Ro} = -3/4$, для рэлеевского профиля угловой скорости $\Omega(R) \propto R^{-2}$, соответственно, $\text{Ro} = -1$. Если азимутальная составляющая $H_{0\varphi}(R) = 2I/R$ магнитного поля \mathbf{H}_0 создается внешним аксиальным током I , изолированным от жидкости, то для такой зависимости ($H_{0\varphi} \propto R^{-1}$) магнитное число Россби $\text{Rb} = -1$. В этом случае спиральность магнитного поля равна нулю: $\mathbf{H}_0 \cdot \text{rot} \mathbf{H}_0 = 0$. Магнитное число Россби равно нулю, $\text{Rb} = 0$, при линейной зависимости азимутального магнитного поля от радиальной координаты, $H_{0\varphi}(R) \propto R$, но спиральность магнитного поля при этом не исчезает: $\mathbf{H}_0 \cdot \text{rot} \mathbf{H}_0 = 2H_{0z}H_{0\varphi}/R$. Магнитному числу Россби $\text{Rb} = 1/2$ соответствует квадратичная зависимость азимутального магнитного поля от радиального направления, $H_{0\varphi}(R) \propto R^2$. Для этого случая спиральность магнитного поля равна $\mathbf{H}_0 \cdot \text{rot} \mathbf{H}_0 = 3H_{0z}H_{0\varphi}/R$. Отметим, что для случая однородного азимутального магнитного поля $H_{0\varphi} = \text{const}$ спиральность не исчезает, $\mathbf{H}_0 \cdot \text{rot} \mathbf{H}_0 = H_{0z}H_{0\varphi}/R$, а магнитное число Россби принимает значение $\text{Rb} = -1/2$.

3. ЛОКАЛЬНОЕ ВКБ-ПРИБЛИЖЕНИЕ И ДИСПЕРСИОННОЕ УРАВНЕНИЕ

Систему уравнений (16)–(24) будем использовать для исследования вопроса устойчивости малых осесимметричных возмущений. Поскольку характерный масштаб неоднородности среды в горизонтальной плоскости больше, чем в вертикальном направлении, $L_R \gg L_h$, мы можем применить локальный метод ВКБ для возмущений, зависящих от радиальных координат R . Для этой цели разложим все величины в ряд Тейлора в окрестности фиксированной точки R_0 , оставляя члены нулевого порядка по локальным координатам $\tilde{R} = R - R_0$. В результате получим систему дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами с учетом следующих соотношений:

$$\Omega_0 = \Omega(R_0), \quad \nabla^2 \rightarrow \hat{D}^2 + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{R}^2} + \frac{1}{R_0} \frac{\partial}{\partial \tilde{R}}, \quad \hat{D} \equiv \frac{\partial}{\partial z},$$

$$\left(\nabla^2 \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{b} \end{pmatrix} \right)_R = \nabla^2 \begin{pmatrix} u_R \\ b_R \end{pmatrix} - \frac{1}{R_0^2} \begin{pmatrix} u_R \\ b_R \end{pmatrix},$$

$$\left(\nabla^2 \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{b} \end{pmatrix} \right)_\varphi = \nabla^2 \begin{pmatrix} u_\varphi \\ b_\varphi \end{pmatrix} - \frac{1}{R_0^2} \begin{pmatrix} u_\varphi \\ b_\varphi \end{pmatrix}.$$

Все возмущения в системе уравнений (16)–(24) представим в виде плоских волн:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{b} \\ T' \\ \phi' \\ \tilde{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{U}(z) \\ \mathbf{B}(z) \\ \Theta(z) \\ \Phi(z) \\ \tilde{P}(z) \end{pmatrix} \exp(\gamma t + ik\tilde{R}). \quad (25)$$

Подставляя (25) в систему уравнений (16)–(24), в коротковолновом приближении $k \gg 1/R_0$, пренебрегая членами $ik/R_0 - 1/R_0^2$, находим

$$\hat{L}_\nu U_R + \frac{2\Omega}{\nu} U_\varphi - \frac{\mu_e H_{0\varphi}}{2\pi\rho_0\nu R_0} B_\varphi + \frac{\mu_e H_{0z}}{4\pi\rho_0\nu} \hat{D} B_R - \frac{ik}{\nu\rho_0} \tilde{P} = 0, \quad (26)$$

$$\hat{L}_\nu U_\varphi - \frac{2\Omega}{\nu} (1+Ro) U_R + \frac{\mu_e H_{0\varphi}}{2\pi\rho_0\nu R_0} (1+Rb) B_R + \frac{\mu_e H_{0z}}{4\pi\rho_0\nu} \hat{D} B_\varphi = 0, \quad (27)$$

$$\hat{L}_\nu U_z + \frac{\mu_e H_{0z}}{4\pi\rho_0\nu} \hat{D} H_z - \frac{\hat{D}}{\nu\rho_0} \tilde{P} - \frac{g}{\rho_0\nu} (\Phi(\rho_p - \rho_0) - \rho_0\beta\Theta) = 0, \quad (28)$$

$$\hat{L}_\chi \Theta + \left(\frac{T_d - T_u}{\chi_f h} \right) U_z - \frac{(\rho c)_p D_B}{(\rho c)_f \chi_f} \left(\frac{T_d - T_u}{h} \right) \hat{D} \Phi - \frac{(\rho c)_p}{(\rho c)_f \chi_f} \left[D_B \left(\frac{\phi_d - \phi_u}{h} \right) + \frac{2D_T}{T_u} \left(\frac{T_d - T_u}{h} \right) \right] \hat{D} \Theta = 0, \quad (29)$$

$$\hat{L}_\phi \Phi + \left(\frac{\phi_d - \phi_u}{D_B h} \right) U_z + \frac{D_T}{D_B T_u} (\hat{D}^2 - k^2) \Theta = 0, \quad (30)$$

$$\hat{L}_\eta B_R + \frac{H_{0z}}{\eta} \hat{D} U_R = 0, \quad (31)$$

$$\hat{L}_\eta B_\varphi + \frac{H_{0z}}{\eta} \hat{D} U_\varphi - \frac{2H_{0\varphi}}{\eta R_0} Rb U_R + \frac{2\Omega}{\eta} Ro B_R = 0, \quad (32)$$

$$\hat{L}_\eta B_z + \frac{H_{0z}}{\eta} \hat{D} U_z = 0. \quad (33)$$

Здесь введены следующие обозначения для операторов:

$$\hat{L}_\nu = \hat{D}^2 - \left(\frac{\gamma}{\nu} + k^2 \right), \quad \hat{L}_\eta = \hat{D}^2 - \left(\frac{\gamma}{\eta} + k^2 \right),$$

$$\hat{L}_\chi = \hat{D}^2 - \left(\frac{\gamma}{\chi_f} + k^2 \right), \quad \hat{L}_\phi = \hat{D}^2 - \left(\frac{\gamma}{D_B} + k^2 \right).$$

Для последующего анализа системы уравнений (26)–(33) удобно привести ее к безразмерному виду, вводя безразмерные величины, которые отметим звездочкой:

$$(R_0^*, z^*) = h^{-1}(R_0, z),$$

$$(U_R^*, U_\varphi^*, U_z^*) = \frac{h}{\chi_f} (U_R, U_\varphi, U_z),$$

$$(B_R^*, B_\varphi^*, B_z^*) = H_0^{-1} (B_R, B_\varphi, B_z), \quad H_0 = H_{0z},$$

$$\varphi^* = \varphi, \quad \Theta^* = \frac{\Theta}{T_d - T_u}, \quad \Phi^* = \frac{\Phi}{\phi_u - \phi_d},$$

$$\tilde{P}^* = \tilde{P} \left(\frac{h^2}{\rho_0 \nu \chi_f} \right), \quad t^* = t \left(\frac{\nu}{h^2} \right), \quad \frac{\partial}{\partial t^*} = \frac{h^2}{\nu} \frac{\partial}{\partial t}.$$

Опуская звездочку, получим следующую систему безразмерных уравнений:

$$\hat{L}_\nu U_R + \sqrt{Ta} U_\varphi - 2Pr Pm^{-1} Q\xi B_\varphi + Pr Pm^{-1} Q \hat{D} B_R - ik \tilde{P} = 0, \quad (34)$$

$$\hat{L}_\nu U_\varphi - \sqrt{Ta} (1+Ro) U_R + 2Pr Pm^{-1} Q\xi (1+Rb) B_R + Pr Pm^{-1} Q \hat{D} B_\varphi = 0, \quad (35)$$

$$\hat{L}_\nu U_z + Pr Pm^{-1} Q \hat{D} B_z - \hat{D} \tilde{P} + Ra\Theta - R_n \Phi = 0, \quad (36)$$

$$\hat{L}_\chi \Theta + U_z + \frac{N_B}{L_e} (\hat{D}\Theta - \hat{D}\Phi) - \frac{2N_A N_B}{L_e} \hat{D}\Theta = 0, \quad (37)$$

$$\hat{L}_\phi \Phi - L_e U_z + N_A (\hat{D}^2 - k^2) \Theta = 0, \quad (38)$$

$$\hat{L}_\eta B_R + Pr^{-1} Pm \hat{D} U_R = 0, \quad (39)$$

$$\hat{L}_\eta B_\varphi + Pr^{-1} Pm \hat{D} U_\varphi - 2Pr^{-1} Pm \xi Rb U_R + Pm Ro \sqrt{Ta} B_R = 0, \quad (40)$$

$$\hat{L}_\eta B_z + Pr^{-1} Pm \hat{D} U_z = 0, \quad (41)$$

где операторы $\hat{L}_\nu, \hat{L}_\eta, \hat{L}_\chi, \hat{L}_\phi$ в безразмерных переменных имеют вид

$$\hat{L}_\nu = \hat{D}^2 - \gamma - k^2, \quad \hat{L}_\eta = \hat{D}^2 - Pm\gamma - k^2,$$

$$\hat{L}_\chi = \hat{D}^2 - Pr\gamma - k^2, \quad \hat{L}_\phi = \hat{D}^2 - Pr L_e \gamma - k^2.$$

В уравнениях (34)–(41) введены безразмерные параметры $Ta = 4\Omega^2 h^4 / \nu^2$ – число Тейлора, $Pr = \nu / \chi_f$ – число Прандтля, $Pm = \nu / \eta$ – магнитное число Прандтля, $Q = \mu_e H_0^2 h^2 / 4\pi\rho_0\nu\eta$ –

число Чандрасекара, $\xi = H_{0\varphi}h/R_0H_0$ — отношение азимутального магнитного поля к аксиальному, $Ra = (T_d - T_u)\rho_0g\beta h^3/\mu\chi_f$ — число Рэлея, $R_n = (\rho_p - \rho_f)(\phi_u - \phi_d)gh^3/\mu\chi_f$ — концентрационное число Рэлея, $L_e = \chi_f/D_B$ — число Льюиса,

$$N_B = (\phi_u - \phi_d) \frac{(\rho c)_p}{(\rho c)_f}$$

— коэффициент, характеризующий прирост плотности наночастиц, и

$$N_A = \frac{D_T(T_d - T_u)}{D_B T_u (\phi_u - \phi_d)}$$

— коэффициент модифицированной диффузии.

Уравнения (34)–(41) дополняются уравнениями соленоидальности полей \mathbf{u} и \mathbf{b} :

$$\widehat{D}U_z + ikU_R = 0, \quad \widehat{D}B_z + ikB_R = 0. \quad (42)$$

Используя условие (42), из уравнений (34) и (36) исключаем давление \tilde{P} :

$$\begin{aligned} \tilde{P} = & \frac{1}{\widehat{D}^2 - k^2} \left[\sqrt{\text{Ta}} ik U_\varphi - \right. \\ & - 2Q\xi ik \left(-\frac{\widehat{D}U_\varphi}{\widehat{L}_\eta} + 2\xi \text{Rb} \frac{U_R}{\widehat{L}_\eta} + \text{PmRo} \sqrt{\text{Ta}} \frac{\widehat{D}}{\widehat{L}_\eta^2} U_R \right) - \\ & - \text{Ra} \frac{\widehat{D} \left(\widehat{L}_\phi - \frac{N_B}{L_e} \widehat{D} \right)}{\widehat{L}} U_z - \\ & \left. - R_n \frac{\widehat{D}}{\widehat{L}\widehat{L}_\phi} \left(\widehat{L}L_e + N_A (\widehat{D}^2 - k^2) \right) \times \right. \\ & \left. \times \left(\widehat{L}_\phi - \frac{N_B}{L_e} \widehat{D} \right) U_z \right], \quad (43) \end{aligned}$$

где оператор

$$\widehat{L} = \widehat{L}_\chi \widehat{L}_\phi + \frac{N_B}{L_e} (1 - 2N_A) \widehat{L}_\phi \widehat{D} + \frac{N_A N_B}{L_e} (\widehat{D}^2 - k^2) \widehat{D}.$$

Подставляя выражение (43) в систему линейных уравнений (34)–(41), в результате несложных, но громоздких преобразований получим одно дифференциальное уравнение для U_z :

$$\begin{aligned} & [\widehat{a}_{33} (\widehat{a}_{11} \widehat{a}_{22} - \widehat{a}_{21} \widehat{a}_{12}) + \\ & + \widehat{a}_{13} (\widehat{a}_{21} \widehat{a}_{32} - \widehat{a}_{31} \widehat{a}_{22})] U_z = 0, \quad (44) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \widehat{a}_{11} = & \widehat{L}_\nu - Q \frac{\widehat{D}^2}{\widehat{L}_\eta} - \\ & - 2Q\xi \left(2\xi \text{Rb} + \sqrt{\text{Ta}} \text{RoPm} \frac{\widehat{D}}{\widehat{L}_\eta} \right) \frac{\widehat{D}^2}{\widehat{L}_\eta (\widehat{D}^2 - k^2)}, \end{aligned}$$

$$\widehat{a}_{12} = \frac{\widehat{D}^2}{\widehat{D}^2 - k^2} \left(\sqrt{\text{Ta}} + 2Q\xi \frac{\widehat{D}}{\widehat{L}_\eta} \right),$$

$$\begin{aligned} \widehat{a}_{13} = & \frac{ik\widehat{D}}{\widehat{D}^2 - k^2} \left[\text{Ra} \frac{\widehat{L}_\phi - \frac{N_B}{L_e} \widehat{D}}{\widehat{L}} + \right. \\ & \left. + \frac{R_n}{\widehat{L}\widehat{L}_\phi} \left(\widehat{L}L_e + N_A (\widehat{D}^2 - k^2) \left(\widehat{L}_\phi - \frac{N_B}{L_e} \widehat{D} \right) \right) \right], \end{aligned}$$

$$\widehat{a}_{21} = -\sqrt{\text{Ta}}(1 + \text{Ro}) + Q\text{RoPm} \sqrt{\text{Ta}} \frac{\widehat{D}^2}{\widehat{L}_\eta^2} - 2Q\xi \frac{\widehat{D}}{\widehat{L}_\eta},$$

$$\widehat{a}_{22} = \widehat{L}_\nu - Q \frac{\widehat{D}^2}{\widehat{L}_\eta},$$

$$\widehat{a}_{31} = \frac{2Q\xi ik}{\widehat{D}^2 - k^2} \left(2\xi \text{Rb} \frac{\widehat{D}}{\widehat{L}_\eta} + \sqrt{\text{Ta}} \text{RoPm} \frac{\widehat{D}^2}{\widehat{L}_\eta^2} \right),$$

$$\widehat{a}_{32} = -\frac{ik\widehat{D}}{\widehat{D}^2 - k^2} \left(\sqrt{\text{Ta}} + 2Q\xi \frac{\widehat{D}}{\widehat{L}_\eta} \right),$$

$$\begin{aligned} \widehat{a}_{33} = & \widehat{L}_\nu - Q \frac{\widehat{D}^2}{\widehat{L}_\eta} + \frac{k^2 \text{Ra}}{\widehat{L}(\widehat{D}^2 - k^2)} \left(\widehat{L}_\phi - \frac{N_B}{L_e} \widehat{D} \right) + \\ & + \frac{k^2 R_n}{\widehat{L}\widehat{L}_\phi (\widehat{D}^2 - k^2)} \left(\widehat{L}L_e + N_A (\widehat{D}^2 - k^2) \left(\widehat{L}_\phi - \frac{N_B}{L_e} \widehat{D} \right) \right). \end{aligned}$$

Уравнение (44) дополняется граничными условиями только в z -направлении:

$$U_z = \frac{d^2 U_z}{dz^2} = 0 \quad \text{при} \quad z = 0, \quad z = 1. \quad (45)$$

Уравнение (44) описывает конвективные явления в тонком слое неоднородно вращающейся электропроводящей наножидкости во внешнем спиральном магнитном поле.

Выберем функцию U_z , удовлетворяющую свободным граничным условиям (45), в следующем виде:

$$U_z = U_{0z} \sin n\pi z \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad (46)$$

где $U_{0z} = \text{const}$ — амплитуда возмущений z -компоненты скорости. Подставляя (46) в (44) и проводя интегрирование по толщине слоя $z = (0, 1)$, получим дисперсионное уравнение для одномодового приближения ($n = 1$):

$$Ra = \left[a^2 \Gamma_A^4 \Gamma_\eta (a^2 \Gamma_A^2 \Gamma_\phi^2 \Gamma_\chi - m_0) + a^2 \Gamma_A^2 \Gamma_\phi^2 \Gamma_\chi m_1 - \pi^2 a^2 \Gamma_A^2 \Gamma_\phi \left(\frac{N_B}{L_e} (1 - 2N_A) \Gamma_\phi + \frac{N_A N_B}{L_e} a^2 \right) m_2 \right] \times \left[k^2 \Gamma_\eta \Gamma_\phi (a^2 \Gamma_\eta \Gamma_\phi \Gamma_A^4 + \frac{\pi^2}{L_e} (N_B - N_A) m_2) \right]^{-1}, \quad (47)$$

где введены обозначения

$$\Gamma_A^2 = (\gamma + a^2)(\gamma Pm + a^2) + \pi^2 Q, \quad \Gamma_\chi = \gamma Pr + a^2,$$

$$\Gamma_\eta = \gamma Pm + a^2, \quad \Gamma_\phi = \gamma Pr L_e + a^2,$$

$$a^2 = \pi^2 + k^2, \quad m_0 = k^2 R_n \Gamma_\eta \Gamma_\phi (L_e \Gamma_\chi + a^2 N_A),$$

$$m_1 = \pi^2 Ta(1 + Ro) \Gamma_\eta^3 + \pi^4 Q Ta Ro Pm \Gamma_\eta - 4\pi^4 Q^2 \xi^2 \Gamma_\eta - 4\pi^2 Q \xi^2 \Gamma_A^2 Rb \Gamma_\eta,$$

$$m_2 = 2\pi^2 Q \xi \sqrt{Ta} [(2 + Ro) \Gamma_\eta^2 + Pm Ro (\pi^2 Q - \Gamma_A^2)].$$

В отсутствие азимутального магнитного поля ($\xi = 0$) и наночастиц ($R_n = N_B = 0$) дисперсионное уравнение (47) совпадает с результатами работы [12], а при $\xi \neq 0$ и $R_n = N_B = 0$ — с результатами работы [15].

4. ДИСПЕРСИОННОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ СТАНДАРТНОЙ МВН В ТОНКИХ СЛОЯХ НАНОЖИДКОСТИ

Рассмотрим случай, когда температура на границах слоя наножидкости одинаковая ($Ra = N_A = 0$) и внешнее азимутальное магнитное поле отсутствует ($\xi = 0$). Тогда из уравнения (47) мы получим дисперсионное уравнение для стандартной МВН в тонком слое наножидкости в виде полинома шестой степени по γ :

$$\mathcal{P}(\gamma) \equiv a_0 \gamma^6 + a_1 \gamma^5 + a_2 \gamma^4 + a_3 \gamma^3 + a_4 \gamma^2 + a_5 \gamma + a_6 = 0, \quad (48)$$

где коэффициенты a_j ($j = 0, \dots, 6$) имеют вид

$$a_0 = Pr^2 Pm^2 L_e a^2,$$

$$a_1 = 2Pr^2 Pm L_e a^4 (1 + Pm) + Pr(1 + L_e) a^4 Pm^2,$$

$$a_2 = Pr^2 L_e [a^6 (1 + 4Pm + Pm^2) + 2a^2 Pm \pi^2 Q + \pi^2 Pm^2 Ta(1 + Ro)] + 2a^6 (1 + L_e) Pr Pm (1 + Pm) + a^6 Pm^2 - k^2 R_n L_e Pm^2,$$

$$a_3 = Pr^2 L_e [2a^8 (1 + Pm) + 2\pi^2 a^4 Q (1 + Pm) + 2\pi^2 a^2 Pm Ta(1 + Ro)] + a^2 (1 + L_e) \times Pr [a^6 (1 + 4Pm + Pm^2) + 2a^2 Pm \pi^2 Q + \pi^2 Pm^2 Ta(1 + Ro)] + 2a^8 Pm (1 + Pm) - k^2 R_n L_e (Pr Pm a^2 (2 + Pm) + a^2 Pm^2),$$

$$a_4 = a^2 Pr(1 + L_e) [2a^8 (1 + Pm) + 2\pi^2 a^4 Q (1 + Pm) + 2\pi^2 a^2 Pm Ta(1 + Ro)] + Pr^2 L_e [a^2 (a^4 + \pi^2 Q)^2 + \pi^2 a^4 Ta(1 + Ro) + \pi^4 Pm Ro Ta Q] + a^4 [a^6 (1 + 4Pm + Pm^2) + 2a^2 Pm \pi^2 Q + \pi^2 Pm^2 Ta(1 + Ro)] - k^2 R_n L_e (Pr(a^4 (1 + 2Pm) + \pi^2 Q Pm) + a^4 Pm (2 + Pm)),$$

$$a_5 = a^2 (1 + L_e) Pr [a^2 (a^4 + \pi^2 Q)^2 + \pi^2 a^4 Ta(1 + Ro) + \pi^4 Pm Ro Ta Q] + a^4 [2a^8 (1 + Pm) + 2\pi^2 a^4 Q (1 + Pm) + 2\pi^2 a^2 Pm Ta(1 + Ro)] - k^2 R_n L_e (a^2 Pr(a^4 + \pi^2 Q) + a^6 (1 + 2Pm) + \pi^2 a^2 Q Pm),$$

$$a_6 = a^4 [a^2 (a^4 + \pi^2 Q)^2 + \pi^2 a^4 Ta(1 + Ro) + \pi^4 Pm Ro Ta Q] - k^2 a^4 (a^4 + \pi^2 Q) R_n L_e.$$

В предельном случае, когда нет наночастиц, т. е. для «чистой» электропроводящей жидкости, дисперсионное уравнение (48) совпадает с результатами работы [13]. Аналитическое решение уравнения (48) в общем случае невозможно. Однако вывод об устойчивости возмущений, описываемых уравнением (48) с действительными коэффициентами, можно сделать, не решая его, а лишь анализируя его коэффициенты с применением критериев Рауса – Гурвица или Лъенара – Шипара [38]. В последнем критерии число детерминантных неравенств примерно вдвое меньше, чем в условиях Рауса – Гурвица, поэтому целесообразно его использование. Критерий Лъенара – Шипара асимптотической устойчивости возмущений, описываемых алгебраическим уравнением (48), состоит в следующем. Для того чтобы многочлен $\mathcal{P}(\gamma)$ имел все корни с отрицательными вещественными частями, необходимо и достаточно, чтобы

а) все коэффициенты многочлена $\mathcal{P}(\gamma)$ были положительны: $a_j > 0, j = 0, \dots, 6$;

б) имели место неравенства для определителей Гурвица: $\Delta_{j-1} > 0, \Delta_{j-3} > 0, \dots$, где Δ_m — обозначает определитель Гурвица порядка m :

$$\Delta_m = \begin{vmatrix} a_1 & a_3 & a_5 & \dots \\ a_0 & a_2 & a_4 & \dots \\ 0 & a_1 & a_3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & a_m \end{vmatrix}.$$

Используя алгоритм Льенара–Шипара, получим необходимые и достаточные условия устойчивости:

$$a_j > 0, \quad j = 0, \dots, 6, \quad \Delta_3 > 0, \quad \Delta_5 > 0. \quad (49)$$

Подставляя значения коэффициентов a_j в условия (49), находим следующие неравенства:

$$1. (a_0 > 0) \Rightarrow \text{Pr}^2 \text{Pm}^2 L_e a^2 > 0,$$

$$(a_1 > 0) \Rightarrow 2\text{Pr}^2 \text{Pm} L_e a^4 (1 + \text{Pm}) + \text{Pr}(1 + L_e) a^4 \text{Pm}^2 > 0.$$

Эти неравенства выполняются автоматически.

$$2. (a_2 > 0) \Rightarrow \text{Pr}^2 L_e [a^6 (1 + 4\text{Pm} + \text{Pm}^2) + 2a^2 \text{Pm} \pi^2 \text{Q} + \pi^2 \text{Pm}^2 \text{Ta} (1 + \text{Ro})] + 2a^6 (1 + L_e) \text{Pr} \text{Pm} (1 + \text{Pm}) + a^6 \text{Pm}^2 > k^2 \text{R}_n L_e \text{Pm}^2.$$

Отсюда видно, что диссипативные процессы естественно приводят к стабилизации устойчивости течений наножидкости. Стабилизирующими факторами также выступают однородное магнитное поле и неоднородное вращение, если профиль угловой скорости вращения соответствует положительным числам Россби ($\text{Ro} > 0$). Напротив, концентрация наночастиц приводит к дестабилизации течения наножидкости.

$$3. (a_3 > 0) \Rightarrow \text{Pr}^2 L_e [2a^8 (1 + \text{Pm}) + 2\pi^2 a^4 \text{Q} (1 + \text{Pm}) + 2\pi^2 a^2 \text{Pm} \text{Ta} (1 + \text{Ro})] + a^2 (1 + L_e) \text{Pr} \times [a^6 (1 + 4\text{Pm} + \text{Pm}^2) + 2a^2 \text{Pm} \pi^2 \text{Q} + \pi^2 \text{Pm}^2 \text{Ta} (1 + \text{Ro})] + 2a^8 \text{Pm} (1 + \text{Pm}) > k^2 \text{R}_n L_e \times (\text{Pr} \text{Pm} a^2 (2 + \text{Pm}) + a^2 \text{Pm}^2).$$

Отсюда мы видим, что однородное магнитное поле и неоднородное вращение с положительными числами Россби ($\text{Ro} > 0$) также оказывают стабилизирующее действие, а концентрация наночастиц (члены с концентрационным числом Рэлея R_n) оказывает дестабилизирующее влияние. Для «чистой», идеально электропроводящей, жидкости в однородном магнитном поле это неравенство совпадает с известным критерием устойчивости Велихова [20]:

$$2\pi^2 \text{QPm}^{-1} + \frac{\pi^2}{a^2} \text{Ta} (1 + \text{Ro}) > 0,$$

или, при переходе к размерным переменным

$$\frac{\pi^2 \text{Q}}{\text{Pm}} \rightarrow \frac{h^4}{\nu^2} \omega_A^2, \quad \text{Ta} (1 + \text{Ro}) \rightarrow \frac{4\Omega^2 h^4}{\nu^2} (1 + \text{Ro}),$$

$$\frac{\pi^2}{a^2} \rightarrow \xi^2 = \frac{k_z^2}{k_z^2 + k_R^2},$$

получим

$$\omega_A^2 + 2\Omega^2 \xi^2 (1 + \text{Ro}) > 0,$$

где $\omega_A = \sqrt{\mu_e k_z^2 H_0^2 / 4\pi\rho_0}$ — альфвеновская частота.

4. Неравенства $a_4 > 0$ и $a_5 > 0$ не содержат новых условий стабилизации возмущений.

5. Неравенство $a_6 > 0$ запишем в виде

$$\text{Ro} > -\frac{a^2 (a^4 + \pi^2 \text{Q})^2 + \pi^2 a^4 \text{Ta}}{\pi^2 \text{Ta} (a^4 + \pi^2 \text{QPm})} + \frac{k^2 (a^4 + \pi^2 \text{Q}) \text{R}_n L_e}{\pi^2 \text{Ta} (a^4 + \pi^2 \text{QPm})} = \text{Ro}_{cr}, \quad (50)$$

где параметр Ro_{cr} — критическое число Россби на границе устойчивости, соответствующее нейтральному состоянию $\gamma = 0$. Выражение (50) в предельном случае «чистой» электропроводящей жидкости переходит в известное выражение для критического числа Россби Ro [17]:

$$\text{Ro}_{cr} = -\frac{a^2 (a^4 + \pi^2 \text{Q})^2 + \pi^2 a^4 \text{Ta}}{\pi^2 \text{Ta} (a^4 + \pi^2 \text{QPm})},$$

или, при переходе к размерным переменным

$$\frac{\pi^2 \text{Q}}{a^4} \rightarrow \frac{\omega_A^2}{\omega_\nu \omega_\eta}, \quad \frac{\pi^2 \text{QPm}}{a^4} \rightarrow \frac{\omega_A^2}{\omega_\eta^2}, \quad \frac{\text{Ta}}{a^4} \rightarrow \frac{4\Omega^2}{\omega_\nu^2},$$

$$\frac{\pi^2}{a^2} \rightarrow \alpha^2 = \left(\frac{k_z}{|\mathbf{k}|} \right)^2,$$

находим

$$\text{Ro}_{cr} = -\frac{(\omega_A^2 + \omega_\nu \omega_\eta)^2 + 4\alpha^2 \Omega^2 \omega_\eta^2}{4\Omega^2 \alpha^2 (\omega_A^2 + \omega_\eta^2)}.$$

Здесь $\omega_\nu = \nu |\mathbf{k}|^2$, $\omega_\eta = \eta |\mathbf{k}|^2$ — частоты вязкостной и омической диссипаций, $|\mathbf{k}|^2 = k_R^2 + k_z^2$.

Перейдем теперь к условиям устойчивости, состоящим из неравенств с определителями Гурвица (49). Для определителя Δ_3 ,

$$\Delta_3 = \begin{vmatrix} a_1 & a_3 & a_5 \\ a_0 & a_2 & a_4 \\ 0 & a_1 & a_3 \end{vmatrix} = a_1 a_2 a_3 + a_0 a_1 a_5 - a_1^2 a_4 - a_0 a_3^2,$$

критерий устойчивости имеет вид

$$a_1 a_2 a_3 + a_0 a_1 a_5 > a_1^2 a_4 + a_0 a_3^2. \quad (51)$$

Для второго определителя Гурвица из условия (49),

$$\Delta_5 = \begin{vmatrix} a_1 & a_3 & a_5 & 0 & 0 \\ a_0 & a_2 & a_4 & a_6 & 0 \\ 0 & a_1 & a_3 & a_5 & 0 \\ 0 & a_0 & a_2 & a_4 & 0 \\ 0 & 0 & a_1 & a_3 & a_5 \end{vmatrix} = a_1 a_2 (a_3 a_4 a_5 - a_2 a_5^2) -$$

$$- a_1 a_4 (a_1 a_4 a_5 - a_0 a_5^2) + a_1 a_6 (a_1 a_2 a_5 - a_0 a_3 a_5) -$$

$$- a_3 a_0 (a_3 a_4 a_5 - a_2 a_5^2) + a_5 a_0 (a_1 a_4 a_5 - a_0 a_5^2),$$

получим следующий критерий устойчивости:

$$a_4 a_5 (a_1 a_2 a_3 + a_0 a_1 a_5 - a_1^2 a_4 - a_0 a_3^2) +$$

$$+ a_1^2 a_2 a_5 a_6 + a_0 a_5^2 (a_2 a_3 + a_1 a_4) >$$

$$> a_0 a_1 a_3 a_5 a_6 + a_5^2 (a_1 a_2^2 + a_0^2 a_5). \quad (52)$$

Критерии устойчивости (51) и (52) показывают, что концентрация наночастиц оказывает дестабилизирующее действие на устойчивость осесимметричных возмущений.

Используя выражение для критического числа Россби (50), численным методом определим области развития стандартной МВН в «чистой» жидкости и наножидкости. На рис. 2 выделены области неустойчивости для чисел Россби $Ro < Ro_{cr}$ при изменении параметра вращения Ta (числа Тейлора) в плоскости (k, Ro) , где k — безразмерное радиальное волновое число. Черным цветом на рис. 2 показаны области неустойчивости в «чистой» жидкости, а серым цветом — в наножидкости. На рис. 2 видно, что при небольших числах Тейлора $Ta = 100, 300$ область развития стандартной МВН в наножидкости (рис. 2а, б) намного больше области неустойчивости для «чистой» жидкости, $R_n = 0$. Напротив, при больших числах Тейлора $Ta = 2000$ области неустойчивости для наножидкости и «чистой» жидкости уже не так сильно различаются. Значения параметров $R_n = 0.122$, $L_e = 5000$, $Pr = 5$, $N_A = 5$, $N_B = 7.5 \cdot 10^{-4}$ для наножидкости (например Al_2O_3 -вода) взяты из работы [11].

На рис. 3 представлены численные результаты темпа роста стандартной МВН, т.е. для положительного вещественного корня ($Re \gamma > 0$) дисперсионного уравнения (48), в зависимости от радиального волнового числа k . Считая параметры наножидкости фиксированными ($Pr = 5$, $R_n = 0.122$, $L_e = 5000$, рис. 3а), видим, что темпы роста осесимметричных возмущений в случае рэлеевского профиля вращения ($Ro = -1$) выше, чем для случая кеплеровского ($Ro = -3/4$) профиля вращения при

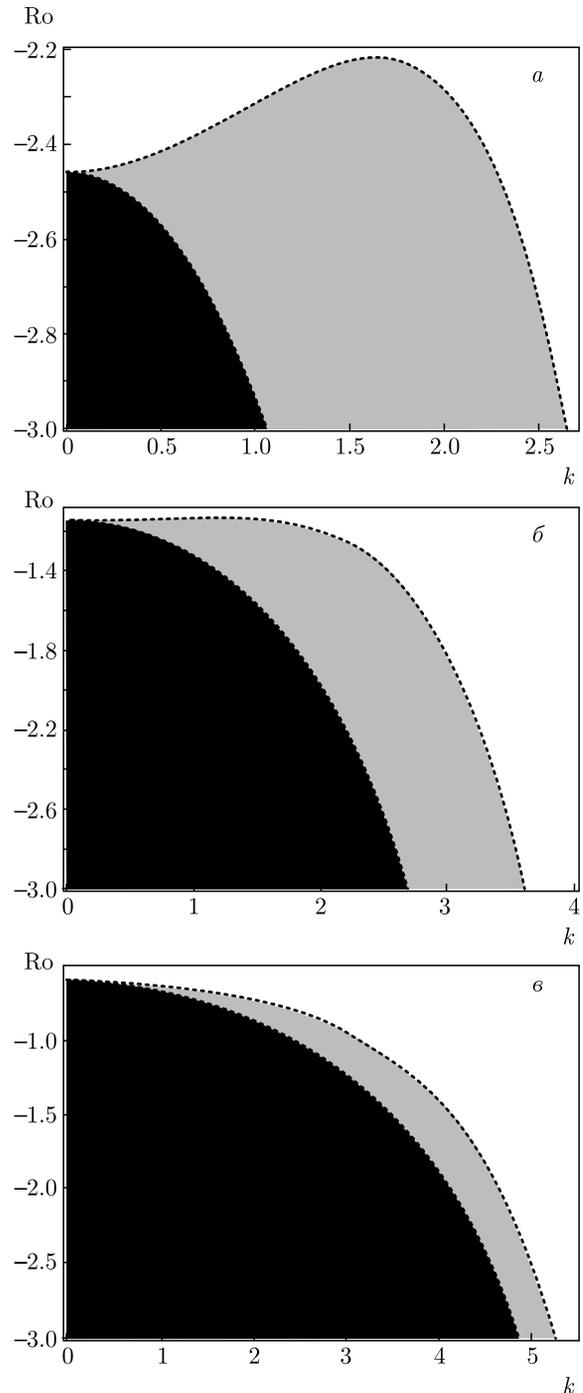


Рис. 2. Черным цветом показаны области, в которых возникает стандартная МВН в «чистой» жидкости, и серым цветом — в наножидкости для параметров $Q = 10$, $Pm = 1$, $R_n = 0.122$, $L_e = 5000$ и чисел Тейлора $Ta = 100$ (а), 300 (б), 2000 (в)

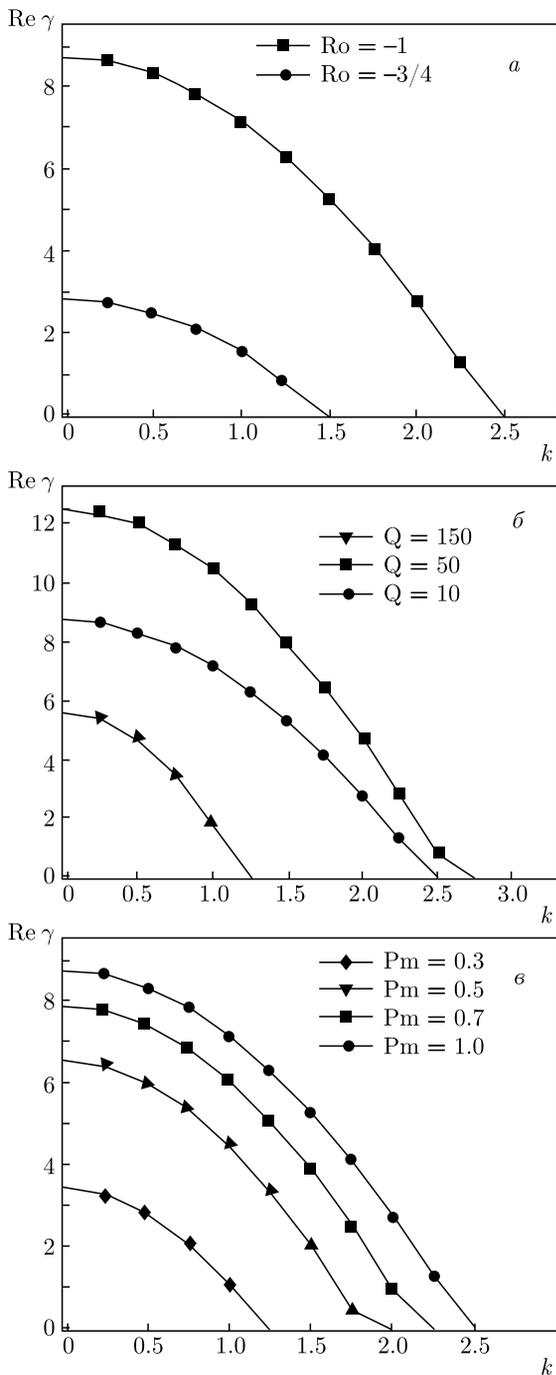


Рис. 3. Зависимости инкремента ($\text{Re } \gamma > 0$) стандартной МВН в наножидкости от радиального волнового числа k . Показаны темпы роста возмущений для рэлеевского ($\text{Ro} = -1$) и кеплеровского ($\text{Ro} = -3/4$) профилей вращения (а), для разных значений величины аксиального магнитного поля (числа Чандрасекара) $Q = 10, 50, 150$ (б) и для различных значений магнитного числа Прандтля $\text{Pm} = 0.3, 0.5, 0.7, 1.0$ (в)

числах Тейлора $\text{Ta} = 2000$. На рис. 3б показаны темпы роста стандартной МВН при различных значениях аксиального магнитного поля $Q = 10, 50, 150$ для рэлеевского профиля вращения ($\text{Ro} = -1$) и числа Тейлора $\text{Ta} = 2000$. Здесь мы видим, что увеличение напряженности аксиального магнитного поля H_{0z} может приводить как к увеличению инкремента неустойчивости ($Q = 10 \rightarrow Q = 50$), так и к уменьшению инкремента при $Q = 50 \rightarrow Q = 150$. Вариации магнитного числа Прандтля Pm также могут существенно повлиять на развитие стандартной МВН в наножидкости (рис. 3в). Для фиксированных параметров $\text{Ta} = 2000, Q = 10, \text{Ro} = -1$ мы наблюдаем, что темпы роста возмущений значительно ниже при числах Прандтля $\text{Pm} \ll 1$.

Отметим, что при изменении физических характеристик наножидкости, например электропроводности σ , теплопроводности χ и вязкости ν , от которых зависят безразмерные параметры $Q, \text{Pr}, \text{Pm}, \text{Ta}, \text{R}_n$, при рэлеевском профиле вращения ($\text{Ro} = -1$) вполне возможно развитие стандартной МВН.

5. ДИСПЕРСИОННОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ АЗИМУТАЛЬНОЙ МВН В ТОНКИХ СЛОЯХ НАНОЖИДКОСТИ

Рассмотрим неоднородно вращающийся слой наножидкости с постоянной и одинаковой температурой на границах слоя во внешнем азимутальном магнитном поле $H_{0\varphi}$. В этом случае осевое магнитное поле равно нулю, $H_{0z} = 0$, и $\text{Ra} = N_A = 0$. При этом стационарный поток наножидкости совпадает с направлением магнитного поля. Таким образом, такая геометрия задачи соответствует азимутальной МВН [17]. Дисперсионное уравнение для азимутальной МВН в тонких слоях наножидкости получим из уравнения (47), полагая $H_{0z} = 0$:

$$\mathcal{P}(\gamma) \equiv a_0 \gamma^6 + a_1 \gamma^5 + a_2 \gamma^4 + a_3 \gamma^3 + a_4 \gamma^2 + a_5 \gamma + a_6 = 0, \quad (53)$$

где коэффициенты a_j ($j = 0, \dots, 6$) имеют вид

$$a_0 = \text{Pr}^2 \text{Pm}^2 L_e a^2, \quad a_1 = \text{Pr}(1 + L_e) a^4 \text{Pm}^2,$$

$$a_2 = a^6 [\text{Pm}^2 + 2\text{Pm}(1 + \text{Pm}) \text{Pr}(1 + L_e) + \text{Pr}^2 L_e (1 + \text{Pm}^2) + 4\text{Pm} \text{Pr}^2 L_e] + \pi^2 \text{Pm}^2 \text{Pr}^2 \text{Ta}(1 + \text{Ro}) L_e - k^2 \text{R}_n L_e \text{Pr} \text{Pm}^2 - 4\pi^2 Q_\varphi \text{Rb} \text{Pm} \text{Pr}^2 L_e,$$

$$a_3 = a^8[2Pm(1+Pm)+Pr(1+L_e)(1+4Pm+Pm^2)] + \pi^2 a^2 Ta(1+Ro)(2PmPr^2 L_e + Pm^2 Pr(1+L_e)) - k^2 a^2 R_n L_e (Pm^2 + Pm Pr(2+Pm)) - 4\pi^2 a^2 Q_\varphi Rb(Pr^2 L_e(1+Pm) + PmPr(1+L_e)),$$

$$a_4 = a^{10}[2Pr(1+Pm)(1+L_e) + Pr^2 L_e] + \pi^2 a^4 Ta(1+Ro)(Pr^2 L_e + 2PmPr(1+L_e) + Pm^2) - k^2 a^4 R_n L_e (Pm(2+Pm) + Pr(2Pm+1)) - 4\pi^2 a^4 Q_\varphi Rb(Pr^2 L_e + Pr(1+Pm)(1+L_e) + Pm),$$

$$a_5 = a^{12}[2(1+Pm)+Pr(1+L_e)] + \pi^2 a^6 Ta(1+Ro) \times (Pr(1+L_e) + 2Pm) - k^2 a^6 R_n L_e (Pr + 2Pm + 1) - 4\pi^2 a^6 Q_\varphi Rb(Pr(1+L_e) + 1 + Pm),$$

$$a_6 = a^{14} + \pi^2 a^8 Ta(1+Ro) - k^2 a^8 R_n L_e - 4\pi^2 a^8 Q_\varphi Rb.$$

Здесь $Q_\varphi = \mu_e H_{0\varphi}^2 h^4 / 4\pi \rho_0 R_0^2 \nu \eta$ — азимутальное число Чандрасекара. Вещественность коэффициентов a_j в уравнении (53) позволяет нам использовать критерий асимптотической устойчивости Лъенара–Шипара, из которого следует положительность коэффициентов $a_j > 0$ и определителей Гурвица $\Delta_3, \Delta_5 > 0$. Из явного вида коэффициентов a_j следует, что неоднородное вращение с положительными числами Россби ($Ro > 0$) оказывает стабилизирующее действие, а концентрация наночастиц (члены с концентрационным числом Рэля R_n) — дестабилизирующее влияние. Азимутальное магнитное поле $H_{0\varphi}$ оказывает как стабилизирующее, так и дестабилизирующее влияние в зависимости от знака магнитного числа Россби Rb . Условие $a_6 > 0$ дает следующий критерий устойчивости:

$$Ro > -1 - \frac{a^6}{\pi^2 Ta} + \frac{k^2 R_n L_e}{\pi^2 Ta} + \frac{4Q_\varphi Rb}{Ta} = Ro_{cr}, \quad (54)$$

или, в размерных переменных,

$$Ro > -1 - \frac{\omega_\nu^2}{4\alpha^2 \Omega^2} + Rb \frac{\omega_{A\varphi}^2}{\Omega^2} \frac{\omega_\nu}{\omega_\eta} + (1 - \alpha^2) \frac{R_n L_e \omega_\nu^2}{4\alpha^2 \Omega^2 (|\mathbf{k}|h)^4}.$$

Для случая «чистой» электропроводящей жидкости критерий устойчивости (54) при $R_n = 0$ переходит в более простой критерий, полученный в работе [39]. При $\omega_{A\varphi} = 0$ и $R_n = 0$ критерий устойчивости (54) согласуется с результатом работы [40]. Очевидно, что вращающийся поток идеальной наножидкости при $\omega_\nu = \omega_\eta$ и $\omega_\nu \rightarrow 0$, на который действует азимутальное магнитное поле, устойчив от носительно осесимметричных возмущений, если выполняется неравенство

$$Ro > -1 + Rb \frac{\omega_{A\varphi}^2}{\Omega^2}. \quad (55)$$

Течение идеальной «чистой» жидкости было рассмотрено в работе [19], в которой кинетическая и магнитная энергии равны друг другу:

$$\frac{\rho_0 (\Omega R)^2}{2} = \frac{H_{0\varphi}^2}{4\pi}.$$

В [19] было найдено точное стационарное решение идеальной магнитной гидродинамики: $\Omega = H_{0\varphi} / R \sqrt{2\pi \rho_0}$, $P = \text{const}$, называемое чандрасекаровской эквипартицией. Там же было доказано, что это течение предельно устойчиво. Из эквипартиции Чандрасекара следует, что [17]

$$\omega_{A\varphi} = \frac{\mu_e H_{0\varphi}^2}{4\pi \rho_0 R_0^2} = \Omega, \quad Ro = Rb = -1. \quad (56)$$

Случай чандрасекаровской эквипартиции (56) удовлетворяет неравенству (55). Следовательно, критерии устойчивости для идеальных наножидкостей и «чистых» жидкостей совпадают с (55).

Приступим к исследованию вопроса о развитии азимутальной МВН в наножидкости для осесимметричных возмущений при числах Россби $Ro < Ro_{cr}$. Для этой цели численным способом построим области развития неустойчивости для различных значений параметров вращения Ta (числа Тейлора), азимутального магнитного поля Q_φ (азимутальное число Чандрасекара) и магнитного числа Россби Rb . Для параметров $Rb = -1$, $Q_\varphi = 10$, $R_n = 0.122$, $L_e = 5000$ на рис. 4 показаны области развития азимутальной МВН в плоскости (k, Ro) для различных чисел Тейлора $Ta = 100, 300, 2000$. На рис. 4 видно, что наличие концентрации наночастиц способствует увеличению области неустойчивости по сравнению с «чистой» электропроводящей средой. На рис. 5 показаны области развития азимутальной МВН с положительным профилем неоднородного магнитного поля ($Rb = 1/2$) в плоскости (k, Ro) для различных азимутальных чисел Чандрасекара $Q_\varphi = 10, 50, 100$. Остальные параметры, $Ta = 100$, $R_n = 0.122$, $L_e = 5000$, считались фиксированными. Здесь мы также видим (см. рис. 5), что наличие концентрации наночастиц способствует увеличению области неустойчивости по сравнению с «чистой» электропроводящей средой. Кроме того, при увеличении величины азимутального магнитного поля (числа Q_φ) граница области неустойчивости смещается в сторону положительных чисел Россби ($Ro > 0$).

С помощью численного анализа дисперсионного уравнения (53) определим зависимость инкремента ($\text{Re } \gamma > 0$) азимутальной МВН от радиального волнового числа k для ранее приведенных па-

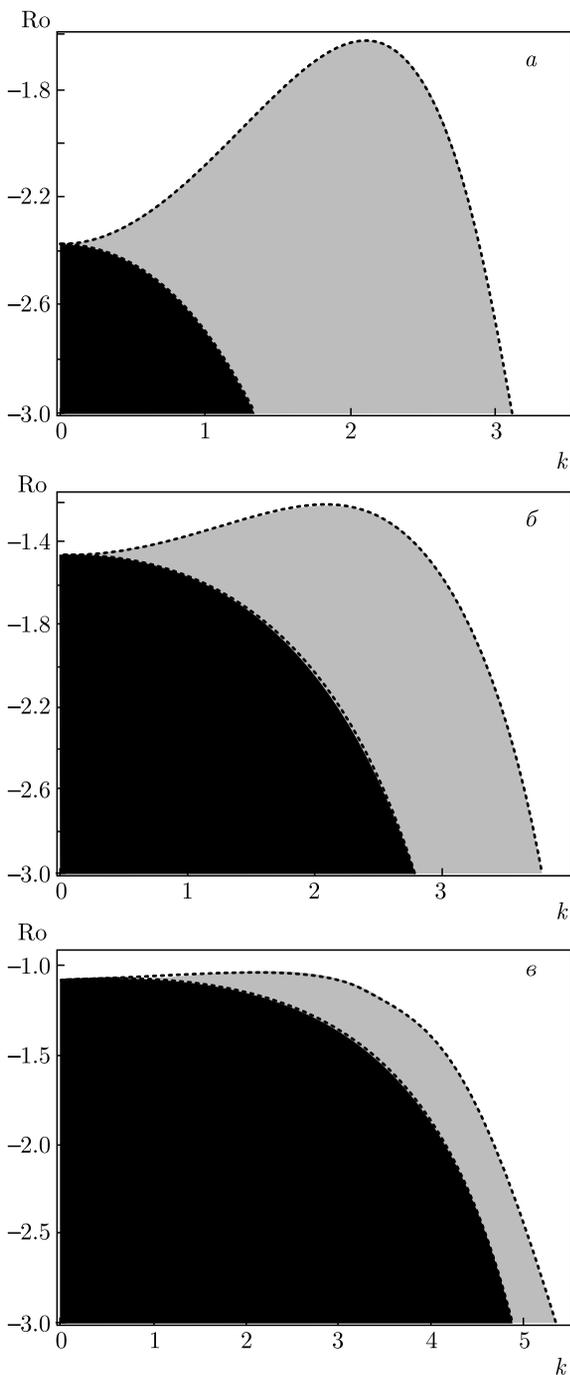


Рис. 4. Черным цветом показаны области, в которых возникает азимутальная МВН в «чистой» жидкости, и серым цветом — в наножидкости. Графики построены для чисел Тейлора $Ta = 100$ (а), 300 (б), 2000 (в) при фиксированных параметрах $Q_\varphi = 10$, $Rb = -1$, $R_n = 0.122$, $L_e = 5000$

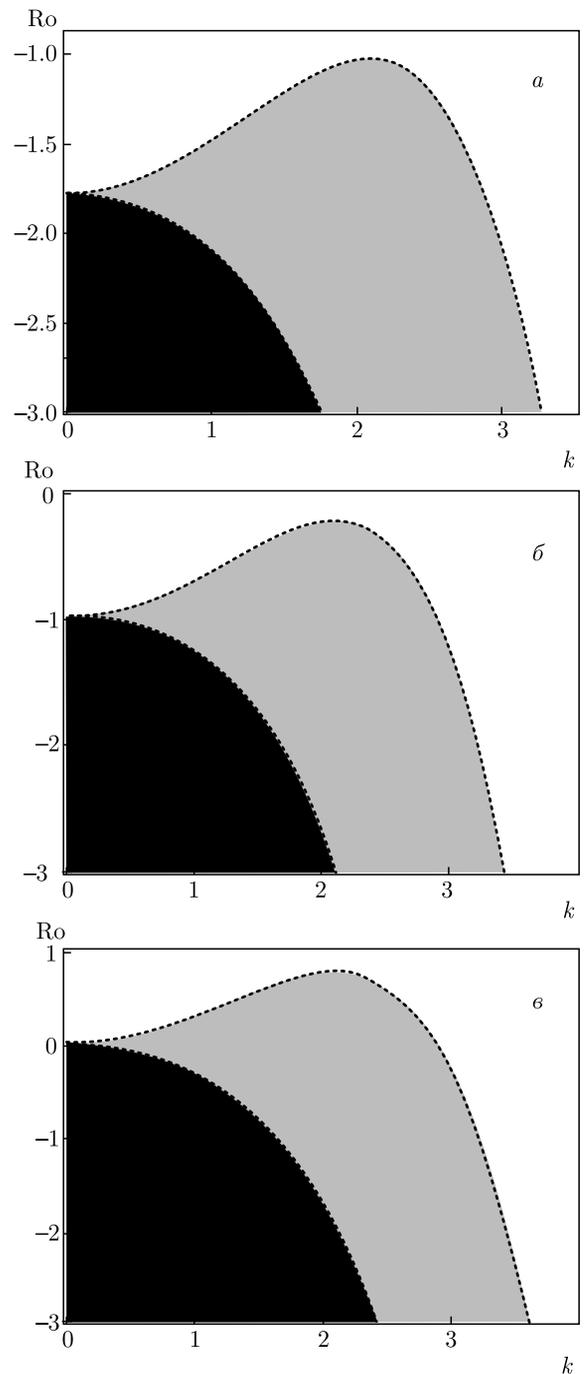


Рис. 5. Черным цветом показаны области, в которых возникает азимутальная МВН в «чистой» жидкости, и серым цветом — в наножидкости. Графики построены для азимутальных чисел Chandrasekara $Q_\varphi = 10$ (а), 50 (б), 100 (в) при фиксированных параметрах $Ta = 100$, $Rb = 1/2$, $R_n = 0.122$, $L_e = 5000$

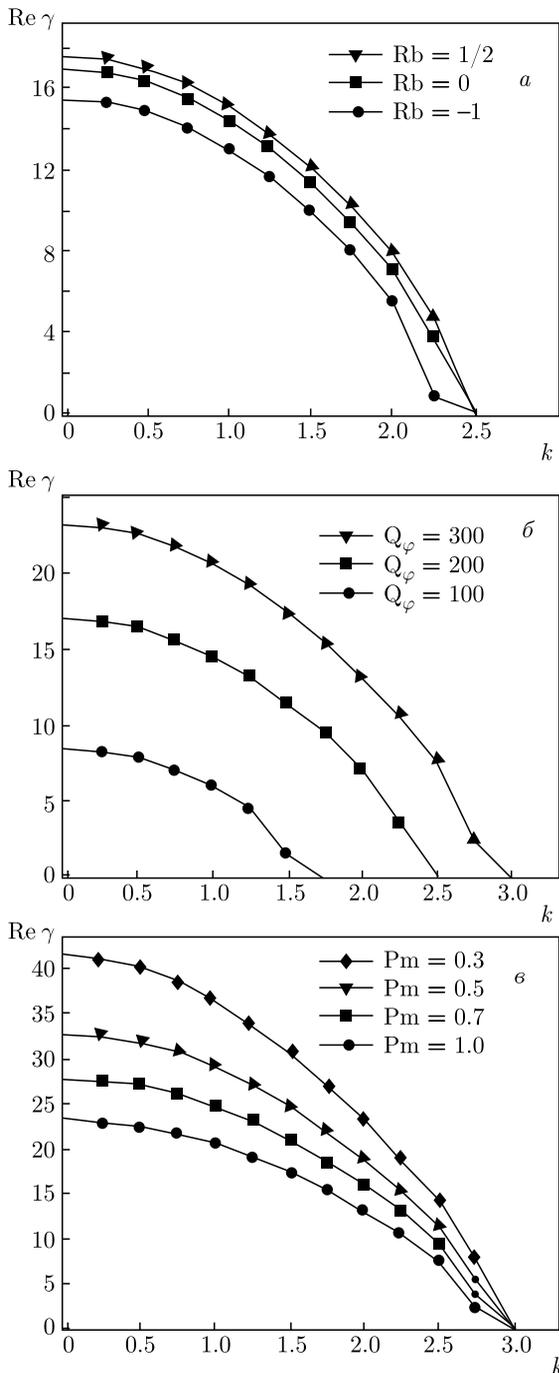


Рис. 6. Зависимости инкремента ($\text{Re } \gamma > 0$) азимутальной МВН в наножидкости от радиального волнового числа k . Показаны эффекты влияния неоднородного азимутального магнитного поля при $Rb = -1, 0, 1/2$ (а), величины азимутального магнитного поля при $Q_\varphi = 100, 200, 300$ (б) и магнитного числа Прандтля при $Pm = 0.3, 0.5, 0.7, 1.0$ (в) на азимутальную МВН

раметров наножидкости. На рис. 6а показано влияние различных профилей неоднородного азимутального магнитного поля (магнитные числа Россби $Rb = -1, 0, 1/2$) на инкремент азимутальной МВН для следующих параметров: $Ta = 2000, Ro = -1.2, Q_\varphi = 10, Pm = 1$. Отсюда мы видим, что темпы роста возмущений здесь выше для положительных магнитных чисел Россби ($Rb > 0$). Далее, исследуем влияние эффекта усиления азимутального магнитного поля (азимутальные числа Чандрасекара $Q_\varphi = 100, 200, 300$) на развитие азимутальной МВН для фиксированных параметров $Ta = 300, Ro = -1, Rb = 1/2, Pm = 1$. Как следует из результатов, показанных на рис. 6б, темпы роста возмущений становятся выше с увеличением напряженности азимутального магнитного поля $H_{0\varphi}$. На рис. 6в приведены численные результаты для инкремента $\text{Re } \gamma(k)$ азимутальной МВН, полученные для различных значений магнитного числа Прандтля $Pm = 0.3, 0.5, 0.7, 1.0$ при фиксированной величине азимутального магнитного поля $Q_\varphi = 300$ и $Ta = 300, Ro = -1, Rb = 1/2$. На рис. 6в видно увеличение темпов роста возмущений для магнитных чисел Прандтля $Pm < 1$.

Таким образом, азимутальная МВН в наножидкости реализуется при увеличении неоднородного азимутального магнитного поля $H_{0\varphi} = CR^\alpha$ ($\alpha > 1$) с положительным профилем $Rb > 0$ для магнитных чисел Прандтля $Pm \leq 1$.

6. ДИСПЕРСИОННОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ СПИРАЛЬНОЙ МВН В ТОНКИХ СЛОЯХ НАНОЖИДКОСТИ

В случае $Ra = N_A = 0$ из уравнения (47) мы получим дисперсионное уравнение для спиральной МВН в тонких слоях наножидкости:

$$\mathcal{P}(\gamma) \equiv a_0\gamma^7 + a_1\gamma^6 + a_2\gamma^5 + a_3\gamma^4 + a_4\gamma^3 + a_5\gamma^2 + a_6\gamma + a_7 = 0, \quad (57)$$

где коэффициенты a_j ($j = 0, \dots, 7$) имеют вид

$$a_0 = A_0, \quad a_1 = A_1, \quad a_2 = A_2 - k^2 R_n L_e \text{Pr} Pm^3,$$

$$a_3 = A_3 - k^2 a^2 R_n L_e (Pm^3 + \text{Pr} Pm^2 (3 + Pm)),$$

$$a_4 = A_4 - C_0 - k^2 R_n L_e (\text{Pr} Pm^2 (a^4 + \pi^2 Q) + a^4 Pm (\text{Pr} + Pm) (3 + Pm)),$$

$$a_5 = A_5 - C_1 - k^2 R_n L_e (\text{Pr} (2a^2 Pm (a^4 + \pi^2 Q) + a^6 (1 + Pm)) + a^2 Pm^2 (a^4 + \pi^2 Q) + a^6 Pm (3 + Pm)),$$

$$a_6 = A_6 - C_2 - k^2 R_n L_e (2a^4 Pm (a^4 + \pi^2 Q) + a^8 (1 + Pm) + a^4 (a^4 + \pi^2 Q) Pr),$$

$$a_7 = A_7 - C_3 - k^2 a^6 R_n L_e (a^4 + \pi^2 Q).$$

Здесь введены следующие обозначения для A_n ($n = 0, \dots, 7$) и C_m ($m = 0, \dots, 3$):

$$A_0 = a^2 Pr^2 Pm^3 L_e,$$

$$A_1 = a^4 Pm^2 Pr [2 Pr L_e (1 + Pm) + Pr L_e + Pm (1 + L_e)],$$

$$A_2 = a^6 [Pm^2 (Pm + Pr (1 + L_e)) + 2 Pm (1 + Pm) \times Pr (Pr L_e + Pm (1 + L_e))] + (a^6 (1 + 4 Pm + Pm^2) + 2 a^2 Pm \pi^2 Q + \pi^2 Pm^2 Ta (1 + Ro) - 4 \pi^2 Q \xi^2 Rb Pm) Pm Pr^2 L_e,$$

$$A_3 = a^8 [Pm^2 + 2 Pm (1 + Pm) (Pm + Pr (1 + L_e))] + a^2 Pr (a^6 (1 + 4 Pm + Pm^2) + 2 a^2 Pm \pi^2 Q + \pi^2 Pm^2 Ta (1 + Ro) - 4 \pi^2 Q \xi^2 Rb Pm) \times (Pr L_e + Pm (1 + L_e)) + (2 a^4 (1 + Pm) (a^4 + \pi^2 Q) + 2 a^2 \pi^2 Ta (1 + Ro) Pm - 4 \pi^2 a^2 Q \xi^2 Rb (1 + Pm)) Pm Pr^2 L_e,$$

$$A_4 = 2 a^{10} Pm (1 + Pm) + a^4 (a^6 (1 + 4 Pm + Pm^2) + 2 a^2 Pm \pi^2 Q + \pi^2 Pm^2 Ta (1 + Ro) - 4 \pi^2 Q \xi^2 Rb Pm) \times (Pm + Pr (1 + L_e)) + a^2 Pr (2 a^4 (1 + Pm) (a^4 + \pi^2 Q) + 2 a^2 \pi^2 Ta (1 + Ro) Pm - 4 \pi^2 a^2 Q \xi^2 Rb (1 + Pm)) \times (Pr L_e + Pm (1 + L_e)) + (a^2 (a^4 + \pi^2 Q)^2 + \pi^2 a^4 Ta (1 + Ro) + \pi^4 Pm Ro Ta Q - 4 \pi^2 Q \xi^2 Rb (a^4 + \pi^2 Q) - 4 \pi^4 Q^2 \xi^2) Pm Pr^2 L_e,$$

$$A_5 = a^6 (a^6 (1 + 4 Pm + Pm^2) + 2 a^2 Pm \pi^2 Q + \pi^2 Pm^2 Ta (1 + Ro) - 4 \pi^2 Q \xi^2 Rb Pm) + a^4 (2 a^4 (1 + Pm) (a^4 + \pi^2 Q) + 2 a^2 \pi^2 Ta (1 + Ro) Pm - 4 \pi^2 a^2 Q \xi^2 Rb (1 + Pm)) (Pm + Pr (1 + L_e)) + a^2 Pr (a^2 (a^4 + \pi^2 Q)^2 + \pi^2 a^4 Ta (1 + Ro) + \pi^4 Pm Ro Ta Q - 4 \pi^2 Q \xi^2 Rb (a^4 + \pi^2 Q) - 4 \pi^4 Q^2 \xi^2) (Pr L_e + Pm (1 + L_e)),$$

$$A_6 = a^6 (2 a^4 (1 + Pm) (a^4 + \pi^2 Q) + 2 a^2 \pi^2 Ta (1 + Ro) Pm - 4 \pi^2 a^2 Q \xi^2 Rb (1 + Pm)) + a^4 (Pm + Pr (1 + L_e)) \times (a^2 (a^4 + \pi^2 Q)^2 + \pi^2 a^4 Ta (1 + Ro) + \pi^4 Pm Ro Ta Q - 4 \pi^2 Q \xi^2 Rb (a^4 + \pi^2 Q) - 4 \pi^4 Q^2 \xi^2),$$

$$A_7 = a^6 (a^2 (a^4 + \pi^2 Q)^2 + \pi^2 a^4 Ta (1 + Ro) + \pi^4 Pm Ro Ta Q - 4 \pi^2 Q \xi^2 Rb (a^4 + \pi^2 Q) - 4 \pi^4 Q^2 \xi^2),$$

$$C_0 = 4 \pi^4 Q \xi \sqrt{Ta} N_B Pr Pm^2,$$

$$C_1 = 2 \pi^4 a^2 Q Pm \xi \sqrt{Ta} \times \left[N_B Pr (4 + Ro (1 - Pm)) + \frac{2 N_B}{L_e} Pm \right],$$

$$C_2 = 2 \pi^4 a^4 Q \xi \sqrt{Ta} \left[N_B Pr (2 + Ro (1 - Pm)) + \frac{N_B}{L_e} Pm (4 + Ro (1 - Pm)) \right],$$

$$C_3 = 2 \pi^4 a^6 Q \xi \sqrt{Ta} \frac{N_B}{L_e} (2 + Ro (1 - Pm)).$$

В предельных случаях, когда $H_{0\varphi} = 0$, дисперсионное уравнение (57) совпадает с дисперсионным уравнением (48) для стандартной МВН, а при $H_{0z} = 0$ — с дисперсионным уравнением (54) для азимутальной МВН. К дисперсионному уравнению (57) с действительными коэффициентами a_j ($j = 0, \dots, 7$) применим классический критерий устойчивости Льенара–Шипара [38]. Из явного вида коэффициентов следует, что дестабилизация осесимметричных возмущений может быть вызвана неоднородным вращением с отрицательным профилем ($Ro < 0$), спиральным магнитным полем с положительным профилем неоднородного азимутального магнитного поля ($Rb > 0$), концентрацией наночастиц ($R_n \neq 0$), а также совместным эффектом спирального магнитного поля и прироста наночастиц ($N_B \neq 0$), если магнитное число Прандтля $Pm \neq 1$. Поскольку переход к неустойчивости происходит через точку $\gamma = 0$, получаем необходимое и достаточное условие устойчивости вращающейся наножидкости по отношению к осесимметричным возмущениям:

$$Ro > \frac{-a^2 (a^4 + \pi^2 Q)^2 - \pi^2 a^4 Ta + k^2 (a^4 + \pi^2 Q) R_n L_e + \pi^2 Ta (a^4 + \pi^2 Q Pm) - 2 \pi^4 Q \xi \sqrt{Ta} \frac{N_B}{L_e} (1 - Pm)}{4 Q \xi^2 (Rb (a^4 + \pi^2 Q) + \pi^2 Q) + 4 \pi^2 Q \xi \sqrt{Ta} \frac{N_B}{L_e}} = \frac{Ta (a^4 + \pi^2 Q Pm) - 2 \pi^2 Q \xi \sqrt{Ta} \frac{N_B}{L_e} (1 - Pm)}{Ta (a^4 + \pi^2 Q Pm) - 2 \pi^2 Q \xi \sqrt{Ta} \frac{N_B}{L_e} (1 - Pm)} = Ro_{cr}, \quad (58)$$

или, в размерных переменных,

$$\begin{aligned}
 \text{Ro} > \frac{-(\omega_A^2 + \omega_\nu \omega_\eta)^2 - 4\alpha^2 \Omega^2 \omega_\eta^2 + (1 - \alpha^2)(\omega_A^2 + \omega_\nu \omega_\eta) R_n L_e \frac{\omega_\nu \omega_\eta}{(|\mathbf{k}|h)^4}}{4\alpha^2 \Omega^2 (\omega_A^2 + \omega_\eta^2) - 4\alpha^3 \Omega \omega_A \omega_{A\varphi} \frac{\omega_\eta}{(|\mathbf{k}|h)} \frac{N_B}{L_e} (1 - \text{Pm})} + \\
 + \frac{\omega_{A\varphi}^2 (\text{Rb}(\omega_A^2 + \omega_\nu \omega_\eta) + \omega_A^2) + 2\alpha \Omega \omega_A \omega_{A\varphi} \frac{\omega_\eta}{(|\mathbf{k}|h)} \frac{N_B}{L_e}}{\Omega^2 (\omega_A^2 + \omega_\eta^2) - \alpha \Omega \omega_A \omega_{A\varphi} \frac{\omega_\eta}{(|\mathbf{k}|h)} \frac{N_B}{L_e} (1 - \text{Pm})} = \text{Ro}_{cr}.
 \end{aligned}$$

Условие устойчивости (58) включает в себя полученные в предыдущих разделах критерии устойчивости для стандартной МВН при $H_{0\varphi} = 0$ и азимутальной МВН при $H_{0z} = 0$. Если $\text{Ro} = 0$ и $\text{Ta} = 0$, то необходимое и достаточное условие устойчивости наножидкости по отношению к осесимметричным возмущениям дает ограничение на профиль неоднородно азимутального магнитного поля:

$$\begin{aligned}
 \text{Rb} > \text{Rb}_{cr}, \\
 \text{Rb}_{cr} = \\
 = \frac{a^2(a^4 + \pi^2 Q)^2 - 4\pi^4 Q^2 \xi^2 - k^2 R_n L_e (a^4 + \pi^2 Q)}{4\pi^2 Q \xi^2 (a^4 + \pi^2 Q)}, \tag{59}
 \end{aligned}$$

или, в размерных переменных,

$$\begin{aligned}
 \text{Rb} > \frac{(\omega_A^2 + \omega_\nu \omega_\eta)^2 - 4\alpha^2 \omega_A^2 \omega_{A\varphi}^2}{4\alpha^2 \omega_{A\varphi}^2 (\omega_A^2 + \omega_\nu \omega_\eta)} - \\
 - \frac{(1 - \alpha^2) \frac{\omega_\nu \omega_\eta}{(|\mathbf{k}|h)^4} R_n L_e (\omega_A^2 + \omega_\nu \omega_\eta)}{4\alpha^2 \omega_{A\varphi}^2 (\omega_A^2 + \omega_\nu \omega_\eta)} = \text{Rb}_{cr}.
 \end{aligned}$$

Выражение (59) переходит в предельном случае «чистой» жидкости при $R_n = 0$ в известное выражение для критического магнитного числа Россби Rb_{cr} , которое было получено в работе [41].

Определим область развития спиральной МВН в тонком слое наножидкости, которая возникает для чисел Россби $\text{Ro} < \text{Ro}_{cr}$. С помощью численного анализа из выражения (58) для критического числа Россби определим области развития спиральной МВН в «чистой» жидкости и наножидкости. На рис. 7 серым цветом выделены области неустойчивости наножидкости для чисел Россби $\text{Ro} < \text{Ro}_{cr}$ при изменении параметра вращения $\text{Ta} = 100, 300, 2000$ (числа Тейлора) в плоскости (k, Ro) . Остальные параметры наножидкости считались фиксированными: $Q = 10, Q_\varphi = 100, \text{Pm} = 0.7, \text{Rb} = 1/2, R_n = 0.122, L_e = 5000, N_B = 7.5 \cdot 10^{-4}$. На рис. 7 видно, что наличие концентрации наночастиц способствует увеличению области неустойчивости по сравнению с «чистой» электропроводящей средой, для которой области неустойчивости показаны черным цветом на рис. 7. На рис. 8 показаны области раз-

вития спиральной МВН с положительным профилем неоднородного магнитного поля ($\text{Rb} = 1/2$) в плоскости (k, Ro) для различных азимутальных чисел Чандрасекара $Q_\varphi = 30, 50, 80$ при фиксированных параметрах $Q = 10, \text{Ta} = 100, \text{Pm} = 0.7, \text{Rb} = 1/2, R_n = 0.122, L_e = 5000, N_B = 7.5 \cdot 10^{-4}$. Здесь мы также видим (см. рис. 8), что наличие концентрации наночастиц способствует увеличению области неустойчивости по сравнению с «чистой» электропроводящей средой. Кроме того, при увеличении величины азимутального магнитного поля (числа Q_φ), как и в случае азимутальной МВН, граница области неустойчивости смещается в сторону положительных чисел Россби ($\text{Ro} > 0$).

Приступим к численному анализу дисперсионного уравнения (57). На рис. 9 показана зависимость инкремента спиральной МВН от радиальных волновых чисел k для различных вариаций физических параметров наножидкости. На рис. 9а видно, что темп роста возмущений повышается с увеличением эффекта вращения — числа Тейлора $\text{Ta} = 100, 300, 2000$. Остальные параметры наножидкости считались фиксированными: $Q = 10, Q_\varphi = 100, \text{Pm} = 0.7, \text{Pr} = 5, \text{Rb} = 1/2, \text{Ro} = -1, R_n = 0.122, L_e = 5000, N_B = 7.5 \cdot 10^{-4}$. Для этих же параметров на рис. 9б показаны графики инкремента спиральной МВН для вращающейся наножидкости с числом Тейлора $\text{Ta} = 100$ и различными числами Россби $\text{Ro} = 0, -3/4, -1$. Отсюда следует, что темпы роста осесимметричных возмущений выше для отрицательных чисел Россби ($\text{Ro} < 0$), чем в случае однородного вращения ($\text{Ro} = 0$):

$$\gamma(k)|_{\text{Ro}=-1} > \gamma(k)|_{\text{Ro}=-3/4} > \gamma(k)|_{\text{Ro}=0}.$$

На рис. 9в показаны темпы роста спиральной МВН при различных значениях аксиального магнитного поля $Q = 10, 50, 150$ для рэлеевского профиля вращения ($\text{Ro} = -1$) и числа Тейлора $\text{Ta} = 2000$. Отсюда мы видим, что увеличение напряженности аксиального магнитного поля H_{0z} может приводить как к увеличению инкремента неустойчивости ($Q = 10 \rightarrow Q = 50$), так и к уменьшению инкремента при $Q = 50 \rightarrow Q = 150$.

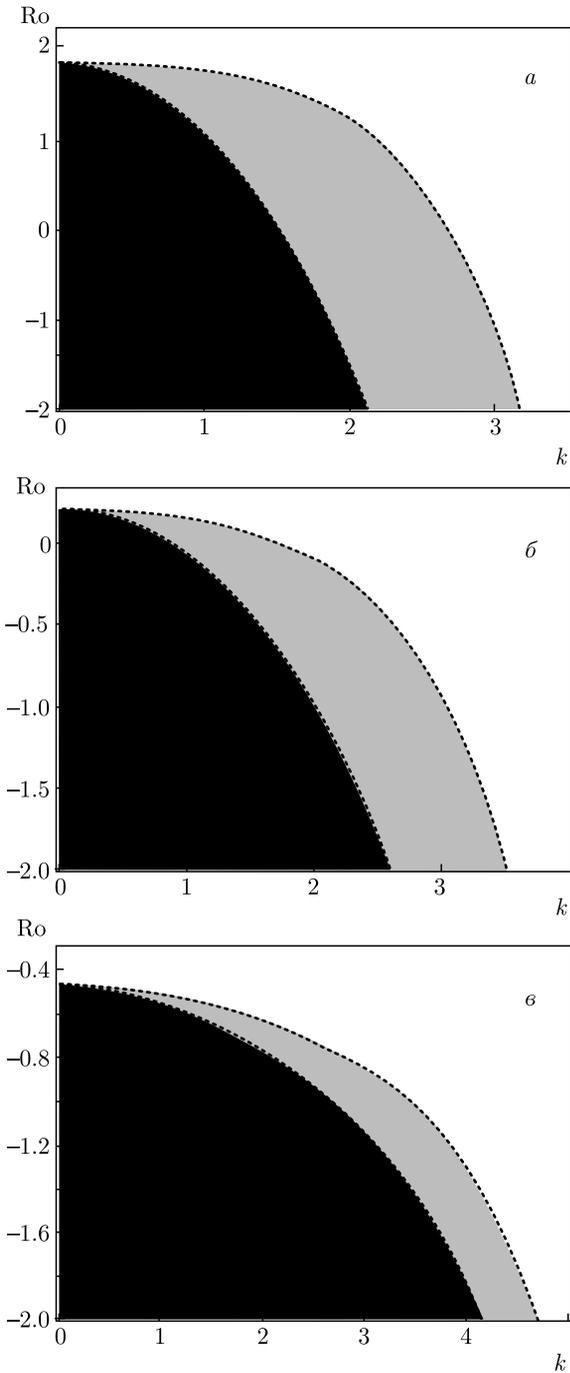


Рис. 7. Черным цветом показаны области, в которых возникает спиральная МВН в «чистой» жидкости, и серым цветом — в наножидкости. Графики построены для чисел Тейлора $Ta = 100$ (а), 300 (б), 2000 (в) при фиксированных параметрах $Q = 10$, $Q_\varphi = 100$, $Pm = 0.7$, $Rb = 1/2$, $R_n = 0.122$, $L_e = 5000$, $N_B = 7.5 \cdot 10^{-4}$

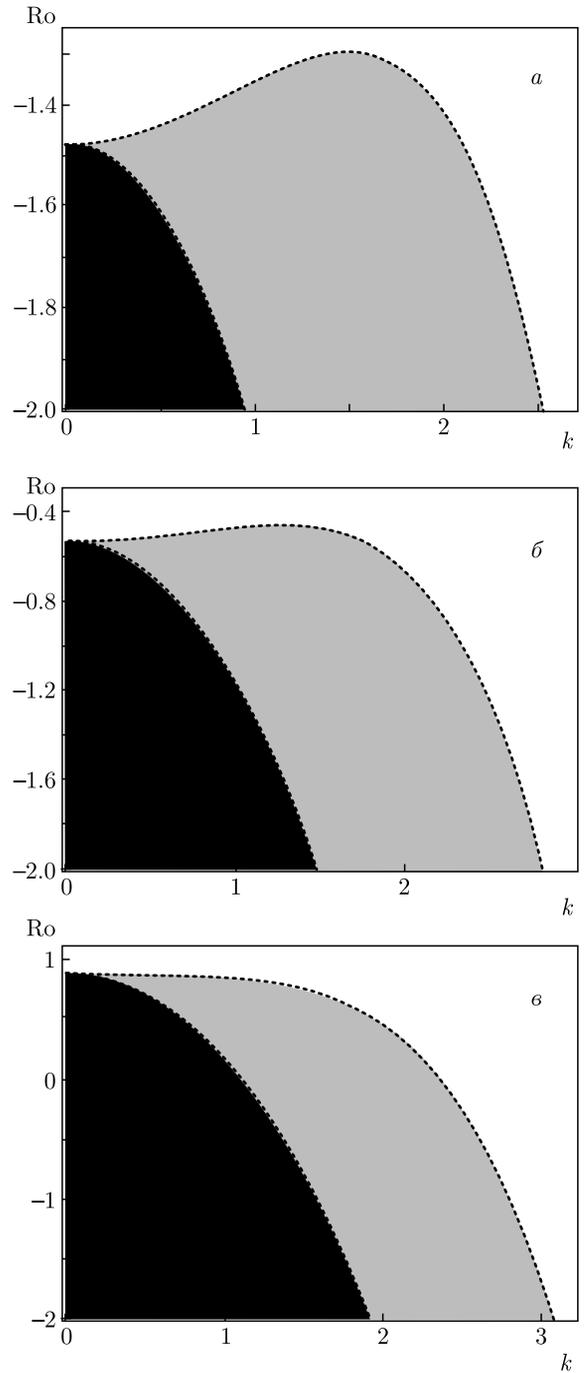


Рис. 8. Черным цветом показаны области, в которых возникает спиральная МВН в «чистой» жидкости, и серым цветом — в наножидкости. Графики построены для азимутального числа Chandrasekhara $Q_\varphi = 30$ (а), 50 (б), 80 (в) при фиксированных параметрах $Q = 10$, $Ta = 100$, $Pm = 0.7$, $Rb = 1/2$, $R_n = 0.122$, $L_e = 5000$, $N_B = 7.5 \cdot 10^{-4}$

Аналогичная ситуация наблюдалась и для стандартной МВН. Эффект влияния азимутального магнитного поля $Q_\varphi = 100, 200, 300$ на спиральную

МВН для параметров $Ta = 2000$ и $Ro = -1$ показан на рис. 10а. Здесь, как и для случая азимутальной МВН, темпы роста возмущений становятся выше с увеличением напряженности азимутального

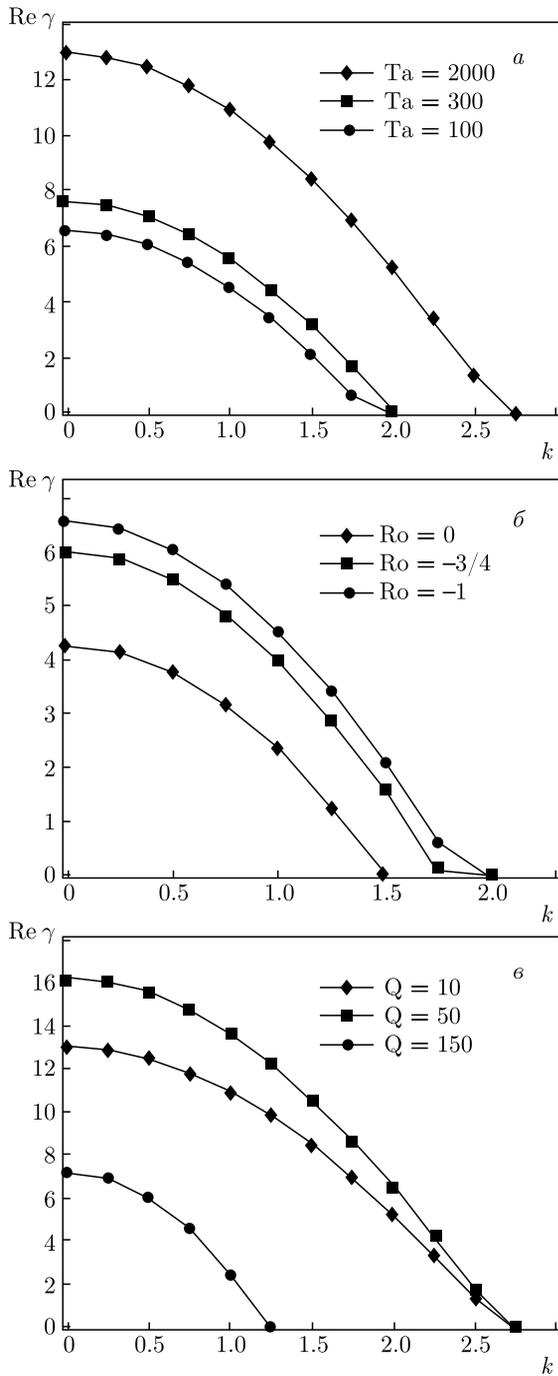


Рис. 9. Зависимости инкремента ($\text{Re } \gamma > 0$) спиральной МВН в наножидкости от радиального волнового числа k . Показано влияние эффекта вращения $Ta = 100, 300, 2000$ (а), числа Россби $Ro = 0, -3/4, -1$ (б) и аксиального магнитного поля $Q = 10, 50, 150$ (в)

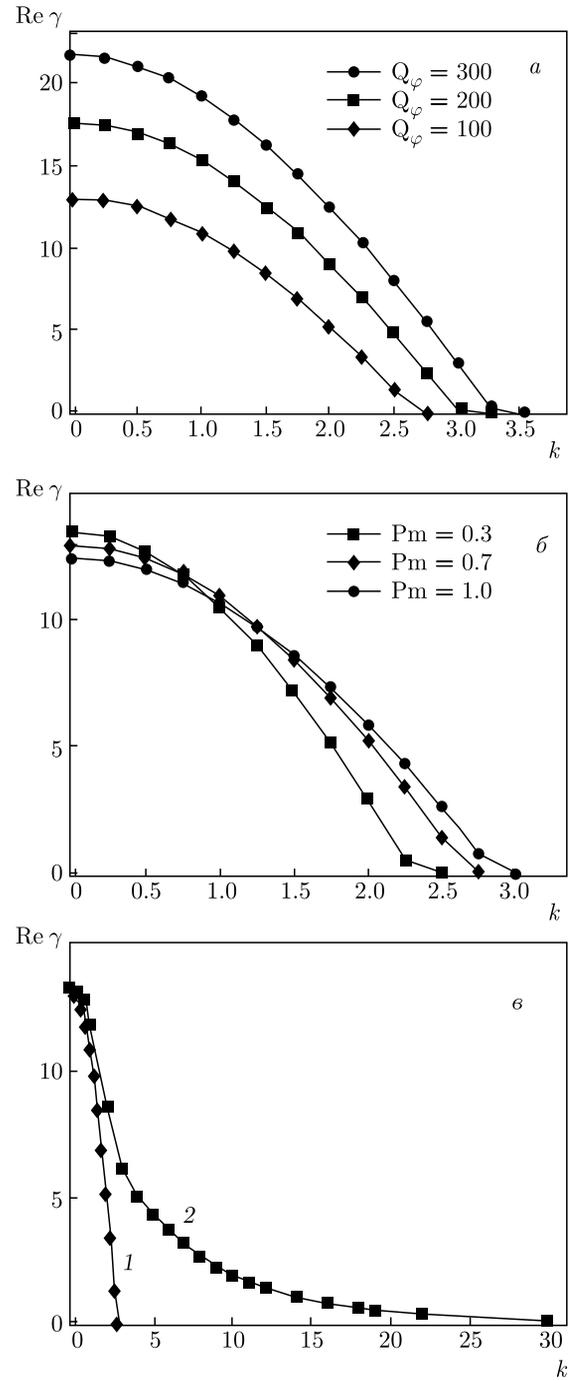


Рис. 10. Зависимости инкремента ($\text{Re } \gamma > 0$) спиральной МВН в наножидкости от радиального волнового числа k . Показано влияние азимутального магнитного поля $Q_\varphi = 100, 200, 300$ (а), магнитного числа Прандтля $Pm = 0.3, 0.7, 1.0$ (б) и концентрации наночастиц на спиральную МВН (в)

магнитного поля $H_{0\varphi}$. На рис. 10б показаны графики инкремента спиральной МВН для значений магнитного числа Прандтля $Pm = 0.3, 0.7, 1.0$. Из этих результатов следует, что увеличение темпов роста $Re \gamma(k)$ для магнитных чисел Прандтля $Pm < 1$ происходит при смещении в длинноволновую (малые k) область спектра возмущений. Результаты влияния на спиральную МВН эффекта концентрации наночастиц приведены на рис. 10в. Кривая 1 построена для следующих параметров наножидкости: $Q = 10$, $Q_\varphi = 100$, $Ta = 2000$, $Pm = 0.7$, $Pr = 5$, $Rb = 1/2$, $Ro = -1$, $R_n = 0.122$, $L_e = 5000$, $N_B = 7.5 \cdot 10^{-4}$. При увеличении концентрации наночастиц, т. е. при увеличении объемной доли наночастиц на верхней границе слоя, ϕ_u , мы принимаем, что изменяются параметры для следующих величин: концентрационного числа Рэлея $R_n = 1200$, рождения наночастиц $N_B = 750$ и числа Льюиса $L_e = 1000$, а остальные безразмерные числа ($Q, Q_\varphi, Ta, Pm, Pr, Rb, Ro$) остаются без изменений. Кривая 2 на рис. 10в соответствует результатам повышенной концентрации наночастиц. Здесь видно, что при повышенной концентрации наночастиц инкремент спиральной МВН выше, $\gamma_2(0) = 13.28 > \gamma_1(0) = 12.9$, и неустойчивость уже начинает развиваться в коротковолновой (большие k) части спектра возмущений.

В результате повышения концентрации наночастиц увеличиваются темпы роста спиральной МВН из-за совместного эффекта прироста наночастиц, $N_B \gg 1$, и спирального магнитного поля для магнитных чисел Прандтля $Pm < 1$.

7. СТАЦИОНАРНЫЕ РЕЖИМЫ МАГНИТНОЙ КОНВЕКЦИИ

Приступим к исследованию случая, когда есть разности температур и концентраций наночастиц на границах слоя наножидкости ($Ra \neq 0$, $N_A \neq 0$), который неоднородно вращается ($Ro \neq 0$) в спиральном магнитном поле ($\xi \neq 0$). Будем рассматривать конвективное течение в плоском неоднородно вращающемся слое в виде валов (ячеек). Скорость γ роста возмущений в общем случае является комплексной, $\gamma = \gamma_r + i\omega_i$. Очевидно, что система устойчива, если $\gamma_r < 0$, и неустойчива, если $\gamma_r > 0$. Перейдем к определению границы устойчивости для монотонных ($\omega_i = 0$) и колебательных ($\omega_i \neq 0$) возмущений. На границе устойчивости (нейтральные состояния) $\gamma_r = 0$, поэтому, сделав в уравнении (47) замену $\gamma = i\omega_i$, находим

$$Ra = Ra_r + i\omega_i Ra_i, \quad (60)$$

где Ra_r и Ra_i — действительная и мнимая части дисперсионного уравнения для Ra . Так как величина Ra является действительной, мнимая часть в (60) должна обращаться в нуль. При этом возможна ситуация $\omega_i = 0$ или $Ra_i = 0$. Рассмотрим случай $\omega_i = 0$. В результате получаем критическое значение числа Рэлея Ra_c для монотонных или стационарных возмущений: $Ra_c = Ra_{st}$.

7.1. Стационарный режим конвекции в аксиальном магнитном поле

Из дисперсионного уравнения (60) найдем критическое значение числа Рэлея Ra_{st} для стационарной ($\gamma = 0$) конвекции в аксиальном магнитном поле:

$$Ra_{st} = \frac{a^6}{k^2} + \frac{\pi^2 a^2 Q}{k^2} + \frac{\pi^2 a^4 Ta}{k^2(a^4 + \pi^2 Q)} + \frac{\pi^2 Ta Ro(a^4 + \pi^2 Q Pm)}{k^2(a^4 + \pi^2 Q)} - R_n(L_e + N_A). \quad (61)$$

Минимальное значение критического числа Рэлея находится из условия $\partial Ra_{st} / \partial k = 0$ и соответствует волновым числам $k = k_c$, удовлетворяющим уравнению

$$\begin{aligned} & \frac{2k_c^2 - \pi^2}{k_c} - \frac{\pi^4 Q}{k_c(\pi^2 + k_c^2)^2} + \\ & + \frac{2\pi^2 k_c Ta(1 + Ro)}{(\pi^2 + k_c^2)((\pi^2 + k_c^2)^2 + \pi^2 Q)} - \\ & - \frac{\pi^2 Ta((\pi^2 + k_c^2)^2 + \pi^2 Q + 2k_c^2(\pi^2 + k_c^2))}{k_c((\pi^2 + k_c^2)^2 + \pi^2 Q)^2} - \\ & - \frac{\pi^2 Ta Ro((\pi^2 + k_c^2)^2 + \pi^2 Q Pm)}{k_c(\pi^2 + k_c^2)^2((\pi^2 + k_c^2)^2 + \pi^2 Q)^2} \times \\ & \times ((\pi^2 + k_c^2)^2 + \pi^2 Q + 2k_c^2(\pi^2 + k_c^2)) = 0. \quad (62) \end{aligned}$$

Из уравнения (62) видно, что критическое волновое число не зависит от параметров наножидкостей и совпадает с результатом работы [12]. На рис. 11а минимальному значению критического числа Рэлея Ra_{st}^{min} соответствует точка на нейтральной кривой, разделяющей области устойчивых и неустойчивых возмущений. Здесь видно, что для положительного профиля числа Россби ($Ro \geq 0$) минимальное значение критического числа Рэлея Ra_{st}^{min} больше, чем для отрицательных профилей вращения, например рэлеевского ($Ro = -1$). Следовательно, для отрицательных профилей вращения мы получаем более низкий порог развития неустойчивости по сравнению со случаем однородного ($Ro = 0$) и неоднородного ($Ro = 2$) вращения. На рис. 11б показано, что

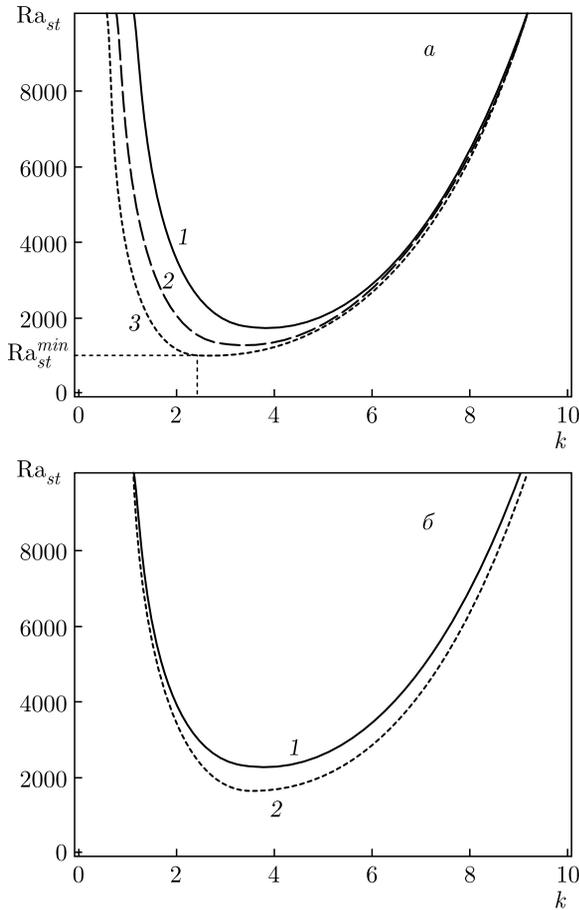


Рис. 11. Зависимости стационарного числа Рэлея Ra_{st} от волновых чисел k для неоднородно вращающейся наножидкости в аксиальном магнитном поле: *a* — для чисел Россби $Ro = 2$ (кривая 1), 0 (кривая 2), -1 (кривая 3); *б* — кривая 1 соответствует «чистой» электропроводящей жидкости, кривая 2 — электропроводящей наножидкости для числа Россби $Ro = 2$

концентрация наночастиц способствует понижению порога стационарной конвекции. Здесь кривые 1, 2 построены для числа Россби $Ro = 2$, но сделанные выводы остаются в силе при любых числах Ro .

В некоторых предельных случаях выражение (61) содержит уже известные результаты. При отсутствии наночастиц ($R_n = 0$) из (61) получаем критическое число Рэлея для стационарной неоднородно вращающейся ($Ro \neq 0$) конвекции в постоянном аксиальном магнитном поле [12]. Если в (61) положить $Ro = 0$, то мы получим результат работы [11]. Для случая $Ro = 0$ и $R_n = 0$ мы получаем классический результат Чандрасекара [8]. При отсутствии вращения и магнитного поля ($Ta = Q = 0$) выражение (61) дает результат работы [42].

Для исследования эффектов вращения, числа Россби, магнитного поля, числа Льюиса, модифицированного коэффициента диффузии и концентрации наночастиц вычислим производные

$$\frac{dR_1}{dT_1}, \frac{dR_1}{dRo}, \frac{dR_1}{dQ_1}, \frac{dR_1}{dL_e}, \frac{dR_1}{dN_A}, \frac{dR_1}{dR_n}$$

в переменных Чандрасекара

$$R_1 = \frac{Ra_{st}}{\pi^4}, \quad T_1 = \frac{Ta}{\pi^4}, \quad Q_1 = \frac{Q}{\pi^2}, \quad x = \frac{k^2}{\pi^2}.$$

Для этих переменных выражение (61) примет вид

$$R_1 = \frac{(1+x)((1+x)^2+Q_1)^2+(1+x)^2(1+Ro)T_1}{x((1+x)^2+Q_1)} + \frac{RoPmQ_1T_1}{x((1+x)^2+Q_1)} - R_n(L_e + N_A). \quad (63)$$

Из выражения (63) находим производные

$$\frac{dR_1}{dT_1} = \frac{(1+x)^2}{x((1+x)^2+Q_1)} + \frac{Ro((1+x)^2+Q_1)Pm}{x((1+x)^2+Q_1)}, \quad (64)$$

$$\frac{dR_1}{dRo} = \frac{T_1((1+x)^2+Q_1)Pm}{x((1+x)^2+Q_1)}, \quad (65)$$

$$\frac{dR_1}{dQ_1} = \frac{1+x}{x} - \frac{(1+x)^2T_1(1+Ro(1-Pm))}{x((1+x)^2+Q_1)^2}, \quad (66)$$

$$\frac{dR_1}{dL_e} = \frac{dR_1}{dN_A} = -R_n, \quad (67)$$

$$\frac{dR_1}{dR_n} = -(L_e + N_A). \quad (68)$$

Из формулы (64) видно, что в случае однородного вращения ($Ro = 0$) сила Кориолиса всегда оказывает стабилизирующее действие на конвекцию [8, 9]. Однако при неоднородном вращении (даже в отсутствие внешнего магнитного поля, $Q_1 = 0$ (см. формулу (64)) сила Кориолиса может оказывать дестабилизирующее действие на конвекцию в зависимости от профиля угловой скорости вращения. Для рэлеевского профиля вращения ($Ro = -1$) угловая скорость уменьшается с расстоянием, $\Omega = \text{const} \cdot R^{-2}$. Наоборот, при положительных $Ro > 0$, например при $Ro = 1$, угловая скорость вращения увеличивается с расстоянием, $\Omega = \text{const} \cdot R^2$. Таким образом, вращение при $Ro > 0$ стабилизирует конвекцию, а при $Ro < 0$ дестабилизирует. Известно, что для конечной электропроводности среды

имеет место частичная «вмороженность» магнитного поля и неоднородное вращение приводит к искажению силовых линий магнитного поля [37]. В случае $Ro > 0$ линии магнитного поля смещаются от оси вращения, т. е. в сторону увеличения Ω , и наоборот, при $Ro < 0$ происходит смещение к оси вращения. Эффекту влияния неоднородного (дифференциального) вращения на магнитное поле и, как следствие, на конвекцию, соответствуют члены, пропорциональные $RoPm$ в выражениях (64), (66).

Аналогичные выводы следуют из соотношения (65): при увеличении параметра вращения T_1 на стационарную конвекцию оказывает влияние профиль неоднородного вращения, от которого зависит знак числа Россби. Так, при числах Россби $Ro > 0$ мы также получаем стабилизирующий эффект, поскольку производная dR_1/dRo всегда положительна, а при отрицательных числах Россби $Ro < 0$ — дестабилизирующий эффект, так как производная dR_1/dRo отрицательная.

Из формулы (66) видно, что величина dR_1/dQ_1 может быть положительной или отрицательной, т. е. аксиальное магнитное поле (число Chandrasekara Q_1) оказывает стабилизирующее или дестабилизирующее действие на стационарную конвекцию. Поскольку магнитное поле тормозит движение проводящей жидкости (наножидкости), оно вполне может оказывать стабилизирующее действие. В свою очередь, взаимодействие между полем и токами, индуцируемыми в движущейся среде, оказывает влияние на конвективное движение, т. е. на устойчивость равновесия среды, подогреваемой снизу. Опять же из-за частичной «вмороженности» магнитного поля неоднородное вращение приводит к искажению силовых линий магнитного поля, что создает дестабилизирующий эффект, когда для профиля неоднородного вращения (числа Россби Ro) выполняется условие

$$Ro(Pm - 1) < 1.$$

Это неравенство справедливо для положительных чисел Россби $Ro \geq 0$ и магнитных числах Прандтля $Pm < 1$ либо $Ro < 0$ и $Pm > 1$, а также при $Pm = 1$ для любых чисел Россби Ro .

Формула (67) показывает, что число Льюиса L_e и модифицированный коэффициент диффузии N_A имеют дестабилизирующий эффект, когда число Рэлея наночастиц положительно, $R_n > 0$. Поскольку для большинства наножидкостей сумма числа Льюиса и модифицированного коэффициента диффузии всегда положительна, $L_e + N_A > 0$ [11], то из (68)

следует, что концентрационное число Рэлея всегда имеет дестабилизирующий эффект. Формулы (67) и (68) совпадают с результатами работы [11], где исследовалась конвективная неустойчивость однородно вращающегося слоя наножидкости в постоянном вертикальном магнитном поле.

Таким образом, влияние эффектов вращения, числа Россби, магнитного поля на стационарную конвекцию в аксиальном магнитном поле происходит независимо от концентрации наночастиц.

7.2. Стационарный режим конвекции в спиральном магнитном поле

Подобным образом из дисперсионного уравнения (60) найдем критическое значение числа Рэлея Ra_{st} для стационарной конвекции в спиральном магнитном поле:

$$\begin{aligned} Ra_{st} = & \left[Ra_{st}^{(0)} - R_n(L_e + N_A) + \right. \\ & \left. + \frac{2\pi^4 Q \xi \sqrt{Ta}(2 + Ro(1 - Pm))N_B(N_A - 1)}{k^2(a^4 + \pi^2 Q)L_e} \right] \times \\ & \times \left[1 - \frac{2\pi^4 Q \xi \sqrt{Ta}(2 + Ro(1 - Pm))(N_A - N_B)}{a^2(a^4 + \pi^2 Q)^2 L_e} \right]^{-1} = \\ & = D_1(k)D_2^{-1}(k), \quad (69) \end{aligned}$$

где $Ra_{st}^{(0)}$ — критическое число Рэлея для стационарной конвекции «чистой» жидкости в спиральном магнитном поле, совпадающее с результатом [15]

$$\begin{aligned} Ra_{st}^{(0)} = & \frac{a^6}{k^2} + \frac{\pi^2 a^2 Q}{k^2} + \\ & + \frac{\pi^2 a^4 Ta}{k^2(a^4 + \pi^2 Q)} + \frac{\pi^2 Ta Ro(a^4 + \pi^2 Q Pm) - 4\pi^4 \xi^2 Q^2}{k^2(a^4 + \pi^2 Q)} - \\ & - \frac{4\pi^2}{k^2} \xi^2 QR_b. \end{aligned}$$

Минимальное значение критического числа Рэлея находится из условия $\partial Ra_{st}/\partial k = 0$ и соответствует волновым числам $k = k_c$, удовлетворяющим следующему уравнению:

$$\left[\left(\frac{\partial \text{Ra}_{st}^{(0)}}{\partial k} \right)_{k=k_c} - 4\pi^4 Q \xi \sqrt{\text{Ta}} (2 + \text{Ro}(1 - \text{Pm})) \times \right. \\ \left. \times N_B (N_A - 1) \frac{(\pi^2 + k_c^2)^2 + \pi^2 Q + 2k_c^2 (\pi^2 + k_c^2)}{k_c^3 ((\pi^2 + k_c^2)^2 + \pi^2 Q)^2 L_e} \right] \times \\ \times D_2^{-1}(k_c) - D_2^{-2}(k_c) \cdot 4k_c \pi^4 Q \xi \sqrt{\text{Ta}} (2 + \text{Ro}(1 - \text{Pm})) \times \\ \times (N_A - N_B) \frac{(\pi^2 + k_c^2)^2 + \pi^2 Q + 2(\pi^2 + k_c^2)}{(\pi^2 + k_c^2)((\pi^2 + k_c^2)^2 + \pi^2 Q)^3 L_e} \times \\ \times D_1(k_c) = 0, \quad (70)$$

где

$$\left(\frac{\partial \text{Ra}_{st}^{(0)}}{\partial k} \right)_{k=k_c} = \frac{2k_c^2 - \pi^2}{k_c} - \frac{\pi^4 Q}{k_c (\pi^2 + k_c^2)^2} + \\ + \frac{2\pi^2 k_c \text{Ta} (1 + \text{Ro})}{(\pi^2 + k_c^2) ((\pi^2 + k_c^2)^2 + \pi^2 Q)} - \\ - \frac{\pi^2 \text{Ta} ((\pi^2 + k_c^2)^2 + \pi^2 Q + 2k_c^2 (\pi^2 + k_c^2))}{k_c ((\pi^2 + k_c^2)^2 + \pi^2 Q)^2} - \\ - \frac{\pi^2 \text{Ta} \text{Ro} ((\pi^2 + k_c^2)^2 + \pi^2 Q \text{Pm})}{k_c (\pi^2 + k_c^2)^2 ((\pi^2 + k_c^2)^2 + \pi^2 Q)^2} \times \\ \times ((\pi^2 + k_c^2)^2 + \pi^2 Q + 2k_c^2 (\pi^2 + k_c^2)) + \\ + 4\pi^4 \xi^2 Q^2 \frac{2((\pi^2 + k_c^2)^2 + \pi^2 Q) + 4k_c^4 (\pi^2 + k_c^2)}{k_c^3 ((\pi^2 + k_c^2)^2 + \pi^2 Q)^2} + \\ + 4\pi^2 \xi^2 Q \text{Rb} \frac{2}{k_c^3}.$$

Если азимутальное магнитное поле отсутствует ($\xi = 0$), то выражение (70) совпадает с (62) и результатом работы [15]. Следовательно, критическое волновое число k_c зависит от параметров наножидкости только в спиральном магнитном поле. На рис. 12 показаны зависимости стационарного числа Рэлея Ra_{st} от волновых чисел k для различных профилей неоднородного вращения (Ro) и магнитного поля (Rb). Численные результаты, представленные на рис. 12, получены при следующих фиксированных параметрах: $\text{Ta} = 300$, $Q = 50$, $\text{Pm} = 0.7$, $\text{Rn} = 0.122$, $L_e = 5000$, $N_A = 5$, $N_B = 7.5 \cdot 10^{-4}$. Минимальному числу $\text{Ra}_{st}^{\text{min}}$ на рис. 12 соответствует точка на нейтральной кривой, разделяющей области устойчивых и неустойчивых возмущений. На рис. 12а показан случай однородного ($\text{Rb} = -1/2$) азимутального магнитного поля с параметром $\xi = 1$. Здесь видно, что с возрастанием положительного профиля числа Россби Ro (кривая 1 — $\text{Ro} = 2$, кривая 2 — $\text{Ro} = 0$) минимальное значение стационарного числа Рэлея $\text{Ra}_{st}^{\text{min}}$ также возрастает, т. е. повышается порог развития неустойчивости. С другой стороны, для отрицательных профилей вращения: кеплеровского ($\text{Ro} = -3/4$) (кривая 3) и рэлеевского

($\text{Ro} = -1$) (кривая 4) наблюдаем уменьшение критического числа Рэлея, т. е. более низкий порог развития неустойчивости по сравнению со случаем однородного ($\text{Ro} = 0$) и неоднородного ($\text{Ro} = 2$) вращения. На рис. 13а показано, что концентрация наночастиц (кривая 2) способствует понижению порога стационарной конвекции по сравнению с «чистой» жидкостью (кривая 1). Здесь кривые 1, 2 построены для числа Россби $\text{Ro} = -3/4$, но сделанные выводы остаются в силе при любых числах Ro .

Проведем анализ влияния азимутального магнитного поля на стационарную конвекцию, фиксируя параметр Ro для различных магнитных чисел Россби ($\text{Rb} = -1, -1/2, 0, 1/2$) и $\xi = 1$. На рис. 12б показаны результаты для случая однородного вращения ($\text{Ro} = 0$). Здесь мы видим, что для положительных чисел $\text{Rb} \geq 0$ (кривая 3 — $\text{Rb} = 0$, кривая 4 — $\text{Rb} = 1/2$) критические числа Рэлея меньше, чем для отрицательных чисел $\text{Rb} < 0$ (кривая 1 — $\text{Rb} = -1$, кривая 2 — $\text{Rb} = -1/2$). Следовательно, в зависимости от профиля неоднородности азимутального магнитного поля $H_{0\varphi}(R) = CR^\alpha$ ($C = \text{const}$, α — произвольное вещественное число) порог неустойчивости может либо увеличиваться ($\text{Rb} < 0$), либо уменьшаться ($\text{Rb} > 0$). На рис. 13б кривая 1 соответствует «чистой» электропроводящей жидкости, кривая 2 — электропроводящей наножидкости. Кривые 1, 2 построены для чисел Россби $\text{Ro} = 0$, $\text{Rb} = -1$. Здесь мы видим, что концентрация наночастиц способствует понижению порога стационарной конвекции. Этот вывод остается в силе при любых профилях неоднородного азимутального магнитного поля (магнитного числа Россби Rb). Аналогичная картина наблюдается для кеплеровского профиля вращения $\text{Ro} = -3/4$ (см. рис. 12в и 13в). Сравнивая результаты на рис. 12б, 13б и рис. 12в, 13в можно заметить, что для профиля вращения $\text{Ro} = -3/4$ пороги неустойчивости меньше, чем для случая $\text{Ro} = 0$ при любых профилях неоднородного азимутального магнитного поля.

Приступим к исследованию влияния вращения, числа Россби, азимутального магнитного поля, спирального магнитного поля, числа Льюиса, модифицированного коэффициента диффузии и концентрации наночастиц на стационарную конвекцию. Для этой цели вычислим производные

$$\frac{d\tilde{\text{R}}}{d\tilde{\text{T}}}, \frac{d\tilde{\text{R}}}{d\tilde{\text{Ro}}}, \frac{d\tilde{\text{R}}}{d\tilde{\text{Q}}}, \frac{d\tilde{\text{R}}}{d\tilde{\xi}}, \frac{d\tilde{\text{R}}}{d\tilde{\text{Rb}}}, \frac{d\tilde{\text{R}}}{d\tilde{L}_e}, \frac{d\tilde{\text{R}}}{d\tilde{N}_A}, \frac{d\tilde{\text{R}}}{d\tilde{R}_n}.$$

Здесь мы ввели переменные Чандрасекара

$$\tilde{\text{R}} = \frac{\text{Ra}_{st}}{\pi^4}, \quad \tilde{\text{T}} = \frac{\text{Ta}}{\pi^4}, \quad \tilde{\text{Q}} = \frac{Q}{\pi^2}, \quad x = \frac{k^2}{\pi^2}, \quad \tilde{\xi} = \frac{\xi}{\pi}.$$

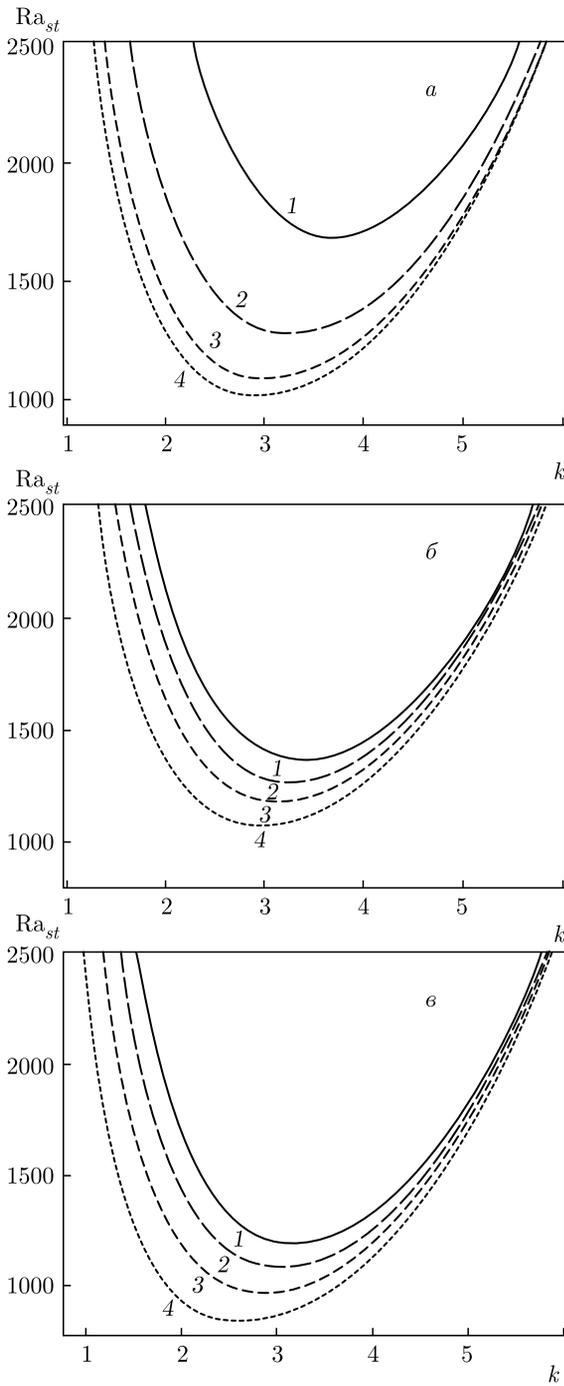


Рис. 12. Зависимости стационарного числа Рэлея Ra_{st} от волновых чисел k для неоднородно вращающейся наножидкости в спиральном магнитном поле: *a* — $Rb = -1/2$, $\xi = 1$ и $Ro = 2$ (кривая 1), 0 (кривая 2), $-3/4$ (кривая 3), -1 (кривая 4); *б* — $Ro = 0$, $\xi = 1$ и $Rb = -1$ (кривая 1), $-1/2$ (кривая 2), 0 (кривая 3), $1/2$ (кривая 4); *в* — $Ro = -3/4$, $\xi = 1$ и $Rb = -1$ (кривая 1), $-1/2$ (кривая 2), 0 (кривая 3), $1/2$ (кривая 4)

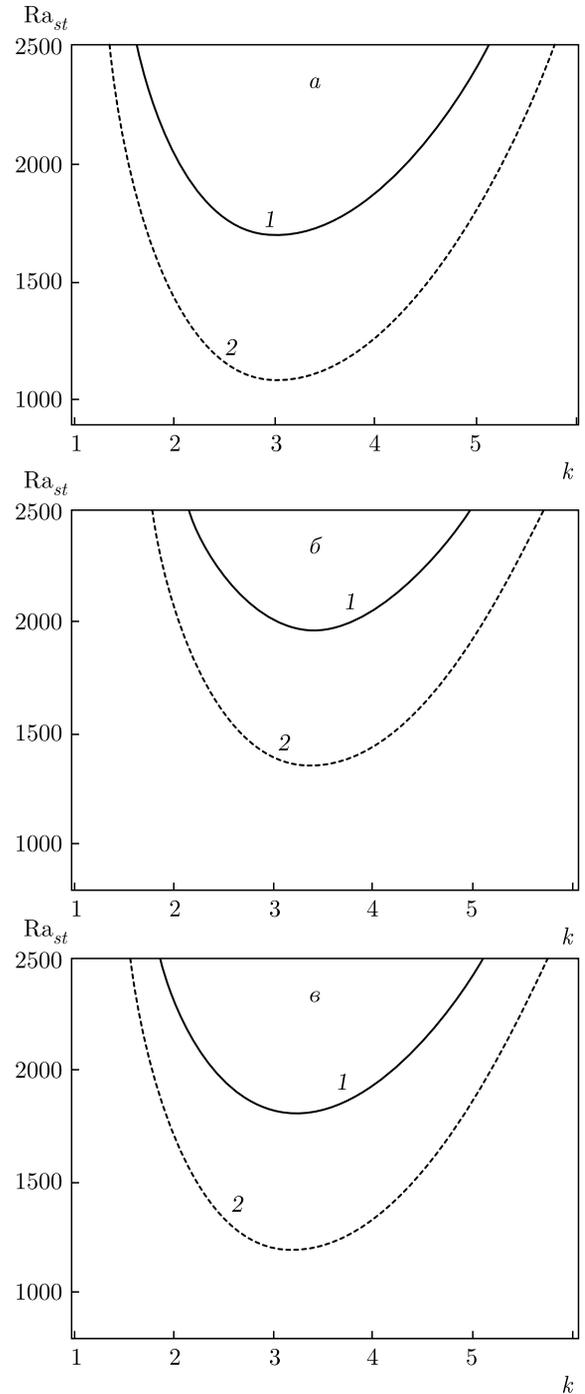


Рис. 13. Зависимости стационарного числа Рэлея Ra_{st} от волновых чисел k : *a* — $Rb = -1/2$, $Ro = -3/4$, $\xi = 1$; *б* — $Ro = 0$, $Rb = -1$, $\xi = 1$; *в* — $Ro = -3/4$, $Rb = -1$, $\xi = 1$. На всех графиках кривая 1 соответствует «чистой» электропроводящей жидкости, кривая 2 — электропроводящей наножидкости

В этих переменных выражение для критического числа Рэлея (69) принимает вид

$$\begin{aligned} \tilde{R} &= \left[\tilde{R}^{(0)} - R_n(L_e + N_A) + \right. \\ &+ \left. \frac{2\pi^3 \tilde{Q} \tilde{\xi} \sqrt{\tilde{T}} (2 + \text{Ro}(1 - \text{Pm})) N_B (N_A - 1)}{x((1+x)^2 + \tilde{Q}) L_e} \right] \times \\ &\times \left[1 - \frac{2\tilde{Q} \tilde{\xi} \sqrt{\tilde{T}} (2 + \text{Ro}(1 - \text{Pm})) (N_A - N_B)}{\pi(1+x)((1+x)^2 + \tilde{Q})^2 L_e} \right]^{-1} = \\ &= \tilde{D}_1(k) \tilde{D}_2^{-1}(k), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{R}^{(0)} &= \frac{(1+x)((1+x)^2 + \tilde{Q})^2 + \tilde{T}(1+x)^2(1+\text{Ro})}{x((1+x)^2 + \tilde{Q})} + \\ &+ \frac{\tilde{T} \text{Ro} \text{Pm} \tilde{Q} - 4\tilde{\xi}^2 \tilde{Q}^2}{x((1+x)^2 + \tilde{Q})} - \frac{4\tilde{\xi}^2 \tilde{Q}}{x} \text{Rb}. \end{aligned}$$

Используя эти выражения, нетрудно вычислить искомые производные

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{R}}{d\tilde{T}} &= \left[\frac{d\tilde{R}^{(0)}}{d\tilde{T}} + \right. \\ &+ \left. \frac{\pi^3 \tilde{Q} \tilde{\xi} (2 + \text{Ro}(1 - \text{Pm})) N_B (N_A - 1)}{x((1+x)^2 + \tilde{Q}) L_e \sqrt{\tilde{T}}} \right] \tilde{D}_2^{-1} + \tilde{D}_2^{-2} \tilde{D}_1 \times \\ &\times \frac{\tilde{Q} \tilde{\xi} (2 + \text{Ro}(1 - \text{Pm})) (N_A - N_B)}{\pi(1+x)((1+x)^2 + \tilde{Q})^2 L_e \sqrt{\tilde{T}}}, \quad (71) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{R}^{(0)}}{d\tilde{T}} &= \frac{(1+x)^2}{x((1+x)^2 + \tilde{Q})} + \\ &+ \frac{\text{Ro}((1+x)^2 + \tilde{Q} \text{Pm})}{x((1+x)^2 + \tilde{Q})}, \quad (72) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{R}}{d\text{Ro}} &= \left[\frac{d\tilde{R}^{(0)}}{d\text{Ro}} + \frac{2\pi^3 \tilde{Q} \tilde{\xi} \sqrt{\tilde{T}} (1 - \text{Pm}) N_B (N_A - 1)}{x((1+x)^2 + \tilde{Q}) L_e} \right] \times \\ &\times \tilde{D}_2^{-1} + \tilde{D}_2^{-2} \tilde{D}_1 \frac{2\tilde{Q} \tilde{\xi} \sqrt{\tilde{T}} (1 - \text{Pm}) (N_A - N_B)}{\pi(1+x)((1+x)^2 + \tilde{Q})^2 L_e}, \quad (73) \end{aligned}$$

$$\frac{d\tilde{R}^{(0)}}{d\text{Ro}} = \frac{\tilde{T}((1+x)^2 + \tilde{Q} \text{Pm})}{x((1+x)^2 + \tilde{Q})}, \quad (74)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{R}}{d\tilde{Q}} &= \left[\frac{d\tilde{R}^{(0)}}{d\tilde{Q}} + \right. \\ &+ \left. \frac{2\pi^3 \tilde{\xi} \sqrt{\tilde{T}} (2 + \text{Ro}(1 - \text{Pm})) N_B (N_A - 1) (1+x)^2}{x((1+x)^2 + \tilde{Q}) L_e} \right] \times \\ &\times \tilde{D}_2^{-1} + \tilde{D}_2^{-2} \tilde{D}_1 \times \\ &\times \frac{2\tilde{\xi} \sqrt{\tilde{T}} (2 + \text{Ro}(1 - \text{Pm})) (N_A - N_B) ((1+x)^2 - \tilde{Q})}{\pi(1+x)((1+x)^2 + \tilde{Q})^2 L_e}, \quad (75) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{R}^{(0)}}{d\tilde{Q}} &= \frac{1+x}{x} - \frac{(1+x)^2 \tilde{T} (1 + \text{Ro}(1 - \text{Pm}))}{x((1+x)^2 + \tilde{Q})^2} - \\ &- \frac{4\tilde{\xi}^2}{x} \left(\text{Rb} + \frac{\tilde{Q}(2(1+x)^2 + \tilde{Q})}{(1+x)^2 + \tilde{Q}} \right), \quad (76) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{R}}{d\xi} &= \left[\frac{d\tilde{R}^{(0)}}{d\xi} + \right. \\ &+ \left. \frac{2\pi^3 \tilde{Q} \sqrt{\tilde{T}} (2 + \text{Ro}(1 - \text{Pm})) N_B (N_A - 1)}{x((1+x)^2 + \tilde{Q}) L_e} \right] \tilde{D}_2^{-1} + \\ &+ \tilde{D}_2^{-2} \tilde{D}_1 \frac{2\tilde{Q} \sqrt{\tilde{T}} (2 + \text{Ro}(1 - \text{Pm})) (N_A - N_B)}{\pi(1+x)((1+x)^2 + \tilde{Q})^2 L_e}, \quad (77) \end{aligned}$$

$$\frac{d\tilde{R}^{(0)}}{d\xi} = -\frac{8\tilde{\xi} \tilde{Q}}{x} \frac{\tilde{Q}(1 + \text{Rb}) + \text{Rb}(1+x)^2}{(1+x)^2 + \tilde{Q}}, \quad (78)$$

$$\frac{d\tilde{R}}{d\text{Rb}} = \frac{d\tilde{R}^{(0)}}{d\text{Rb}} = -\frac{4\tilde{\xi}^2 \tilde{Q}}{x}, \quad (79)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{R}}{dL_e} &= \left[-R_n - \right. \\ &- \left. \frac{2\pi^3 \tilde{Q} \tilde{\xi} \sqrt{\tilde{T}} (2 + \text{Ro}(1 - \text{Pm})) N_B (N_A - 1)}{x((1+x)^2 + \tilde{Q}) L_e^2} \right] \tilde{D}_2^{-1} - \\ &- \tilde{D}_2^{-2} \tilde{D}_1 \frac{2\tilde{Q} \tilde{\xi} \sqrt{\tilde{T}} (2 + \text{Ro}(1 - \text{Pm})) (N_A - N_B)}{\pi(1+x)((1+x)^2 + \tilde{Q})^2 L_e^2}, \quad (80) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{R}}{dN_A} &= \\ &= \left[-R_n + \frac{2\pi^3 \tilde{Q} \tilde{\xi} \sqrt{\tilde{T}} (2 + \text{Ro}(1 - \text{Pm})) N_B}{x((1+x)^2 + \tilde{Q}) L_e} \right] \tilde{D}_2^{-1} + \\ &+ \tilde{D}_2^{-2} \tilde{D}_1 \frac{2\tilde{Q} \tilde{\xi} \sqrt{\tilde{T}} (2 + \text{Ro}(1 - \text{Pm}))}{\pi(1+x)((1+x)^2 + \tilde{Q})^2 L_e}, \quad (81) \end{aligned}$$

$$\frac{d\tilde{R}}{dR_n} = -(N_A + L_e)\tilde{D}_2^{-1}. \quad (82)$$

Нетрудно заметить, что в выражениях (71)–(82) содержатся члены порядка $\tilde{Q}\xi N_B(N_A - 1)/L_e$, которые связаны совместным действием эффектов прироста наночастиц (N_B) и спирального магнитного поля ($\tilde{Q}\xi$). Оценки этих эффектов при известных параметрах наножидкости (N_A, N_B, L_e) дают достаточно малый вклад. Однако произведения типа $\tilde{D}_1\tilde{Q}\xi N_B(N_A - 1)/L_e$ дают вклад в дестабилизацию конвекции, если концентрационное число Рэлея положительно, $R_n > 0$. Следовательно, во всех формулах (71)–(82) дестабилизирующим фактором является концентрация наночастиц (число R_n).

Из формул (72), (74) следует, что неоднородное вращение оказывает стабилизирующий эффект ($d\tilde{R}^{(0)}/d\tilde{T} > 0$, $d\tilde{R}^{(0)}/dRo > 0$) в случае положительных чисел Россби, $Ro > 0$, и в обратном случае, для $Ro < 0$, неоднородное вращение может оказывать дестабилизирующий эффект ($d\tilde{R}^{(0)}/d\tilde{T} < 0$, $d\tilde{R}^{(0)}/dRo < 0$).

Из формулы (76) видно, что величина $d\tilde{R}^{(0)}/d\tilde{Q}$ может быть положительной или отрицательной, т. е. аксиальное магнитное поле (число Чандрасекара \tilde{Q}) оказывает стабилизирующее или дестабилизирующее действие на стационарную конвекцию. Дестабилизирующий эффект возникает при выполнении условий для профилей неоднородного вращения (числа Россби Ro) и неоднородного азимутального магнитного поля (магнитного числа Россби Rb):

$$Ro(Pm - 1) < 1,$$

$$Rb > \frac{\tilde{Q}(2(1+x)^2 + \tilde{Q})}{(1+x)^2 + \tilde{Q}} \quad (\text{при } Rb > 0),$$

$$Rb < \frac{\tilde{Q}(2(1+x)^2 + \tilde{Q})}{(1+x)^2 + \tilde{Q}} \quad (\text{при } Rb < 0).$$

Первое неравенство справедливо для положительных чисел Россби, $Ro > 0$, и магнитных числах Прандтля $Pm < 1$, либо $Ro < 0$ и $Pm > 1$.

Влияние неоднородного азимутального магнитного поля на стационарную конвекцию выясним с помощью формул (78) и (79). В силу неоднородности азимутального магнитного поля в поле Лоренца появляется градиент магнитного поля, вызывающий дрейф течения жидкости. В зависимости от знака градиента магнитного поля (число Rb) изменяется направление дрейфа течения, влияющего на устойчивость конвективных течений. Так, при $Rb > 0$

(для профиля $H_{0\varphi} = CR^\alpha$, $\alpha > 1$) происходит дестабилизация конвекции, а при $Rb < 0$ ($\alpha < 1$) — стабилизация конвекции. Это явление наблюдается в стационарной неустойчивости (см. рис. 11).

Неоднородное азимутальное магнитное поле с профилем неоднородности $Rb = -1$ оказывает стабилизирующий эффект, поскольку $d\tilde{R}/d\tilde{\xi} > 0$. Для магнитных чисел Россби $Rb \geq 1$ неоднородное азимутальное магнитное поле оказывает дестабилизирующий эффект, $d\tilde{R}/d\tilde{\xi} < 0$. Из формулы (78) видно, что однородное азимутальное магнитное поле ($Rb = -1/2$) может оказывать как стабилизирующее, так и дестабилизирующее действие на стационарную конвекцию. Формула (79) показывает, что эффекты стабилизации ($Rb < 0$) и дестабилизации ($Rb > 0$) зависят от знака магнитного числа Россби, т. е. от профиля неоднородного азимутального магнитного поля $H_{0\varphi}(R)$.

Из формул (80), (81) видно, что число Льюиса L_e и модифицированный коэффициент диффузии N_A имеют дестабилизирующий эффект, когда число Рэлея наночастиц положительно, $R_n > 0$. Для большинства видов наножидкостей сумма числа Льюиса и модифицированного коэффициента диффузии всегда положительна, $L_e + N_A > 0$ [11], тогда из (82) следует, что концентрационное число Рэлея всегда имеет дестабилизирующий эффект.

В отличие от стационарной конвекции в аксиальном магнитном поле, влияние эффектов вращения, числа Россби, азимутального магнитного поля, спирального магнитного поля на стационарную неоднородно вращающуюся конвекцию наножидкости в спиральном магнитном поле происходит при дестабилизирующем вкладе концентрации наночастиц.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе получена линейная система магнитогидродинамических уравнений для неоднородно вращающейся наножидкости в спиральном магнитном поле с постоянными градиентами температуры и концентрации наночастиц в поле силы тяжести. Для этой системы уравнений в приближении локального метода ВКБ получено дисперсионное уравнение для эволюции малых возмущений в тонком слое наножидкости. Рассмотрены различные типы гидромагнитных неустойчивостей, возникающих в отсутствие градиента температуры, но с учетом градиента концентрации наночастиц. В случае, когда неоднородно вращающаяся наножидкость помещена только в аксиальное ($H_{0z} \neq 0$) магнитное

поле, возникает стандартная МВН или просто МВН. Если наножидкость помещена только в неоднородное азимутальное ($H_{0\varphi}(R) \neq 0$) магнитное поле, то возникает азимутальная МВН. При наличии спирального магнитного поля $\mathbf{H}_0 = H_{0\varphi}(R)\mathbf{e}_\varphi + H_{0z}\mathbf{e}_z$ возникает спиральная МВН. Для каждого типа МВН получены дисперсионные уравнения и проведен анализ их асимптотической устойчивости с помощью критерия Льенара–Шипара. Используя этот критерий, мы определили области развития МВН, азимутальной и спиральной МВН в плоскости (k, Ro) для различных вариаций параметра вращения Ta и азимутального числа Чандрасекара Q_φ . Также получены критические числа Россби (Ro_{cr}, Rb_{cr}), характеризующие пороговое значение для профилей неоднородного вращения (числа Россби Ro) и неоднородного азимутального магнитного поля (магнитные числа Россби Rb). Области развития МВН, азимутальной и спиральной МВН для наножидкости имеют большие размеры в плоскости (k, Ro) , чем для «чистой» жидкости.

При наличии градиентов температуры и концентрации наночастиц рассмотрены стационарные режимы конвекции в аксиальном и спиральном магнитных полях в зависимости от профилей неоднородного вращения (числа Россби Ro) и неоднородного азимутального магнитного поля (магнитные числа Россби Rb). Для обоих типов конвективной неустойчивости получены выражения для критических чисел Рэлея Ra_{st} и построены кривые нейтральной устойчивости. Показано, что при наличии концентрации наночастиц пороговое значение стационарного критического числа Рэлея Ra_{st}^{min} становится меньше как в аксиальной, так и в спиральной магнитоконвекции.

Развитая в настоящей работе теория может применяться для проведения лабораторных экспериментов с неоднородно вращающейся стратифицированной электропроводящей наножидкостью в магнитном поле.

ЛИТЕРАТУРА

1. S. K. Das, S. U. S. Choi, W. Yu, and T. Pradeep, *Nanofluids: Science and Technology*, Wiley-Interscience, Hoboken, New Jersey (2008).
2. В. Я. Рудяк, А. В. Минаков, *Современные проблемы микро- и наножидкости*, Наука, Новосибирск (2016).
3. J. Buongiorno, *J. Heat Trans.* **128**, 240 (2006).
4. В. Я. Рудяк, А. В. Минаков, М. И. Прыжников, *Письма в ЖТФ* **45** (9), 36 (2019).
5. B. Ghasemi and S. M. Aminossadati, *Int. J. Therm. Sci.* **50**, 1748 (2011).
6. M. A. A. Hamada, I. Pop, and A. I. Md. Ismail, *Nonlinear Anal. Real World Appl.* **12**, 1338 (2011).
7. D. Yadav, R. Bhargava, and G. S. Agrawal, *J. Eng. Math.* **80**, 147 (2013).
8. S. Chandrasekhar, *Hydrodynamics and Hydromagnetic Stability*, Oxford Univ. Press, London (1961).
9. Г. З. Гершуни, Е. М. Жуховицкий, *Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости*, Наука, Москва (1972).
10. А. В. Гетлинг, *Конвекция Рэлея–Бенара. Структура и динамика*, Эдиториал УРСС, Москва (1999).
11. Dhananjay Yadav, R. Bhargava, G. S. Agrawal, Gyeong S. Hwang, Jinho Lee, and M. C. Kim, *Asia-Pac. J. Chem. Eng.* **9**(5), 663 (2014).
12. М. И. Копп, А. В. Тур, В. В. Яновский, *ЖЭТФ* **154**, 1281 (2018).
13. М. Копп, А. Тур, and V. Yanovsky, *East Eur. J. Phys.* **1**, 4 (2019).
14. М. И. Копп, А. В. Тур, В. В. Яновский, *ЖЭТФ* **157**, 901 (2020).
15. М. И. Копп, А. В. Тур, and V. V. Yanovsky, *Fluid Dyn. Res.* **53**, 015509 (2021).
16. В. П. Лахин, В. И. Ильгисонис, *ЖЭТФ* **137**, 783 (2010).
17. O. N. Kirillov and F. Stefani, *Proc. Internat. Astron. Union* **8**, 233 (2012).
18. O. N. Kirillov, F. Stefani, and Y. Fukumoto, *J. Fluid Mech.* **760**, 591 (2014).
19. S. Chandrasekhar, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **42**, 273 (1956).
20. Е. П. Велихов, *ЖЭТФ* **36**, 1398 (1959).
21. А. Б. Михайловский, Дж. Г. Ломинадзе, А. П. Чуриков, В. Д. Пустовитов, *Физика плазмы* **35**, 307 (2009).
22. H. Ji, J. Goodman and A. Kageyama, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **325**, L1 (2001).
23. K. Noguchi, V. I. Pariev, S. A. Colgate, H. F. Beckley, and J. Nordhaus, *Astrophys. J.* **575**, 1151 (2002).
24. G. Rüdiger and Y. Zhang, *Astron. Astroph.* **378**, 302 (2001).

25. J. Goodman and H. Ji, *J. Fluid. Mech.* **462**, 365 (2002).
26. A. P. Willis and C. F. Barenghi, *Astron. Astroph.* **388**, 688 (2002).
27. G. Rüdiger, M. Schultz, and D. Shalybkov, *Phys. Rev. E* **67**, 046312 (2003).
28. E. P. Velikhov, A. A. Ivanov, V. P. Lakhin, and K. S. Serebrennikov, *Phys. Lett. A* **356**, 357 (2006).
29. V. I. Ilgisonis, I. V. Khalzov, V. P. Lakhin, and A. I. Smolyakov, *AIP Conf. Proc.* **1242**, 23 (2010).
30. R. Hollerbach and G. Rüdiger, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 124501 (2005).
31. G. Rüdiger, R. Hollerbach, M. Schultz, and D. A. Shalybkov, *Astron. Nachr.* **326**, 409 (2005).
32. V. P. Lakhin and E. P. Velikhov, *Phys. Lett. A* **369**, 98 (2007).
33. H. Ji and S. Balbus, *Phys. Today* **66**(8), 27 (2013).
34. S. Boldyrev, D. Huynh, and V. Pariev, *Phys. Rev. E* **80**, 066310 (2009).
35. G. I. Ogilvie and J. E. Pringle, *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **279**, 152 (1996).
36. G. I. Ogilvie and A. T. Potter, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 074503 (2008).
37. Г. Моффат, *Возбуждение магнитного поля в проводящей среде*, Мир, Москва (1980).
38. Ф. П. Гантмахер, *Лекции по аналитической механике*, Физматлит, Москва (2005).
39. D. H. Michael, *Mathematika* **1**, 45 (1954).
40. B. Eckhardt and D. Yao, *Chaos Solitons Fractals* **5**(11), 2073 (1995).
41. G. Rüdiger and M. Schultz, *Astron. Nachr.* **331**, 121 (2010).
42. D. A. Nield and A. V. Kuznetsov, *Eur. J. Mech. B* **29**, 217 (2010).

КВАЗИИЗЭНТРОПИЧЕСКОЕ СЖАТИЕ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ ДЕЙТЕРИЯ И ЕГО СМЕСИ С ГЕЛИЕМ В ОБЛАСТИ ДАВЛЕНИЙ ДО 250 ГПа

М. А. Мочалов^{a*}, *Р. И. Илькаев*^a, *В. Е. Фортков*^b, *С. В. Ерунов*^a,
В. А. Аринин^a, *А. О. Бликов*^a, *В. А. Огородников*^a, *А. В. Рыжков*^a,
В. А. Комраков^a, *В. Г. Куделькин*^a, *И. П. Максимкин*^a, *В. К. Грязнов*^c,
И. Л. Иосилевский^b, *П. Р. Левашов*^b, *Д. В. Минаков*^b, *М. А. Парамонов*^b

^a *Российский федеральный ядерный центр –
 Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики
 607188, Саров, Нижегородская обл., Россия*

^b *Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
 125412, Москва, Россия*

^c *Институт проблем химической физики Российской академии наук
 142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 16 декабря 2020 г.,
 после переработки 16 декабря 2020 г.
 Принята к публикации 12 февраля 2021 г.

Представлены данные по квазиизэнтропической сжимаемости сильнонеидеальной плазмы смеси дейтерия и гелия в области давлений 150–250 ГПа в устройствах цилиндрической геометрии, а также новый результат, полученный в эксперименте с «чистым» дейтерием при давлении около 200 ГПа. Траекторию движения металлических оболочек, сжимающих плазму, регистрировали с помощью мощных импульсных источников рентгеновского излучения с граничной энергией электронов до 60 МэВ. Значения плотности плазмы дейтерия и его смеси с гелием определены по измеренным радиусам оболочек в момент их «остановки». Давление сжатой плазмы получено на основе газодинамических расчетов, учитывающих реальные характеристики экспериментальных устройств. Полученные данные подтверждают сделанный ранее во ВНИИЭФ вывод о фазовом переходе в плазме сжатого дейтерия в области давлений 150–160 ГПа и свидетельствуют о том, что этот фазовый переход сохраняется в смеси дейтерия с гелием.

DOI: 10.31857/S0044451021060092

1. ВВЕДЕНИЕ

К изучению свойств водорода и гелия ученые всегда проявляли повышенный интерес, так как для описания строения и эволюции астрофизических объектов необходимо знать их физические свойства в сжатом и разогретом состояниях. Исследования Юпитера, Сатурна, коричневых карликов и многочисленного отряда «внесолнечных» планет требуют информации о теплофизических свойствах сильнонеидеальной (когда отношение энергии кулоновского взаимодействия заряженных частиц к их кинетической энергии, $\Gamma_D = Ze^2 n^{1/3} / E_k$, много больше единицы) и частично вырожденной водородной и гелиевой плазмы [1]. Создание новых способов генерации и диагностики состояния плазмы как водорода и гелия по-отдельности, так и, в особенности, их смеси в мегабарном диапазоне давлений дает чрезвычайно важную информацию для изучения астрофизических объектов [2]. При этом основной нерешенной до настоящего времени физической проблемой и главным источником неопределенности для водород-гелиевой плазмы в диапазоне давлений $P \sim 10^2$ – 10^3 ГПа, температур $T \sim 10^3$ – 10^4 К и плотностей $\rho \sim 1$ – 5 г/см³ является проблема возможности фазовых переходов (ФП) и сопутствующих им аномалий термодинамических свойств такой плаз-

тической энергии, $\Gamma_D = Ze^2 n^{1/3} / E_k$, много больше единицы) и частично вырожденной водородной и гелиевой плазмы [1]. Создание новых способов генерации и диагностики состояния плазмы как водорода и гелия по-отдельности, так и, в особенности, их смеси в мегабарном диапазоне давлений дает чрезвычайно важную информацию для изучения астрофизических объектов [2]. При этом основной нерешенной до настоящего времени физической проблемой и главным источником неопределенности для водород-гелиевой плазмы в диапазоне давлений $P \sim 10^2$ – 10^3 ГПа, температур $T \sim 10^3$ – 10^4 К и плотностей $\rho \sim 1$ – 5 г/см³ является проблема возможности фазовых переходов (ФП) и сопутствующих им аномалий термодинамических свойств такой плаз-

* E-mail: postmaster@ifv.vniief.ru

мы. Следует подчеркнуть, что еще в начале 70-х годов в серии экспериментальных работ ВНИИЭФ [3] была зафиксирована резкая немонотонность в параметрах P - ρ -траектории квазиизэнтропического сжатия водорода с двумя участками этой траектории, при низких и высоких давлениях, и с заметным скачком плотности (около 10%) при $P \sim 300$ ГПа при переходе с одной ветви на другую, который тогда же интерпретировался как признак фазового перехода. Впоследствии результаты работы [3] были критически проанализированы и проведены дополнительные исследования сжимаемости дейтерия на новом уровне генерации и диагностики [4, 5]. Эксперименты [4, 5] подтвердили существование двух ветвей, низкого и высокого давлений, но зона перехода опустилась в район $P \sim 150$ – 160 ГПа.

Говоря о проблеме ФП в гелий-водородной смеси, следует отметить возможное существование двух принципиально различных категорий таких переходов: трансформация в условиях смеси ФП, уже существующих в чистых веществах, и ФП, существующих именно и только в смесях, — появление зон несмесимости (immiscibility) и расслоение смеси на фазы разного химического состава. Следует также подчеркнуть, что обе упомянутые категории ФП в соответствии с законами термодинамики обязаны в общем случае быть неконгруэнтными (или инконгруэнтными), т. е. допускать равновесие сосуществующих фаз с различающимся химическим составом при сохранении общего брутто-состава (см., например, работы [6, 7]). Это очевидно для случая зон несмесимости и особенно важно для проблемы существования «плазменного» ФП в гелий-водородной смеси планетарных пропорций [8], поскольку при трансформации ФП в условия планетарных смесей помимо параметров фазовых границ существенно меняется их топология и, следовательно, как расположение, так и свойства критической точки (см., например, работу [9]). В частности, хорошо известная одномерная P - T -зависимость межфазной границы в «чистых» веществах превращается в случае смеси в двумерную P - T -зону с дополнительными «концевыми» точками (end-points) — максимумами температуры, давления и отклонения химического состава у сосуществующих фаз.

Все сказанное выше определяет главные вопросы, поставленные перед экспериментом, использующим технику квазиизэнтропического сжатия плотной горячей плазмы:

- как трансформируется в плотной горячей гелий-водородной смеси аномалия типа ФП, изучавшаяся в работах [3–5]?

- как проявляется и возможно ли зафиксировать в результатах эксперимента существование упомянутых выше зон несмесимости, предсказанных теоретически?

- реализуются ли в этой смеси помимо аномалии [3–5] иные варианты ФП, предсказывавшиеся в теоретических работах?

Структура данной статьи следующая. В разд. 2 перечислены особенности экспериментальной методики генерации и диагностики дейтерий-гелиевой плазмы. Далее детально описываются экспериментальные данные (плотность плазмы), дополненные параметрами сжатой плазмы, полученными из газодинамических расчетов экспериментальных устройств с исследуемым веществом. Наконец, в последней части обсуждаются результаты сравнительного расчета параметров изэнтропического сжатия чистого D_2 и смеси $D_2 + He$ в рамках двух теоретических подходов: «химической модели плазмы» (код SANA [10]), традиционно сопровождающей интерпретацию экспериментальных данных ВНИИЭФ по динамическому сжатию дейтерия, гелия и других газов [4, 5, 11–16], и строгого подхода *ab initio* — квантовой молекулярной динамики (quantum molecular dynamics, QMD), см., например, работы [17, 18], последовательно учитывающей квантовые эффекты динамики электронов совместно с эффектами кулоновской неидеальности плазмы. Состояния водорода и гелия, близкие к предполагаемым в планетах-гигантах Солнечной системы, Юпитере и Сатурне, уже достаточно давно воспроизводятся в РФЯЦ-ВНИИЭФ в экспериментах по квазиизэнтропическому сжатию газообразных дейтерия и гелия [11–16], а достигнутый диапазон параметров в настоящее время расширен до уникально высокой плотности 15 г/см^3 при давлениях до $P \approx 20$ ТПа. В то же время аналогичные экспериментальные данные по сжимаемости смеси водорода (дейтерия) и гелия практически отсутствуют.

В настоящей работе с использованием рентгенографического комплекса РФЯЦ-ВНИИЭФ [19] получены новые данные по квазиизэнтропической сжимаемости смеси дейтерия с гелием, а также проведен дополнительный эксперимент по сжимаемости «чистого» дейтерия при давлении $P \sim 200$ ГПа с использованием новой цилиндрической конструкции. Также в работе проведен критический анализ некоторых экспериментов с водородом (дейтерием), выполненных ранее во ВНИИЭФ в области мегабарных давлений [3]. Помимо общезначимого интере-

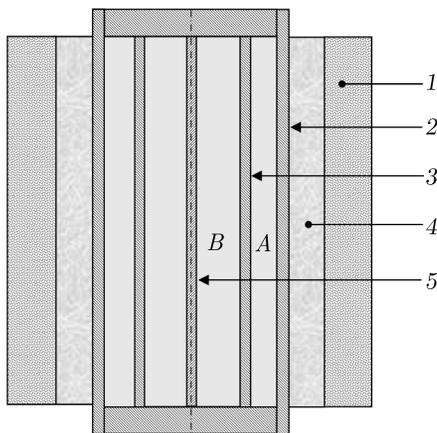


Рис. 1. Цилиндрическое устройство с равномерным профилем давления в полости сжатой плазмы [20]

са такие данные крайне важны для калибровки существующих моделей уравнений состояния чистых газов и их смесей в широкой области фазовых состояний.

2. ПОСТАНОВКА ЭКСПЕРИМЕНТА. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

В экспериментах настоящей работы использована конструкция цилиндрического экспериментального устройства [20], вдоль оси которого расположен цилиндрический металлический стержень (рис. 1).

Устройство содержит заряд цилиндрического взрывчатого вещества (ВВ) 1 (explosive), охватывающий корпус 2, внутри которого коаксиально размещена дополнительная цилиндрическая оболочка 3. Таким образом, в устройстве конструктивно образованы две коаксиальные полости, А и В, для их заполнения исследуемым газом. Корпус 2 устройства изготовлен из высокопрочной стали, способной выдерживать высокое начальное давление газа, он деформируется в упругой области без разрушения. Оболочка 3 также изготовлена из стали. Для изменения степени сжатия газа часть ВВ может заменяться прокладкой из диэлектрика 4. Для снижения кумуляции энергии в полости В, приводящей к росту давления сжатой плазмы, в конструкции вдоль оси закреплен металлический цилиндрический стержень 5. При наличии стержня отраженная волна формируется не в «особой» области при $R = 0$, а на границе $R(\text{rod})$, где $R(\text{rod})$ — радиус стержня. Тем самым уменьшается амплитуда отраженной ударной волны, снижается геометрическая кумуляция энергии и выравнива-

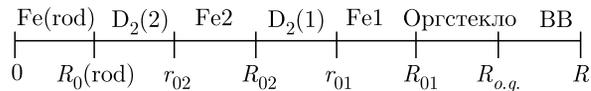


Рис. 2. Геометрия цилиндрического экспериментального устройства в экспериментах с дейтерием и его смесью с гелием: $R_0(\text{rod})$ — начальный радиус стального стержня, r_{01} и R_{01} — параметры первого каскада, r_{02} и R_{02} — параметры второго каскада, $R_{o.g.}$ — внешний радиус оболочки из оргстекла

ется распределение давления по радиусу полости со сжатой плазмой. Металлический стержень с начальным радиусом $R(\text{rod}) = 4.5$ мм изготовлен из стали.

Другая особенность двухкаскадной конструкции заключается в том, что металлогазовая смесь, возникающая при выбросе частиц металлической пыли [21] с внутренней поверхности внешней оболочки 2, оказывается локализованной в полости А и не проникает во внутреннюю полость В, в которой исследуемый газ сжимается серией ударных волн и плавно сходящейся к центру оболочкой 3. Геометрия экспериментальных устройств для исследования сжимаемости дейтерия и его смеси с гелием приведена на рис. 2. Впервые данная конструкция была использована при измерении квазиизэнтропической сжимаемости дейтерия в работе [5].

В настоящей работе в данной постановке проведен эксперимент М9 по исследованию сжимаемости дейтерия и два эксперимента, М10 и М11, со смесью дейтерия (80 %) и гелия (20 %). Заполнение камеры дейтерием проводилось с использованием металлгидридного источника [22]. Величина давления в процессе заполнения измерялась датчиком S-10 фирмы WIKA (класс точности 0.25). Температура контролировалась хромель-алюмелевой термопарой, расположенной внутри трубопровода, использованного для напуска газов. Давление газа в полостях оболочек 1 и 2 (см. рис. 1) было одинаковым. В экспериментах со смесью напуск газа в камеру проводился последовательно: сначала от термокомпрессора подавался гелий с известными параметрами P_1 и T_1 , затем — дейтерий. Конечное состояние для такой смеси известно — параметры P и T измеряются, но неизвестна плотность ρ_0 . Для ее определения учитывалось, что после напуска второй газовой компоненты (дейтерия) парциальное давление первой компоненты изменяется изохорически и составляет величину

$$P^* = P_1 T / T_1. \quad (1)$$

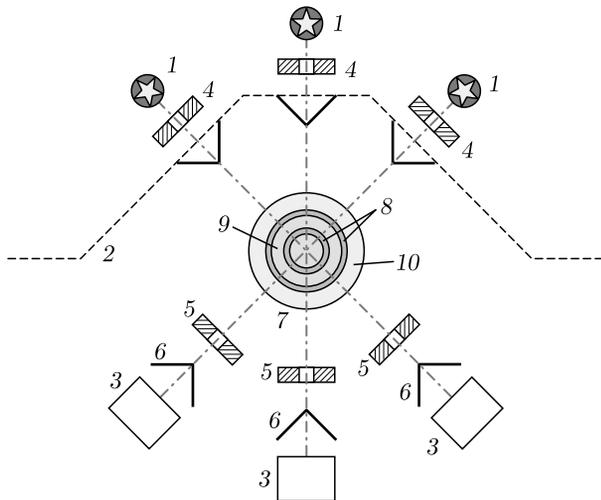


Рис. 3. Схема эксперимента: 1 — источники рентгеновского излучения [19]; 2 — защитное сооружение; 3 — регистраторы; 4, 5 — коллиматоры (Pb); 6 — конусы (Al); 7 — экспериментальное устройство; 8 — оболочки; 9 — газ; 10 — заряд ВВ

Тогда из закона Дальтона следует, что

$$P_2 = P - P^*. \quad (2)$$

Таким образом, для гелия и дейтерия вычислены начальное давление и начальная температура: соответственно (P^*, T) и (P_2, T) . Окончательно плотность смеси вычислялась с учетом сжимаемости газов на основании известных табличных данных: для гелия — по результатам работы [23] и для дейтерия — [24]. Характеристики устройств и условия проведения опытов приведены в табл. 1.

Эксперименты выполнены на рентгенографическом комплексе РФЯЦ-ВНИИЭФ с использованием оптико-электронной системы регистрации. Схема экспериментов показана на рис. 3.

Теневое изображение границ оболочек, сжимающих исследуемый газ, получено при одновременном использовании тормозного излучения трех мощных бетатронов 1 с граничной энергией электронов 60 МэВ [19]. Бетатроны расположены под углами 45° друг к другу в защитном бетонном сооружении 2 и работают в режиме последовательной генерации трех импульсов рентгеновского излучения длительностью 150–180 нс. В опыте использовалась индивидуальная оптико-электронная система детектирования 3, имеющая динамический диапазон регистрации 10^3 , которая активируется синхронно с импульсами бетатрона, что позволяет получать в каждой проекции три независимых рентгеновских изображения. В качестве преобразователей рентгеновско-

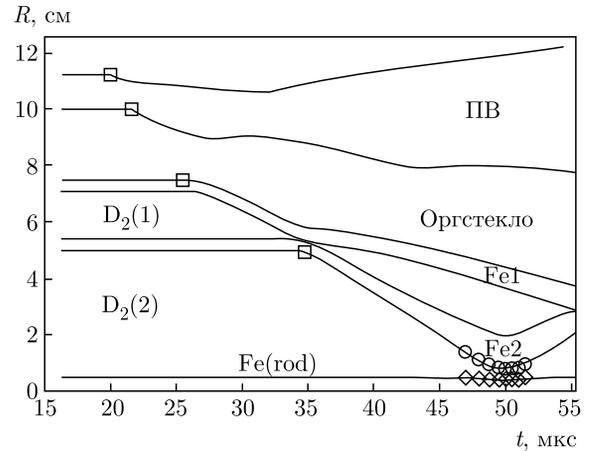


Рис. 4. Экспериментальные данные и рассчитанные $R(t)$ -диаграммы. Эксперимент: квадраты — электроконтактная методика; кружки — внутренняя граница оболочки второго каскада Fe2 (ВГО2); ромбы — граница стального стержня Fe(rod), ПВ — продукты взрыва. Сплошные линии — расчет, в области дейтерия использовано УРС из работы [26]

го излучения в видимое в данной системе использовались монокристаллы йодистого натрия и силикат лютеция. Для устранения влияния рассеянного излучения на высокочувствительные детекторы 3 размер поля регистрации в каждой из трех проекций ограничивается свинцовыми коллиматорами 4. Для защиты бетатронов 1 и оптико-электронных регистраторов рентгеновского излучения 3 применены алюминиевые конусы 5. Обработка экспериментальных рентгенограмм выполнена функциональным методом [25].

Эксперимент М9 (дейтерий). Сравнение экспериментальных данных и траекторий $R(t)$, рассчитанных с использованием уравнения состояния (УРС) дейтерия ВНИИЭФ [26], показано на рис. 4.

Подбор параметров расчетной схемы экспериментальной конструкции для этого и всех последующих экспериментов проводился по результатам тестирования оболочек на их начальной стадии движения (квадраты), когда влиянием исследуемого газа можно пренебречь. Рассчитанные траектории $R(t)$, приведенные на рис. 4, хорошо описывают экспериментальные данные, включая фазу разлета оболочки. Отличие рассчитанного радиуса остановки $R_{min} = 0.808$ см от значения $R_{exp} = 0.781$ см, полученного из результатов обработки рентгенограмм, составляет примерно 3.5%. Для большей наглядности результатов этого эксперимента на рис. 5 показаны фрагменты $R(t)$ -диаграмм внутренней границы

Таблица 1. Характеристики устройств и условия проведения опытов (M_{expl} — масса ВВ, T — температура смеси газов, P_{He} — начальное давление гелия, P — суммарное давление смеси, ρ_0 — плотность смеси)

ОПЫТ	$R_{o,g}$, мм	M_{expl} , кг	r_{02} , мм	R_{02} , мм	T , °С	P_{He} , атм	P , атм	ρ_0 , г/см ³
М9	100	24	50	54	19.6	—	255.6	0.0359
М10	122.5	18	45	49	30.2	53.7	267.7	0.0396
М11	100	24	45	49	12.7	50.2	251.1	0.0386

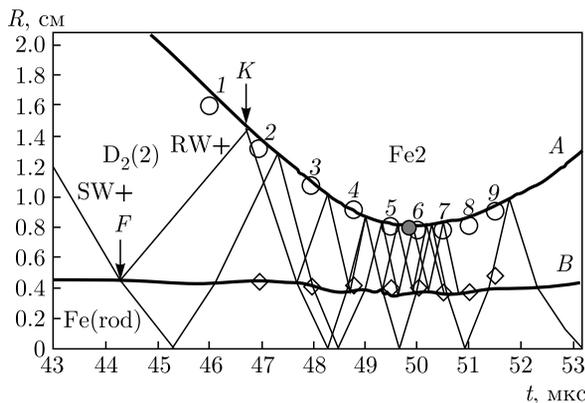


Рис. 5. (В цвете онлайн) Фрагмент $R(t)$ -диаграмм для эксперимента с дейтерием вблизи момента максимального сжатия. Эксперимент: пустые кружки — ВГО2; ромбы — граница стального стержня. Расчет: тонкие сплошные линии — ударные волны, в области газа использовано УРС дейтерия [26]; SW+ — первая ударная волна; RW+ — первая отраженная ударная волна, F — момент фокусировки первой ударной волны, K — момент отражения ударной волны от движущейся оболочки Fe2; 1–9 — регистрируемые фазы сжатия, красная точка — максимальное сжатие, толстые сплошные линии — расчет для ВГО2 (A) и для внешней границы стального стержня (B)

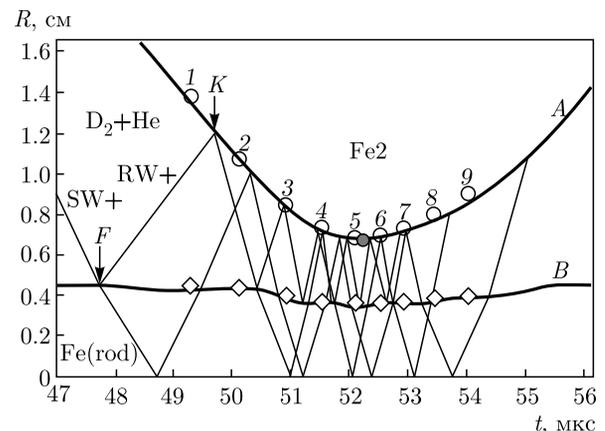


Рис. 6. (В цвете онлайн) Сравнение экспериментальных и рассчитанных $R(t)$ -данных в опыте М10 со смесью дейтерия и гелия. Обозначения, как на рис. 5

оболочки второго каскада (ВГО2) и внешней границы стального стержня Fe(rod) вблизи момента максимального сжатия.

Как следует из постановки эксперимента, первоначально дейтерий сжимается в ударной волне. На рис. 5 приведены рассчитанные для данного устройства ударные волны, циркулирующие во внутренней полости оболочки Fe2. Чтобы не загромождать рисунок, ударные волны в области оболочки Fe2 не показаны. Как видно на рис. 5, первая ударная волна SW+ в момент времени F достигает границы стержня $R(\text{rod})$ и отражается, а в момент контакта первой отраженной ударной волны RW+ с внутренней границей оболочки Fe2 в состоянии K плазма оказывается уже дважды сжатой. Как показал

анализ выполненных расчетов, число ударных волн, сжимающих плазму дейтерия в устройствах настоящей работы, достигает 20–25. Таким образом, в серии ударных волн, циркулирующих между стержнем Fe(rod) и внутренней границей оболочки Fe2, происходит трансформация ударно-волнового сжатия плазмы дейтерия в квазиизэнтропическое. Аналогичные процессы характерны и для сжатия смеси дейтерия с гелием в использованных устройствах (см. ниже).

Эксперименты М10 и М11 ($D_2 + He$). Сравнение экспериментальных данных с рассчитанными траекториями $R(t)$ для эксперимента М10 со смесью дейтерия (80 % массы) и гелия (20 % массы) в области максимального сжатия показано на рис. 6. Как видно на рис. 6, экспериментальные и рассчитанные данные для этого устройства хорошо согласуются друг с другом.

При исследовании свойств плазмы смеси дейтерия (80 %) и гелия (20 %) в области более высоких давлений в эксперименте М11 для взрывного нагружения был использован заряд ВВ массой 24 кг в тротиловом эквиваленте. Экспериментальные дан-

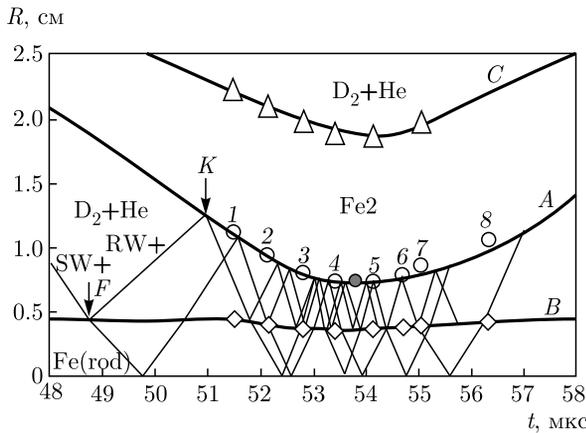


Рис. 7. (В цвете онлайн) Сравнение экспериментальных и рассчитанных $R(t)$ -данных в опыте M11 со смесью дейтерия и гелия. Обозначения, как на рис. 5. Наружная граница оболочки второго каскада Fe2 (НГО2): Δ – эксперимент, C – расчет

ные и рассчитанные траектории $R(t)$ с использованием УРС ВНИИЭФ для гомогенной смеси для этого эксперимента в области максимального сжатия показаны на рис. 7 и хорошо согласуются друг с другом.

Давление в плазме сжатой смеси дейтерия и гелия определялось из газодинамических расчетов с учетом реальных термодинамических и прочностных свойств всех элементов экспериментальных устройств и их УРС. Расчет характеристик экспериментальных устройств выполнен по одномерной газодинамической программе [27], предназначенной для численного моделирования неустановившихся движений сплошной среды и тестированной по экспериментальным данным, полученным в России и за рубежом. В расчетах для элементов конструкции и ВВ использованы УРС, введенные в газодинамический комплекс ВНИИЭФ. В расчетах компонентов смеси для дейтерия использовалось полуэмпирическое УРС [26], построенное по экспериментальным данным [3]. Для гелия УРС ВНИИЭФ в табличной форме рассчитано Хрусталевым (ВНИИЭФ) по модифицированной модели сжимаемого коволюма [26, 28].

Для расчета термодинамических параметров смеси газов, для которых наиболее справедливо допущение о перемешивании компонентов на молекулярном уровне, использована парциальная модель, в которой для расчета давления и энергии используются следующие соотношения [29]:

$$P(\rho, T) = \sum_{i=1}^N P_i(\rho_i, T), \quad (3)$$

$$E(\rho, T) = \sum_{i=1}^N \alpha_i E_i(\rho_i, T), \quad (4)$$

где P – давление, E – удельная внутренняя энергия, T – температура, ρ_i – парциальные плотности, α_i – массовые концентрации компонентов. Для учета влияния упругопластических свойств стальных оболочек использована дислокационная модель [30], учитывающая затухание упругого предвестника и релаксацию сдвиговых напряжений в волнах нагружения. Дополнительно в газодинамическом расчете учитывалась возможность хрупкого разрушения для оболочек.

3. ОБСУЖДЕНИЕ ДАННЫХ

Основным критерием истинности получаемого в расчетах давления является удовлетворительное описание всей $R(t)$ -траектории движения оболочки экспериментального устройства. Окончательный подбор параметров расчетной схемы экспериментальной конструкции проводился по результатам рентгенографирования оболочки на ее начальной стадии движения, когда влиянием исследуемого газа можно пренебречь. Учитывались данные тестовых экспериментов по регистрации движения ударных волн по элементам экспериментального устройства. Из расчетов конструкций кроме $R(t)$ -диаграмм получены также распределения давлений $P(R)$ и температур $T(R)$ в плазме по радиусу полости. Для оценки основных термодинамических параметров сжатой плазмы авторы использовали значения давления и температуры в плазме дейтерия и его смеси с гелием в момент ее максимального сжатия, полученные усреднением расчетных значений $P(R)$ и $T(R)$ по массе.

Как следует из анализа полученных данных, в эксперименте M9 (см. рис. 4 и 5) плазма дейтерия сжата до плотности $\rho_{exp} = 2.1 \pm 0.2$ г/см³ давлением $P = 198$ ГПа при температуре $T = 4410$ К.

Для экспериментов со смесью дейтерия и гелия, M10 и M11 (см. рис. 6 и 7), результаты расчетов по УРС РФЯЦ-ВНИИЭФ для гомогенной смеси демонстрируют хорошее согласие с данными опытов, что позволило использовать их для оценки давлений. В эксперименте M10 измерена плотность сжатой плазмы гомогенной смеси дейтерия и гелия $\rho_{exp} = 1.92 \pm 0.15$ г/см³ при давлении $P = 165$ ГПа и

Таблица 2. Состояния дейтерия и смеси газов в точке фокусировки F за первой ударной волной и в точке максимального сжатия. В столбцах индексами « loc » и « $stop$ » отмечены параметры, соответствующие моментам прихода ударной волны на границу стержня $R(\text{rod}) = 0.45$ см и максимального сжатия плазмы

Опыт	t_{loc} , мкс	ρ_{loc} , г/см ³	P_{loc} , ГПа	T_{loc} , К	t_{stop} , мкс	ρ_{stop} , г/см ³	P_{stop} , ГПа	T_{stop} , К
M9	44.25	0.2470	2.643	1815	49.91	2.10 ± 0.20	198	4410
M10	48.70	0.2187	1.153	1400	53.70	1.92 ± 0.15	165	4477
M11	47.70	0.2348	1.424	1577	52.09	2.26 ± 0.15	237	5058

температуре $T = 4477$ К. В эксперименте M11 однородная смесь дейтерия и гелия сжата до плотности $\rho_{exp} = 2.26 \pm 0.15$ г/см³ давлением $P = 237$ ГПа при температуре $T = 5058$ К. Как видно на рис. 5–7, в момент времени F первая ударная волна SW+ достигает границы стержня $R(\text{rod})$ и отражается. Рассчитанные состояния (r_{loc} , P_{loc} , T_{loc}) дейтерия и смеси дейтерия с гелием на момент времени прихода ударной волны на границу стержня $R(\text{rod})$ приведены в табл. 2. Там же указаны термодинамические параметры плазмы в состоянии максимального сжатия.

Наличие дополнительного адиабатического сжатия плазмы оболочкой, кумуляции термодинамических параметров за фронтом сходящейся ударной волны и ее поглощения последующими волнами на этапе движения к центру устройства приводит к тому, что в некоторый момент времени начинается квазиизэнтропическое сжатие плазмы. По крайней мере начиная с состояния K , когда исследуемая плазма оказывается дважды сжатой, и во все последующие моменты времени получаемые экспериментальные данные можно отнести к результатам измерения квазиизэнтропической сжимаемости плазмы. Наличие стального стержня, расположенного по оси использованных экспериментальных устройств, снижает геометрическую кумуляцию и выравнивает профиль давления в полости сжатой плазмы. Как показывает анализ, только в самом начале процесса сжатия в использованных устройствах имеет место кумуляция энергии и отклонение профилей давления от усредненных по массе значений достигает 10%, а в состояниях, близких к максимальному сжатию, не превышает 4%. Это наглядно видно на рис. 8, где приведены рассчитанные распределения давлений по радиусу оболочек на момент максимального сжатия для трех описанных конструкций.

Параметры плазмы водорода [3], дейтерия и смеси газов, полученные в настоящей работе в экспериментах M9–M11 при максимальном сжатии и в

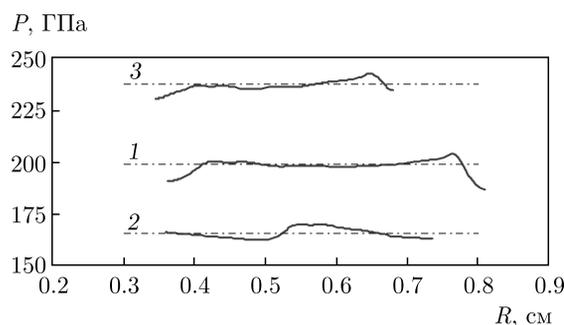


Рис. 8. Распределения давления по радиусу в плазме газов при максимальном сжатии. Расчет — УРС дейтерия [26]: 1 — $P = 198$ ГПа (опыт M9); 2 — $P = 165$ ГПа (опыт M10); 3 — $P = 237$ ГПа (опыт M11)

ряде состояний после двукратного сжатия с установившимся профилем давлений, приведены на рис. 9 вместе с экспериментальными данными по сжимаемости дейтерия из работ [4, 5]. Экспериментальная плотность из работ [3] при переходе от водорода к дейтерию удвоена. Дополнительно на рисунке приведена точка по сжимаемости дейтерия (зеленый треугольник), полученная группой С. Б. Кормера, и не опубликованная ранее¹). На рис. 9а показаны также типичные рентгенограммы проведенных опытов на моменты максимального сжатия.

Для удобства сравнения с экспериментальными данными ряд расчетов, модельных и *ab initio*, приведен отдельно на рис. 9а и 9б. Как видно на рис. 9, с учетом экспериментальной ошибки сжимаемость смеси дейтерия с небольшой добавкой гелия в экспериментах M10 и M11 практически не отличается от сжимаемости чистого дейтерия. Из общей гладкой зависимости $P(\rho)$, приведенной на рис. 9, выпадает одна точка (состояние $K3$) из работ [3]. При сохранении положения этой точки по плотности сжатой

¹ Частное сообщение сотрудника ВНИИЭФ А. П. Толочко (1926–2009).

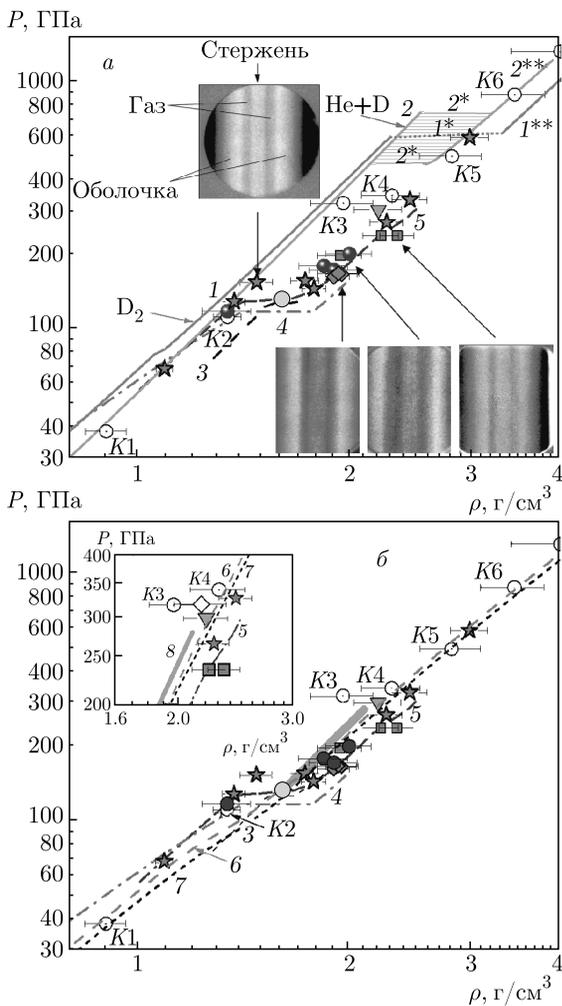


Рис. 9. (В цвете онлайн) Зависимости давления от плотности в квазиизэнтропически сжатом дейтерии и его смеси с гелием. Эксперимент: красные звездочки — [4, 5]; пустые кружки — [3]; зеленый треугольник — не опубликованная ранее точка по сжимаемости дейтерия, полученная группой Кормера. Настоящая работа: синие кружки — дейтерий (опыт M9); красные ромбы и квадраты — опыты соответственно M10 и M11 для смеси $D_2 + He$. Расчеты: 1, 1*, 1** — изэнтропа дейтерия ($S = 29.5$ Дж/г·К) с участком фазового перехода 1* (УРС SAHA [5]); 2, 2*, 2** — изэнтропа смеси, опыт M11, ($S = 23.7$ Дж/г·К) с межфазной зоной (УРС SAHA, настоящая работа); 3 — изотерма водорода $T = 1500$ К [31]; 4 — изотерма водорода $T = 5000$ К [32]; 5 — изэнтропа (REMC-модель) [33]; 6 — изэнтропа дейтерия из точки F (QMD-модель, настоящая работа); 7 — изэнтропа смеси (QMD-модель, настоящая работа); желтый кружок — критическая точка ($T_c = 1400$ К, $P_c = 130$ ГПа, $\rho_c = 1.6$ г/см³); 8 — двухфазная область диссоциативно-плазменного фазового перехода (QMD-модель [34]). На вставке: пустой ромб — скорректированное положение состояния $K3$ из работ [3]

плазмы водорода $\rho_{exp} = 0.98 \pm 0.08$ г/см³ в цитируемых работах [3] ее положение по давлению менялось от 263 до 320 ГПа. С учетом неопределенности состояния $K3$ мы провели газодинамические расчеты состояний водорода для всех устройств из работ [3] с помощью современных методов на базе моделей УРС РФЯЦ-ВНИИЭФ, которые используем при анализе результатов и в настоящей работе. Анализ полученных данных показал, что рассчитанные значения по плотности для всех устройств хорошо согласуются с данными из работ [3], но в состоянии $K3$ отличие рассчитанной плотности сжатой плазмы водорода от экспериментального значения составляет около 12%. Чтобы понять причину такой разницы, мы проанализировали согласие рассчитанных и экспериментальных $R(t)$ -данных для этого устройства, взятых из архива ВНИИЭФ. Результаты этого анализа показаны на рис. 10. Как видно на рис. 10б, расчет с использованием современных подходов хорошо описывает движение оболочки экспериментального устройства без газа.

Однако для серии из четырех экспериментов (точки 1–4 на рис. 10а) по сжимаемости водорода (состояние $K3$) расчет согласуется только с положением оболочки в момент первого рентгенографирования (точка 1 на рис. 10а), который, как видно на рисунке, не является моментом максимального сжатия. Из расчета по УРС водорода [26] следует, что в момент максимального сжатия ($t = 25.39$ мкс) минимальное значение радиуса остановки оболочки составляет величину $R_{calc} \approx 1.908$ см, и плазма водорода оказывается сжатой до плотности $\rho = 1.08$ г/см³ давлением $P = 319$ ГПа. С учетом проведенного анализа положение точки в P – ρ -координатах, соответствующее состоянию $K3$, было скорректировано. Полученные в расчете значения плотности $\rho = 1.08$ г/см³ и давления $P = 319$ ГПа показаны на вставке к рис. 9б и определяют новое положение состояния $K3$ на фазовой диаграмме.

На оценку сжимаемости водорода в состоянии $K3$ [3] могло повлиять качество рентгенографических изображений сферических полостей, полученных на пределе технических возможностей экспериментальной техники в 70-х годах прошлого века. Для сравнения на рис. 10в показаны две оригинальные рентгенограммы из экспериментов по измерению сжимаемости водорода в состоянии $K3$ [3] и изображение сжатой плазмы дейтерия с использованием современной техники. Исходя из проведенного анализа, следует признать, что в состоянии $K3$ [3], по-видимому, не удалось измерить полость обо-

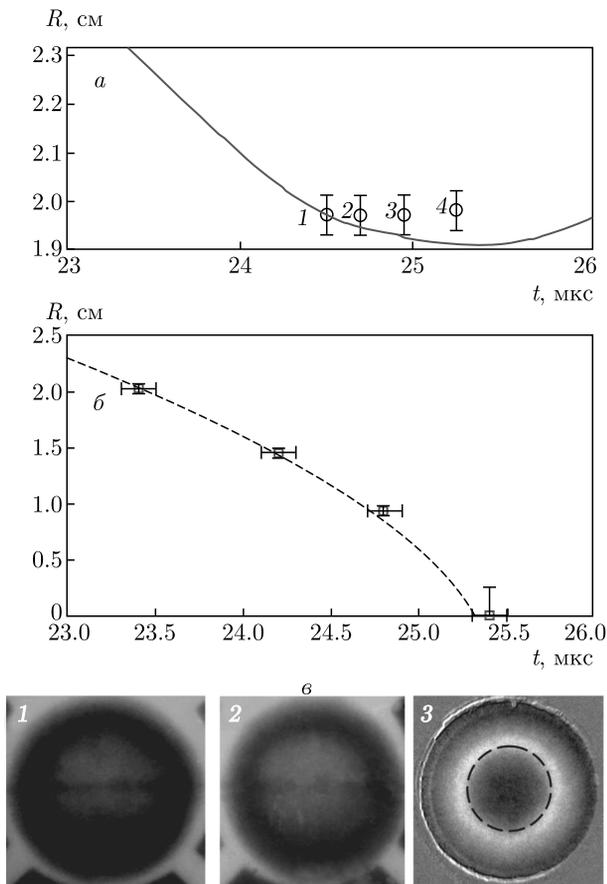


Рис. 10. а) $R(t)$ -диаграммы движения внутренней границы оболочки в экспериментальном устройстве для измерения сжимаемости водорода в состоянии КЗ: значки — эксперименты [3]; кривая — расчет по УРС водорода [26]. б) Движение внутренней границы оболочки без газа: значки — эксперименты, штрихи — расчет. в) Рентгенограммы 1 и 2 из работы [3] соответствуют точкам 1 и 2 на рис. а; 3 — изображение сферической оболочки с использованием современной техники (штрихи — граница газ-металл)

лочки в момент максимального сжатия, а опубликованное значение плотности сжатой плазмы водорода не соответствует максимальному давлению. Подтверждает этот вывод и результат неопубликованного ранее эксперимента по измерению сжимаемости дейтерия, выполненного группой Кормера. Следует также признать завышенной и точность экспериментальной ошибки результатов работ [3] для всех экспериментальных устройств.

4. РАСЧЕТЫ ПАРАМЕТРОВ ИЗЭНТРОПИЧЕСКОГО СЖАТИЯ В РАМКАХ ХИМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПЛАЗМЫ

Для анализа результатов экспериментов, выполненных в данной работе, были проведены рас-

четы изэнтропического сжатия плотного горячего гелий-дейтериевого флюида по теоретической модели SAHA, развитой для описания термодинамики сильнонеидеальной плазмы [35, 36]. Для этой цели был использован модифицированный вариант модели SAHA, хорошо зарекомендовавший себя при описании результатов предыдущей серии экспериментов по динамическому сжатию плазмы дейтерия до давлений 5000 ГПа [5, 11]. Несомненным достоинством модели SAHA применительно к расчетам плазмы гелий-дейтериевой смеси является то, что в рамках этого подхода («химическая модель плазмы») непосредственно рассчитываются параметры именно смеси, а не используются какие-либо полуэмпирические «правила смешивания» типа уравнений (3) и (4). В рамках подхода SAHA плотная и горячая плазма гелий-дейтериевой смеси описывается как многокомпонентная равновесная сильно-взаимодействующая («неидеальная») смесь атомов, молекул, атомных и молекулярных ионов и электронов. Последние могут быть частично вырожденными. Такой расчет фактически сводится к решению системы нелинейных уравнений одновременно химического и ионизационного равновесия гелия и дейтерия с учетом различных «поправок на неидеальность», учитывающих как эффект кулоновского взаимодействия ионов и электронов, так и влияние интенсивного короткодействующего отталкивания всех участников смеси (эффект «собственного объема»). При этом во всех указанных выше реакциях учитывается сдвиг равновесия вследствие частичного вырождения электронов.

Завершает эту громоздкую процедуру дополнительный расчет возможности фазовых расслоений системы. Следует подчеркнуть, что помимо расчета простых ван-дер-ваальсовых переходов типа газ-жидкость [37] (в неконгруэнтном варианте [8]) методология химической модели плазмы и, в частности, код SAHA приспособлены для описания необычных «энтропийных» (делокализационных) фазовых переходов [38] в плотном горячем гелий-водородном флюиде. В частности, это — диссоциативно-плазменный переход в водороде (дейтерии) [35], чисто плазменный переход в водороде [31] и двухстадийный плазменный переход в гелии в версии работы [39] или одностадийный, но сразу с двукратной ионизацией гелия в версии работы [40]. Это особенно важно для изучаемого в настоящей работе фазового перехода в плотном горячем гелий-дейтериевом флюиде, который, по нашим оценкам, должен быть одновременно и энтропийным, и неконгруэнтным.

Расчет по модели SAHA настоящей работы был проведен в режиме изэнтропы с начальными параметрами, соответствующими моменту фокусировки первой ударной волны на поверхности металлического стержня цилиндрического генератора настоящей конструкции для всех трех экспериментов, M9, M10 и M11 (состояния с индексом «*loc*» в табл. 2, см. выше). Результаты этих расчетов в сравнении с экспериментальными данными в координатах давление–плотность приведены на рис. 9. При этом указанные изэнтропы, соответствующие экспериментам на смеси M10 и M11 и стартующие из соответствующих состояний (ρ_{foc} , P_{foc}), оказались очень близки и по этой причине изображены на рис. 9б единой зависимостью. Изэнтропа, отвечающая эксперименту M9, оказалась близка к соответствующей изэнтропе, рассчитанной для предыдущей серии экспериментов по динамическому сжатию дейтерия [5].

Следует подчеркнуть, что, как и ранее для плазмы дейтерия [4, 5], настоящие расчеты по модели SAHA для плотного и горячего гелий–дейтериевого флюида также предсказывают наличие ФП (см. рис. 9а), но при давлениях заметно выше соответствующего скачка плотности, зафиксированного ранее [4, 5] и в настоящей работе (M9) для плазмы дейтерия. Таким образом, согласно настоящему расчету по модели SAHA, диссоциативно–плазменный ФП, предсказанный ранее для плазмы дейтерия, все еще сохраняется при добавлении к дейтерию около 20% гелия, но участок двухфазной зоны (2* на рис. 9а) заметно смещается в область более высоких давлений, а соответствующий скачок плотности для смеси оказывается меньше, чем для чистого дейтерия. На рис. 9а участок изэнтропы смеси $D_2 + He$ внутри двухфазной области не приведен точно. Такой расчет еще не реализован ввиду своей сложности, обусловленной помимо всего прочего неконгруэнтностью этого ФП, который к тому же является энтропийным (делокализационным) [38]. На рис. 11 показано сравнение результатов расчета температуры динамически сжатых дейтерия и смеси $D_2 + He$ вдоль изэнтроп, соответствующих экспериментам настоящей работы.

Расчеты проведены по модели SAHA и в рамках модификации QMD-метода [17, 41]. На рис. 11 также нанесены значения рассчитанных по УРС ВНИИЭФ температур, использованные при анализе динамики элементов экспериментального устройства и в расчетах термодинамических параметров для исследованных веществ в данной работе. Обращает на себя внимание существенное различие температур

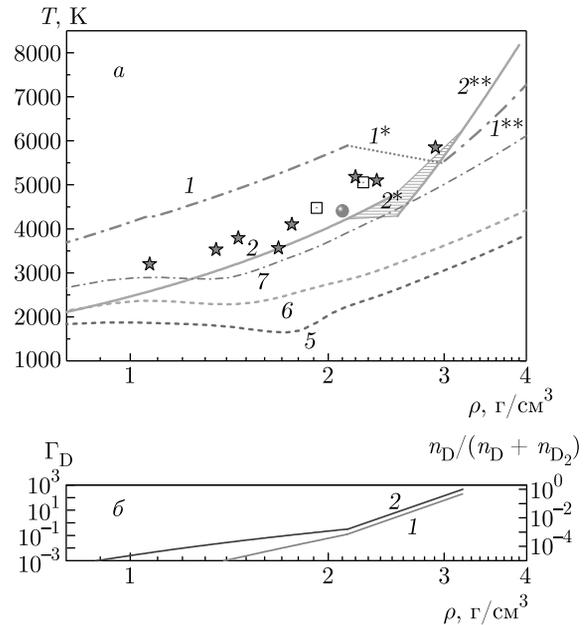


Рис. 11. (В цвете онлайн) а) Зависимости температуры от плотности квазиизэнтропически сжатого дейтерия и его смеси с гелием: красные звездочки (D_2 [5]); красный кружок (D_2) и квадраты (смесь) — настоящая работа. Расчеты (настоящая работа): 1, 1*, 1** — изэнтропа дейтерия ($S = 29.5$ Дж/г·К) с участком фазового перехода 1* (УРС SAHA); 2, 2*, 2** — изэнтропа смеси $D_2 + He$ ($S = 23.7$ Дж/г·К) с межфазной зоной 2* (УРС SAHA); 5 — изэнтропа дейтерия из точки F эксперимента M9 (QMD-метод); 6 и 7 — изэнтропы смеси $D_2 + He$ из точек F экспериментов M10 и M11 (QMD-метод). б) Параметр кулоновской неидеальности $\Gamma_D = (e^2/kT)r_D$ (кривая 1) и степень диссоциации дейтерия в смеси вдоль изэнтропы, соответствующей эксперименту M11 по модели SAHA (кривая 2)

для дейтерия (опыт M9), рассчитанных по моделям SAHA (кривая 1) и QMD-методом (кривая 5). Промежуточное положение занимают расчеты температур для дейтерия по модели ВНИИЭФ из работ [4, 5] и настоящей работы, близкие к температурам смеси в опытах M10 и M11. Отметим удовлетворительное согласие рассчитанных двумя методами температур для смеси в опыте M11 и их отличие от рассчитанных температур для опыта M10. Расчет по модели SAHA для опыта M10 практически совпадает с расчетом для опыта M11 и поэтому здесь не приведен. Кроме того, скачок степени диссоциации в смеси дейтерия и гелия (линии 2, 2*, 2** на рис. 11) в зоне ФП, рассчитанный по модели SAHA, позволяет предположить диссоциативную природу фазового превращения, произошедшего в смеси $D_2 + He$ в диапазоне $P \simeq 100\text{--}300$ ГПа в настоящих экспериментах.

Все сказанное лишний раз подчеркивает исключительную важность реализации в эксперименте дополнительного (прямого или косвенного) измерения температуры исследуемого вещества. Следует еще раз подчеркнуть, что, согласно законам термодинамики [2], соотношение термического и калорического УРС веществ таково, что для всех адиабатических процессов (включая ударное и изэнтропическое сжатие и расширение) любое сколь угодно хорошее совпадение предлагаемой теории и эксперимента в измерениях «механических» свойств — давления, плотности и внутренней энергии (P, ρ и U) — не означает для этой теории никакой точности в описании температуры испытуемого материала [6].

5. РАСЧЕТЫ ПАРАМЕТРОВ ИЗЭНТРОПИЧЕСКОГО СЖАТИЯ СМЕСИ ДЕЙТЕРИЯ И ГЕЛИЯ В РАМКАХ КВАНТОВОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Помимо химической модели плазмы в настоящей работе были проведены расчеты параметров динамического сжатия плазмы дейтерия и гелий-дейтериевой смеси посредством QMD-метода. Методика этих расчетов в настоящей работе является развитием и продолжением методики, реализованной в работе [41] и практически повторенной в [42]. Метод QMD не использует (подобно квазихимической методике SAHA) для расчетов феноменологической информации об изучаемом веществе, такой как потенциалы ионизации, энергетические спектры возбуждений связанных комплексов и т. д. Термодинамика квантовых электронов в QMD описывается с помощью метода функционала плотности (DFT) [43]. Результатом такого расчета является неоднородное пространственное распределение электронов в поле подвижных ионов. Динамика и термодинамика последних численно моделируется в рамках молекулярной динамики [44]. Обе указанные процедуры в настоящих QMD-расчетах реализованы с использованием известного пакета VASP [7] с обменно-корреляционным функционалом в обобщенно-градиентном приближении (GGA) с параметризацией PBE [45].

В сравнении с расчетами, реализованными в [41], в расчетах настоящей работы было заметно увеличено количество моделируемых частиц (ядер и электронов), что позволило существенно повысить (вычислительную) точность. Сходимость результатов проверялась по числу атомов. Все расчеты проводились в каноническом ансамбле. Температура ионов

T_i контролировалась с помощью термостата Ноэ-Гувера [44]. Равновесные термодинамические характеристики вычисляются на равновесном участке моделирования путем усреднения по конфигурациям. Это определяет статистическую погрешность моделирования. Непосредственными термодинамическими величинами, получаемыми в методе QMD в результате описанной выше процедуры атомистического моделирования, являются две главные величины — давление и внутренняя энергия как функции плотности и температуры, $P(T, \rho)$ и $U(T, \rho)$. В соответствии с методом Ферми-Зельдовича [2, 46] это позволяет восстановить, во-первых, ход изэнтропы в плоскости P - V , а во-вторых, темп изменения температуры вдоль этой изэнтропы. В расчетах настоящей работы использовался способ [41, 42], состоящий в интегрировании вдоль указанной выше изэнтропы известного термодинамического соотношения

$$\left(\frac{\partial \ln T}{\partial V}\right)_S = - \left(\frac{\partial U(P, V)}{\partial T}\right)_V^{-1} = - \left(\frac{\partial P(V, T)}{\partial T}\right)_V \left(\frac{\partial U(V, T)}{\partial T}\right)_V^{-1}. \quad (5)$$

В расчетах настоящей работы для каждого эксперимента такая изэнтропа выпускалась в плоскости P - V из точки F — условного начала изэнтропичности траектории динамического сжатия смеси в процессе реверберации ударных волн, где известна величина температуры — T_F . Такая изэнтропа для эксперимента с чистым дейтерием (опыт М9) представлена выше на рис. 9б. Что касается смеси, то по описанной выше методике были проведены расчеты параметров изэнтроп отдельно для дейтерия и гелия, а параметры для давления и энергии гелий-дейтериевой смеси получены с использованием приближенного алгоритма смешения по соотношениям (3) и (4). Из этих данных по энергии и давлению гелий-дейтериевой смеси были вычислены приближенные параметры P, ρ, T искомым изэнтроп для экспериментов М10 и М11. Результаты этих расчетов представлены в координатах $P(\rho)$ на рис. 9 и в координатах $T(\rho)$ рис. 11.

6. СРАВНЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ С РЕЗУЛЬТАТАМИ ТЕОРИИ

Проблема существования аномалий типа ФП в плотном и горячем флюиде водорода (дейтерия) и гелия имеет давнюю и достаточно противоречивую

историю. Целый ряд работ, прежде всего использующих платформу химической модели плазмы, в течение многих лет предсказывали существование «плазменного» ФП в этих условиях (см. пионерскую работу [47] и обзоры [1, 2, 31, 39, 48]). Некоторые из этих работ [49, 50] предсказывают существование плазменного ФП (в плоскости P - ρ) в непосредственной близости к месту положения разрыва плотности квазиизэнтропического сжатия в серии экспериментов [4, 5], включая и результаты настоящей работы. В качестве примера на рис. 9а приведена изотерма $T = 5000$ К из работы [31] (кривая 4). Что касается гелия, то предсказания плазменного ФП в плазме гелия делались как в варианте единого плазменного ФП с одномоментной двукратной ионизацией ($\text{He} \Leftrightarrow \text{He}^{++} + 2e$) [40], так и в варианте двух последовательных плазменных ФП раздельно на первой и второй стадиях ионизации [39]. Также, что важно, еще в работе [51] на базе химической модели плазмы детально исследовался плазменный ФП в гелий-водородной плазме во всем диапазоне пропорций гелия, но, однако, без кого-либо учета деформации параметров этого плазменного ФП из-за его неконгруэнтности [8]. Теоретические оценки величины указанной неконгруэнтности на примере популярной в астрофизических приложениях версии плазменного ФП из работ [52, 53] показывают, что масштаб указанной неконгруэнтности может быть заметным и вполне сравнимым с эмпирической величиной «гелиевого обеднения» внешних слоев атмосферы Юпитера и Сатурна. В контексте экспериментов настоящей работы важен главный вывод из расчетов работы [51] — добавление гелия существенно «подавляет» склонность к фазовому расслоению водорода, и, в свою очередь, добавление водорода аналогично «подавляет» склонность к фазовому расслоению гелия.

Подчеркнем, что результаты настоящего эксперимента (см. рис. 9) пока не дают явного подтверждения этого правила. Изэнтропа смеси $\text{D}_2 + \text{He}$ в диапазоне $P \simeq 100$ – 300 ГПа оказывается практически совпадающей с изэнтропой чистого дейтерия. Очевидно, что для прогресса в решении этой проблемы требуются дальнейшие более тщательные исследования параметров динамического сжатия смесей гелий-дейтерий с более детальной диагностикой, прежде всего с измерением температуры изэнтропически сжатой и нагретой плазмы смеси.

Если вернуться к теории, то помимо упомянутой выше химической модели плазмы достаточно категоричные утверждения о возможности фазовых расслоений в водороде (и меньше в гелии) и, соответ-

ственно, в гелий-водородной смеси были получены в последние десятилетия благодаря стремительному прогрессу вычислительной техники в рамках более строгих подходов с использованием методов прямого численного моделирования. Так, еще в 2003 г. в работе [33] с использованием метода функционала плотности в плазме водорода получались разрывные изотермы. Одна из них ($T = 1500$ К) в качестве примера приведена на рис. 9а (кривая 3). Еще более поразительный результат уже непосредственно на изэнтропе, практически совпадающей с $P(\rho)$ -траекторией экспериментов [4, 5], был получен в прямом моделировании водородного флюида в REMC-ансамбле [32]. Подчеркнем, что помимо разрывоподобной аномалии в ходе изэнтропы, показанной на рис. 9а (кривая 5), REMC-моделирование [32] предсказывает показательно низкий и к тому же монотонно убывающий при сжатии уровень температуры на рассчитанной изэнтропе ($T = 800$ – 1200 К).

Переходя к теоретическим расчетам настоящей работы, отметим, что, как и ранее [4, 5], расчеты по модели SANA предсказывают для изэнтропы дейтерия, выходящей из точки F (фокусировка первой ударной волны на границе центрального стержня), наличие двух ветвей, низкого и высокого давления, и ФП между ними, правда, при заметно более высоком давлении, чем в экспериментах [4, 5]. Важно то, что при переходе к описанию сжатия в гелий-дейтериевой смеси этот переход сохраняется, но, так же как и в расчетах работы [51], двухфазная зона перехода, во-первых, заметно сдвигается в область более высоких давлений, а во-вторых, сжимается, т. е. ветви 2–2** на рис. 9а сближаются в сравнении с 1–1**.

Что же касается подхода *ab initio* QMD, то, как видно из рис. 9а, изэнтропа, вычисленная в рамках этого подхода как для чистого дейтерия, так и для гелий-дейтериевой смеси, не содержит в районе 100–1000 ГПа никаких разрывов типа ФП. Однако отсюда не следует, что QMD-расчеты противоречат экспериментальным данным настоящей работы. Напротив, многие варианты подходов *ab initio* (см. обзор [54]), включая QMD и квантовый метод Монте-Карло (QMC) [34, 55], вплоть до самых последних результатов QMD- и QMC-моделирования [56, 57], уверенно предсказывают существование диссоциативно-плазменного ФП.

В работе [58] подчеркивалось, что этот ФП расположен именно в том диапазоне давлений и плотностей, где на протяжении многих лет фиксируется разрывная аномалия в экспериментах ВНИИЭФ при квазиизэнтропическом сжатии водорода (дейтерия) [3–5]. Это показано на рис. 9, где нанесены

критическая точка обсуждаемого ФП в версии работы [34] с параметрами $T_c = 1400$ К, $P_c = 130$ ГПа, $\rho_c = 1.6$ г/см³ и полоса его двухфазной области в диапазоне $1000 \text{ К} \leq T \leq 3000 \text{ К}$ в версии работы [56]. Примечательно, что эта относительно узкая зона двухфазной области практически совпадает в $P(\rho)$ -координатах с траекторией квазиизэнтропического сжатия дейтерия настоящей работы и предшествующих экспериментов [3–5] с той только принципиальной разницей, что температура вдоль указанной полосы двухфазной области с ростом давления монотонно убывает, в противоположность монотонному росту, ожидаемому вдоль изэнтропы сжатия в настоящих экспериментах. Как подчеркивалось в работах [37, 38, 58], это может быть объяснено аномальным характером термодинамики горячего плотного флюида водорода (дейтерия) в обсуждаемой зоне параметров. Эта аномальность [38], реализующаяся, в частности, как отрицательность коэффициента Грюнайзена, в общем контексте свойств плотного горячего вещества обсуждалась в [2, 59, 60]. Конкретно для водорода в диапазоне давлений 40–75 ГПа и температур 3500–7500 К наличие такой аномалии на основе существующих данных обсуждалось в работе [61]. Эта сложная проблема требует отдельного подробного анализа. Пока следует, видимо, ограничиться выводом о частичной противоречивости существующих экспериментальных и теоретических данных в обсуждаемой области [58].

7. ЗОНЫ НЕСМЕСИМОСТИ

Как уже подчеркивалось во Введении, при переходе от чистых дейтерия и гелия к их смеси помимо деформации и сдвига параметров уже существующих в них фазовых переходов возможен дополнительный ФП, присущий именно смеси, — появление зон несмесимости. Этот переход, по определению, является неконгруэнтным, т. е. с различием химических пропорций в сосуществующих фазах. Параметры этих зон несмесимости в гелий-водородной смеси рассчитывались неоднократно с применением, в основном, подходов *ab initio* (см. работы [62–64] и ссылки там). Эти расчеты все еще содержат большую долю неопределенности из-за высокой чувствительности параметров границы зоны расслоения к деталям приближений, принятых при вычислениях в указанных вариантах подходов. Но следует подчеркнуть, что обе точки для смеси в экспериментах М10 и М11, согласно их параметрам, приведенным в табл. 2, оказываются глубоко в двухфазной области

несмесимости, приведенной в работах [62, 64]. Более того, обсуждаемая зона несмесимости столь обширна, что изэнтропа смеси $D_2 + He$, реализованная в настоящих экспериментах, входит в эту зону в районе $P \simeq 100$ ГПа и остается в этой зоне двухфазных состояний до достаточно высоких давлений (по оценкам на основе модели SANA до $P \geq P^* \simeq 1000$ ГПа).

Подчеркнем, что, как известно [2], такой вход и выход изэнтропы в двухфазную область должен сопровождаться заметным изломом ее наклона в P - V -плоскости, т. е. сжимаемости. Это обстоятельство, как и то, что и в чистом дейтерии траектория, описывающая квазиизэнтропическую реверберацию ударных волн, пересекает в этом же диапазоне параметров межфазную границу диссоциативно-плазменного фазового перехода [3–5] (см. рис. 11), с особой остротой ставит вопрос о корректности расчета газодинамики сжимаемой смеси $D_2 + He$ с помощью УРС ВНИИЭФ, которое не содержит такого ФП. Важно, что с помощью именно этих расчетов в экспериментах настоящей работы определяется давление и оценивается температура, приведенные в табл. 2. Анализ этой проблемы ввиду своей сложности выходит за рамки настоящей статьи. Также кажется очевидной необходимость внедрения дополнительного альтернативного расчета газодинамики сжимаемой смеси $D_2 + He$ с помощью УРС SANA с полным учетом диссоциативно-плазменного ФП в его корректной версии, полностью учитывающей неконгруэнтность фазовых превращений в гелий-водородных (дейтериевых) смесях.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе с использованием оригинальных цилиндрических устройств впервые измерена квазиизэнтропическая сжимаемость смеси дейтерия (80 % по массе) и гелия (20 % по массе) в диапазоне давлений 150–250 ГПа и «чистого» дейтерия при давлении $P \approx 200$ ГПа. Анализ полученных данных показал, что профили термодинамических величин сжатой плазмы, определенные с использованием двухкаскадного цилиндрического экспериментального устройства, имеют при максимальном сжатии разброс не более 4%, а их рассчитанные средние величины не зависят от вариантов расчета прочностных процессов конструкции. Экспериментальные данные по квазиизэнтропической сжимаемости «чистого» дейтерия и его смеси с гелием, полученные в диапазоне давлений 150–250 ГПа на новых прецизионных устройствах, подтверждают

сделанный ранее вывод о наличии в квазиизэнтропически сжатом дейтерии ФП в области давлений 150–160 ГПа и свидетельствуют о том, что этот ФП сохраняется в смеси дейтерия с гелием. На основе современных моделей УРС, используемых в настоящее время в РФЯЦ-ВНИИЭФ, проведены анализ и коррекция результатов пионерских экспериментов группы Кормера по сжимаемости водорода, выполненных в 70-х годах прошлого века [3]. На основе этого анализа и с учетом неопубликованного ранее результата еще одного эксперимента группы Кормера по сжимаемости дейтерия показано хорошее согласие всей совокупности данных экспериментов, выполненных ранее во ВНИИЭФ, и настоящей работы.

С использованием двух теоретических моделей проведены расчеты параметров изэнтропического сжатия гелий-дейтериевой смеси. Расчеты по химической модели плазмы (код SAHA) предсказывают диссоциативно-плазменный ФП со скачком плотности, близким к экспериментальному, но при более высоких давлениях. Расчеты *ab initio* параметров $P(\rho)$ изэнтропы на основе QMD находятся, в целом, в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными, но не воспроизводят зафиксированный в них ФП. Сравнение результатов расчета, проведенного в рамках двух теоретических подходов, показывает высокую степень неопределенности нашего знания температуры квазиизэнтропически сжатой гелий-дейтериевой смеси, в очередной раз подчеркивая острую необходимость дополнения существующей методики регистрации сжимаемости плазмы независимыми измерениями ее температуры.

Опираясь на проведенные теоретические расчеты параметров динамически сжатой плазмы смеси гелия и дейтерия, мы имеем все основания полагать, что полученные в эксперименте мегабарные состояния гелий-дейтериевой плазмы находятся глубоко в области несмесимости этих компонент — гелия и дейтерия, — уверенно предсказываемой сегодня большинством методик *ab initio*. Изучение влияния этого обстоятельства на корректный расчет газодинамики динамического сжатия является первостепенной по важности задачей для дальнейшего прогресса экспериментального подхода, традиционно развиваемого в РФЯЦ-ВНИИЭФ.

Благодарности. Авторы признательны сотрудникам, принимавшим участие в организации, проведении экспериментов и обработке полученных данных: А. Б. Профе, А. И. Лебедеву, С. Е. Елфимо-

ву, Р. В. Борисову, Е. П. Волкову, Р. В. Тилькунову, О. А. Есину, В. В. Ковалдову, А. В. Романову, Д. П. Турутину, А. С. Пупкову, Г. С. Яндубаеву, И. А. Блинову, М. В. Логинову, Е. В. Шевнину, А. И. Гуркину. Авторы выражают благодарность А. В. Шутову за результаты газодинамических расчетов с использованием УРС SAHA, а также А. Б. Медведеву за плодотворные обсуждения проблемы аномальных термодинамических свойств плотного горячего водорода (дейтерия) в зоне мегабарных давлений.

Финансирование. Настоящая работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-02-00287) и Министерства науки и высшего образования России (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785).

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Е. Фортов *Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе*, Физматлит, Москва (2010).
2. В. Е. Фортов, *Термодинамика динамических воздействий на вещество*, Физматлит, Москва (2019).
3. Ф. В. Григорьев, С. Б. Кормер, О. Л. Михайлова, А. П. Толочко, В. Д. Урлин, Письма в ЖЭТФ **16**, 286 (1972); ЖЭТФ **69**, 743 (1975); ЖЭТФ **75**, 1683 (1978).
4. V. E. Fortov, R. I. Il'kaev, V. A. Arinin, V. V. Bur-tzev, V. A. Golubev, I. L. Iosilevskiy, V. V. Khrus-talev, A. L. Mikhailov, M. A. Mochalov, V. Ya. Ternovoi, and M. V. Zhernokletov, Phys. Rev. Lett. **99**, 185001 (2007).
5. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, А. О. Бликов, В. А. Огородников, В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, ЖЭТФ **152**, 1113 (2017).
6. И. Л. Иосилевский, Ю. Г. Красников, Э. Е. Сон, В. Е. Фортов, *Термодинамика и транспорт в неидеальной плазме*, Изд-во МФТИ, Москва (2000).
7. И. Л. Иосилевский, В. К. Грязнов, А. М. Семенов, Е. С. Якуб, Л. Н. Горохов, В. С. Юнгман, А. Ю. Башарин, М. В. Брыкин, М. А. Шейндлин, В. Е. Фортов, Изв. РАН, Энергетика **5**, 115 (2011).
8. I. Iosilevskiy, V. Gryaznov, E. Yakub, C. Ronchi, and V. Fortov, Contrib. Plasma Phys. **43**, 316 (2003).

9. И. Иосилевский, *Физика неидеальных кулоновских систем: Уравнение состояния и фазовые переходы* (in Russian), Saarbrücken, Germany, Lambert Acad. Publ. (2011).
10. В. К. Грязнов, И. Л. Иосилевский, В. Е. Фортов, в сб. *Ударные волны и экстремальные состояния вещества*, под ред. В. Е. Фортова, Л. В. Альтшулера, Р. Ф. Трунина, А. И. Фунтикова, Наука, Москва (2000), с. 299 [V. K. Gryaznov, I. L. Iosilevskiy, and V. E. Fortov, in *High-Pressure Shock Compression of Solids VII: Shock Waves and Extreme States of Matter*, ed. by V. E. Fortov, L. V. Al'tshuler, R. F. Trunin, and A. I. Funtikov, Springer-Verlag, New York (2004), p. 437].
11. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, Ю. М. Макаров, В. А. Аринин, С. К. Гришечкин, А. О. Бликов, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, В. К. Грязнов, Письма в ЖЭТФ **92**, 336 (2010).
12. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, Ю. М. Макаров, В. А. Аринин, А. О. Бликов, А. Ю. Баурин, В. А. Комраков, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, Е. А. Пронин, А. А. Юхимчук, ЖЭТФ **142**, 696 (2012).
13. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Раевский, В. А. Огородников, А. А. Юхимчук, А. И. Давыдов, Н. Н. Анашкин, В. А. Аринин, А. О. Бликов, А. Ю. Баурин, Н. Б. Давыдов, В. А. Комраков, А. И. Логвинов, С. Ф. Маначкин, А. В. Рыжков, Б. И. Ткаченко, А. В. Федоров, С. А. Финюшин, Д. А. Калашников, Е. А. Чудаков, Е. А. Пронин, Е. А. Бакулина, ЖЭТФ **146**, 169 (2014).
14. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, В. А. Комраков, А. В. Рыжков, В. А. Огородников, А. А. Юхимчук, Письма в ЖЭТФ **101**, 575 (2015).
15. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, В. А. Комраков, И. П. Максимкин, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, Письма в ЖЭТФ **107**, 173 (2018).
16. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов, А. Л. Михайлов, В. А. Аринин, А. О. Бликов, В. А. Огородников, А. В. Рыжков, В. А. Комраков, И. П. Максимкин, Письма в ЖЭТФ **108**, 692 (2018).
17. G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993).
18. G. Kresse and J. Furthmuller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
19. Yu. P. Kuropatkin, V. D. Mironenko, V. N. Suvorov, D. I. Zenkov, and B. F. Tkachenko, in *11th IEEE Pulsed Power Conf.* (29 June–2 July 1997, Baltimore, Maryland, USA), *Digest of Technical Papers*, ed. by G. Cooperstein and I. Vitkovitsky, p. 1669.
20. А. О. Бликов, М. А. Мочалов, В. А. Огородников, В. А. Комраков, Патент (RU) 2471545 С1, Бюлл. изобрет. № 1, 10.01.2013.
21. В. А. Огородников, А. Г. Иванов, А. Л. Михайлов, Н. И. Крюков, А. П. Толочко, В. А. Голубев, ФГВ **34**, 103 (1998).
22. А. N. Golubkov, A. A. Kononenko, and A. A. Yul'khimchuk, Fusion Sci. Technol. **48**, 527 (2005).
23. В. В. Сычев, А. А. Вассерман, А. Д. Козлов, Г. А. Спиридонов, В. А. Цымарный, *Термодинамические свойства гелия*, ГСССД, Изд-во стандартов, Москва (1984).
24. A. Michels, W. De Graaff, T. Wassenaar, J. M. H. Levelt, and P. Louwerse, Physica **25**, 25 (1959).
25. V. A. Arinin and B. I. Tkachenko, Pattern Recognition and Image Analysis **19**, 63 (2009).
26. В. П. Копышев, В. В. Хрусталева, ПМТФ **21**, 122 (1980).
27. Н. Ф. Гаврилов, Г. Г. Иванова, В. И. Селин, В. Н. Софронов, ВАНТ, сер. Методики и программы числ. решения задач матем. физ. вып. 3, 11 (1982).
28. В. П. Копышев, ПМТФ **12**(1), 119 (1971).
29. Л. И. Седов, *Механика сплошной среды*, Наука, Москва (1984).
30. И. Р. Трунин, С. В. Корицкая, В. Арнолд, Препринт 75-2000, Саров (2000).
31. S. Scandolo, Proc. Nat. Acad. Sci. **100**, 3051 (2003).
32. D. Beule, W. Ebeling, A. Forster, H. Juranek, R. Redmer, and G. Ropke, Contrib. Plasma Phys. **39**, 21 (1999).
33. V. S. Filinov, P. R. Levashov, A. V. Botsan, M. Bonitz, and V. E. Fortov, J. Phys. A **42**, 214002 (2009); P. R. Levashov, V. S. Filinov, A. Botan, M. Bonitz, and V. E. Fortov, J. Phys. Conf. Ser. **121**, 012012 (2008).
34. W. Lorenzen, B. Holst, and R. Redmer, Phys. Rev. B **82**, 195107 (2010).
35. V. K. Gryaznov and I. L. Iosilevskiy, J. Phys. A **42**, 214007 (2009).

36. V. K. Gryaznov, I. L. Iosilevskiy, and V. E. Fortov, *Contrib. Plasma Phys.* **50**, 77 (2010).
37. I. Iosilevskiy, in *Physics of Extreme States of Matter*, ed. by V. Fortov et al., IPCP RAS, Russia, Chernogolovka (2013), p. 136, arXiv:1403.8053v3.
38. I. L. Iosilevskiy, *J. Phys. Conf. Series* **653**, 012077 (2015).
39. W. Ebeling, A. Förster, V. E. Fortov, V. K. Gryaznov, and A. Ya. Polishuk, *Thermophysical Properties of Hot Dense Plasmas*, B. G. Teubner Verlagsgesellschaft, Stuttgart–Leipzig (1991) [В. Эбеллинг, А. Фёрстер, В. Фортов, В. Грязнов, А. Полищук, *Термофизические свойства горячей плотной плазмы*, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, Москва–Ижевск (2007)].
40. C. Winisdoerffer and G. Chabrier, *Phys. Rev. E* **71**, 026402 (2005).
41. A. V. Chentsov and P. R. Levashov, *Contrib. Plasma Phys.* **52**, 33 (2012).
42. A. Becker, N. Nettelmann, B. Holst, and R. Redmer, *Phys. Rev. B* **88**, 045122 (2013).
43. R. M. Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*, Cambridge Univ. (2020).
44. S. J. Nosé, *J. Chem. Phys.* **81**, 511 (1984).
45. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
46. В. Е. Фортов, *Физика высоких плотностей энергии*, Физматлит, Москва (2013).
47. Г. Э. Норман, А. Н. Старостин, *ТВТ* **6**, 410 (1968).
48. И. Л. Иосилевский, А. Н. Старостин, в сб. *Энциклопедия низкотемпературной плазмы*, т. 1, под ред. В. Е. Фортова, Наука, Москва (2000), с. 327.
49. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, *ЖЭТФ* **146**, 518 (2014).
50. А. А. Пяллинг, *ТВТ* **48**, 181 (2010).
51. M. Schlages, M. Bonitz, and A. Tschtschjan, *Contrib. Plasma Phys.* **35**, 109 (1995).
52. D. Saumon, G. Chabrier, and H. M. Van Horn, *Astrophys. J. (Suppl)* **99**, 713 (1995).
53. А. В. Украинец, И. Л. Иосилевский, в сб. *Физика экстремальных состояний вещества*, под ред. В. Е. Фортова, Изд-во ИПХФ РАН, Черноголовка (2005), с. 181.
54. J. M. McMahon, M. A. Morales, C. Pierleoni, and D. M. Ceperley, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1607 (2012).
55. M. A. Morales, C. Pierleoni, E. Schwegler, and D. M. Ceperley, *PNAS USA* **107**, 12799 (2010).
56. G. Mazzola, R. Helled, and S. Sorella, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 025701 (2018).
57. H. Y. Geng, Q. Wu, M. Marqués, and G. J. Ackland, *Phys. Rev. B* **100**, 134109 (2019).
58. И. Л. Иосилевский, *Аномальная термодинамика и проблема фазовых переходов в плотном и горячем водороде (дейтерии)*, Межд. конф. «XXI Харитоновские тематические научные чтения», Россия, Саров, 15–19 апреля 2019 г. (пленарный доклад).
59. А. Б. Медведев, Р. Ф. Трунин, *УФН* **182**, 829 (2012).
60. M. P. Desjarlais, M. D. Knudson, and R. Redmer, *Phys. Rev. B* **101**, 104101 (2020).
61. А. Б. Медведев, *ФГВ* **54**(2), 98 (2018).
62. M. A. Morales, S. Hamel, K. Caspersen, and E. Schwegler, *Phys. Rev. B* **87**, 174105 (2013).
63. B. Militzer, *Phys. Rev. B* **87**, 014202 (2013).
64. M. Schöttler and R. Redmer, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 115703 (2018).

АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ ТОМА 159 ЗА 2021 г.

		Вып. Стр.			Вып. Стр.
А					
Абрамов И. С., Господчиков Е. Д., Шалашов А. Г. Источник экстремально-го ультрафиолетового излучения на основе разряда, поддерживаемого импульсом излучения терагерцевого лазера на свободных электронах	2	270	Баранцев К. А., Литвинов А. Н., Пазгалёв А. С., Вершовский А. К. Эффект встречной поляризации ансамбля щелочных атомов при оптической накачке: исследование при учете движения атомов	2	231
Аверкиев Н. С. (см. Сарычев М. Н.) ..	5	892	Бараш Л. Ю. (см. Гаврилина А. А.) ...	2	359
Авчян Б. Р., Казарян А. Г., Саргсян К. А., Седракян Х. В. Отклик высших гармоник интенсивного когерентного электромагнитного поля на изменение топологии поверхности Ферми в графеноподобных наносистемах	6	1003	Бараш Ю. С. Осцилляторы с затуханием в рамках общей теории сил Казимира и Ван дер Ваальса	4	761
Агафонова Н. Ю., Мальгин А. С. О механизме температурных вариаций средней энергии мюонов на больших глубинах	1	88	Бахметьев М. В., Таланцев А. Д., Моргунов Р. Б. Резкое изменение обменного смещения и симметрии магнитной анизотропии при допороговом количестве межслойной меди в гетероструктурах NiFe/Cu/IrMn	5	963
Агринская Н. В. (см. Шумилин А. В.) ..	5	915	Башаров А. М. (см. Трубилко А. И.) ..	2	262
Альянова Н. В. (см. Бетеров И. И.) ...	3	409	Бедин С. А. (см. Разумовская И. В.) ...	5	924
Анисимов В. И. (см. Чернов Е. Д.)	4	644	Безус А. В. (см. Сирюк Ю. А.)	3	500
Аплеснин С. С. (см. Романова О. Б.) ..	5	938	Белинский А. В., Сингх Р. Встречное четырехфотонное смешивание в формировании фантомных изображений	2	258
Арбеков И. М., Молотков С. Н., Синильщиков И. В. О простом эвристическом выводе формулы Шеннона для канала связи с непрерывными переменными в квантовом случае	3	434	Белотелов В. И. (см. Полулях С. Н.) ..	2	307
Аринин В. А. (см. Мочалов М. А.)	6	1118	Беляков В. А. Линии Косселя и рентгеновские локализованные конические моды	3	387
Асадчиков В. Е. (см. Тихонов А. М.) ..	1	5	Бержанский В. Н. (см. Полулях С. Н.) ..	2	307
Асегуинолаза И. Р. (см. Блинов М. И.) ..	3	546	Бетеров И. И., Якшина Е. А., Третьяков Д. Б., Энтин В. М., Альянова Н. В., Митянин К. Ю., Рябцев И. И. Реализация однокубитовых квантовых операций на СВЧ-переходе в одиночном атоме рубидия в оптической дипольной ловушке	3	409
Астапенко В. А., Кротов Ю. А., Сахно Е. В. Возбуждение квантового осциллятора заряженными частицами	5	877	Бланко М. В. (см. Тихонов А. М.)	1	5
Б					
Бабаев А. Б. (см. Муртазаев А. К.)	6	1041	Бленцки Я. (см. Савин С. П.)	2	339
Бабенко П. Ю. (см. Зиновьев А. Н.) ...	1	56	Бликов А. О. (см. Мочалов М. А.)	6	1118
Багров В. Г. (см. Шишмарев А. А.)	2	297	Блинов М. И., Черненко В. А., Прудников В. Н., Асегуинолаза И. Р., Барандиаран Ж. М., Ладеранта Э., Ховайло В. В., Грановский А. Б. Магнитотранспортные свойства тонких пленок Ni _{49.7} Fe _{17.4} Co _{4.2} Ga _{28.7}	3	546
Бакурский С. В. (см. Ружицкий В. И.) ..	5	903			
Балагуров Б. Я. Проводимость двумерной модели Рэля при критической концентрации — пороге протекания	3	553			
Барандиаран Ж. М. (см. Блинов М. И.) ..	3	546			

Болотов М. И., Смирнов Л. А., Бубнова Е. С., Осипов Г. В., Пиковский А. С. Пространственно-временные режимы в системе неидентичных осцилляторов Курамото–Баттогтоха	1	150
Бондаревская А. С. (см. Сарычев М. Н.)	5	892
Бреев А. И., Гитман Д. М. Безмассовые электронные возбуждения в графене в окрестности кулоновских примесей ...	6	1070
Бубнова Е. С. (см. Болотов М. И.)	1	150

В

Ванг Ч. (см. Савин С. П.)	2	339
Васильев А. Н. (см. Глазкова Я. С.) ...	3	511
Васильев Е. В. (см. Шленов С. А.)	3	400
Вершовский А. К. (см. Баранцев К. А.)	2	231
Ветошко П. М. (см. Полулях С. Н.) ...	2	307
Виноградов А. Ю. (см. Ясников И. С.)	3	473
Волков Ю. О. (см. Тихонов А. М.)	1	5
Волкова О. С. (см. Глазкова Я. С.)	3	511
Высоцкий В. И., Высоцкий М. В. Особенности бездиссипативного каналирования движущихся заряженных частиц около проводника с током	1	25
Высоцкий М. В. (см. Высоцкий В. И.)	1	25

Г

Гаврилина А. А., Бараш Л. Ю. Моделирование нестационарных неустойчивостей Бенара–Марангони в испаряющихся летучих каплях на нагретой подложке ..	2	359
Галкина Е. Г., Иванов Б. А., Кулагин Н. Е., Лерман Л. М., Ястремский И. А. Динамика доменных стенок в киральных магнетиках	4	671
Гапочка А. М. (см. Глазкова Я. С.)	3	511
Гаркушин Г. В. (см. Канель Г. И.)	3	524
Герчиков Л. Г., Ипатов А. Н. Вращательная дипольная плазмонная мода в наноразмерных полупроводниковых частицах	6	1047
Гитман Д. М. (см. Бреев А. И.)	6	1070
Гитман Д. М. (см. Шишмарев А. А.) ..	2	297
Глазкова Я. С., Русаков В. С., Соболев А. В., Гапочка А. М., Губайдулина Т. В., Волкова О. С., Васильев А. Н., Пресняков И. А. Магнитные сверхтонкие взаимодействия зондовых атомов ^{57}Fe в манганитах $\text{CaCu}_x\text{Mn}_{7-x}\text{O}_{12}$ ($0 \leq x \leq 1$)	3	511

Гогина А. А., Рыбкин А. Г., Шикин А. М., Тарасов А. В., Петацча Л., Ди Санто Г., Елисеев И. А., Лебедев С. П., Давыдов В. Ю., Климовских И. И. Модификация электронной структуры квазисвободного графена при адсорбции и интеркаляции атомов Mn .	6	1028
Господчиков Е. Д. (см. Абрамов И. С.)	2	270
Грановский А. Б. (см. Блинов М. И.) .	3	546
Григорьев Ю. В. (см. Разумовская И. В.)	5	924
Грязнов В. К. (см. Мочалов М. А.)	6	1118
Губайдулина Т. В. (см. Глазкова Я. С.)	3	511
Гудков В. В. (см. Сарычев М. Н.)	5	892

Д

Давидович М. В. Возможны ли изотропные метаматериалы и метаматериалы с отрицательными проницаемостями ϵ и μ ?	2	195
Давыдов В. Ю. (см. Гогина А. А.)	6	1028
Данилович Н. (см. Миладинович Т. Б.)	5	851
Джавед Ф. (см. Шариф М.)	3	457
Джаякумар К. (см. Калпана П.)	5	930
Ди Санто Г. (см. Гогина А. А.)	6	1028
Дровосеков А. Б. (см. Кузнецов М. А.)	1	95

Е

Егранов А. В. (см. Сарычев М. Н.)	5	892
Елисеев И. А. (см. Гогина А. А.)	6	1028
Емельянов А. Н., Шахрай Д. В., Ким В. В. Об оценке параметров критической точки фазового перехода жидкость–пар металлов из экспериментов по изоэнтропическому расширению ударно-сжатых пористых образцов	1	120
Еремич М. З. (см. Миладинович Т. Б.)	5	851
Ерунов С. В. (см. Мочалов М. А.)	6	1118

Ж

Жевстовских И. В. (см. Сарычев М. Н.)	5	892
---------------------------------------	---	-----

З

Заболотский А. А. Солитоны в хиральной среде	3	424
Зеленый Л. М. (см. Савин С. П.)	2	339
Зиновьев А. Н., Бабенко П. Ю., Шергин А. П. Динамическая ионизация и оже-переходы в квазимолекуле при столкновениях Ne^+-Ne	1	56

И

- Иванов Б. А.** (см. Галкина Е. Г.) 4 671
Илькаев Р. И. (см. Мочалов М. А.) 6 1118
Иосилевский И. Л. (см. Мочалов М. А.) 6 1118
Ипатов А. Н. (см. Герчиков Л. Г.) 6 1047
Ишханян А. М., Крайнов В. П. Ван-дер-ваальсово притяжение атомов водорода 6 1013

К

- Каган М. Ю.** (см. Кузнецов Е. А.) 4 794
Каган М. Ю., Мазур Е. А. Капли параметра порядка в электронной системе малой плотности с притяжением в присутствии сильного случайного потенциала . 4 696
Казарян А. Г. (см. Авчян Б. Р.) 6 1003
Казарян А. Г. Генерация высших гармоник когерентного субтерагерцевого излучения при переходе Лифшица в двухслойном графене со щелью 5 952
Калмыков П. Н. (см. Мягков Н. Н.) ... 2 216
Калпана П., Джаякумар К. Примесные состояния в нанопроводе на основе квантовой ямы в магнитном полупроводнике с анизотропным конфайнментом 5 930
Камчатнов А. М. Число солитонов, порождаемых из интенсивного начального импульса при асимптотически больших временах 1 76
Канель Г. И., Савиных А. С., Гаркушин Г. В., Разоренов С. В. Высокоскоростная деформация титана в ударных волнах при нормальной и повышенной температурах 3 524
Капшуков Р. А. (см. Сирюк Ю. А.) ... 3 500
Кац Е. И. Комбинированные дефекты в ферроэлектрических нематиках 4 735
Ким В. В. (см. Емельянов А. Н.) 1 120
Кленов Н. В. (см. Ружицкий В. И.) ... 5 903
Климов С. И. (см. Савин С. П.) 2 339
Климовских И. И. (см. Гогина А. А.) . 6 1028
Ковалец Н. П. (см. Разумовская И. В.) 5 924
Козак Л. (см. Савин С. П.) 2 339
Козловский А. В. Тригонометрические операторы разности фаз квантовых электромагнитных полей 2 244
Козуб В. И. (см. Шумилин А. В.) 5 915
Компанец В. О. (см. Шленов С. А.) ... 3 400
Комраков В. А. (см. Мочалов М. А.) .. 6 1118

- Кондратенко П. С., Матвеев А. Л., Обухов Ю. Н.** Асимптотическая теория анизотропной классической диффузии в неоднородных средах 4 719
Кондратенко П. С., Матвеев А. Л. Неклассический перенос примеси в модели Дыхне с параметрами, зависящими от координат. Принцип Ферма 4 724
Кононеко В. В. (см. Сирюк Ю. А.) 3 500
Копп М. И., Тур А. В., Яновский В. В. Гидромагнитные неустойчивости в неоднородно вращающемся слое электропроводящей наножидкости 6 1090
Крайнов В. П. (см. Ишханян А. М.) ... 6 1013
Кричевер И., Некрасов Н. К вопросу о наперстках Лефшеца в сигма-моделях, I 4 822
Кротов Ю. А. (см. Астапенко В. А.) ... 5 877
Куделькин В. Г. (см. Мочалов М. А.) . 6 1118
Кузнецов Е. А., Каган М. Ю. Симметричный подход в задаче о расширении газов в вакуум 4 794
Кузнецов М. А., Дровосеков А. Б., Фраерман А. А. Магнитокалорический эффект в наносистемах на основе ферромагнетиков с различными температурами Кюри 1 95
Кукушкин А. Б., Куличенко А. А., Соколов А. В. Законы подобия для функции Грина нестационарного супердиффузионного переноса: прогулки Леви и полеты Леви 5 978
Кулагин Н. Е. (см. Галкина Е. Г.) 4 671
Куличенко А. А. (см. Кукушкин А. Б.) 5 978

Л

- Ладеранта Э.** (см. Блинов М. И.) 3 546
Лапичев Н. В. (см. Мягков Н. Н.) 2 216
Лебедев С. П. (см. Гогина А. А.) 6 1028
Левашов П. Р. (см. Мочалов М. А.) ... 6 1118
Левин А. Д. (см. Шишмарев А. А.) 2 297
Лежен Л. А. (см. Савин С. П.) 2 339
Леонтьев А. И. (см. Мягков Н. Н.) 2 216
Лерман Л. М. (см. Галкина Е. Г.) 4 671
Ли Х. (см. Савин С. П.) 2 339
Литвинов А. Н. (см. Баранцев К. А.) .. 2 231
Лукоянов А. В. (см. Чернов Е. Д.) 4 644
Ляхов В. В. (см. Савин С. П.) 2 339

М

- Мазур Е. А.** (см. Каган М. Ю.) 4 696

- Макаров Г. Н., Петин А. Н. Лазерная изотопно-селективная ИК-диссоциация молекул с небольшим изотопическим сдвигом в спектрах поглощения в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения 2 281
- Максимкин И. П. (см. Мочалов М. А.) 6 1118
- Максимовская А. А. (см. Ружицкий В. И.) 5 903
- Мальгин А. С. (см. Агафонова Н. Ю.) 1 88
- Мальцев А. Я., Новиков С. П. Скобки Пуассона гидродинамического типа и их обобщения 4 740
- Марченко В. И. Об аномальном опрокидывании подрешеток в антиферромагнитном $\text{Cu}(\text{pz})_2(\text{ClO}_4)_2$ 4 687
- Матвеев А. Л. (см. Кондратенко П. С.) 4 719
- Матвеев А. Л. (см. Кондратенко П. С.) 4 724
- Медведев С. Н., Оселедец В. И., Посвянский В. С. Распространение цепного изотермического пламени в случайной среде 3 533
- Миладинович Т. Б., Симич С., Данилович Н., Еремич М. З. Скорость туннельной ионизации под влиянием поля с распределением $(0,1)^*$ Лагерра–Гаусса . 5 851
- Минаков Д. В. (см. Мочалов М. А.) ... 6 1118
- Минеев В. П. Пьезомагнетизм в ферромагнитных сверхпроводниках 4 653
- Минеев В. П. Электрон-электронное взаимодействие и сопротивление в металлах без центра инверсии 3 563
- Митянин К. Ю. (см. Бетеров И. И.) ... 3 409
- Михайлин Н. Ю. (см. Шумилин А. В.) 5 915
- Молотков С. Н. (см. Арбеков И. М.) .. 3 434
- Моргунов Р. Б. (см. Бахметьев М. В.) . 5 963
- Москвин А. С. Взаимодействие Дзялошинского и обменно-релятивистские эффекты в ортоферритах 4 607
- Мочалов М. А., Ильяев Р. И., Фортон В. Е., Ерунов С. В., Аригин В. А., Бликот А. О., Огородников В. А., Рыжков А. В., Комраков В. А., Куделькин В. Г., Максимкин И. П., Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Левашов П. Р., Минаков Д. В., Парамонов М. А. Квазиизэнтропическое сжатие неидеальной плазмы дейтерия и его смеси с гелием в области давлений до 250 ГПа 6 1118
- Мукерджи А. (см. Мухин С. И.) 4 755
- Муртазаев А. К., Бабаев А. Б. Влияние замороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в трехмерной модели Поттса 6 1041
- Мухин С. И., Мукерджи А., Сеидов С. С. Квазиклассическая динамика модели Дике в сверхизлучательной дипольной фазе в состоянии «связанного сияния» 4 755
- Мягков Н. Н., Калмыков П. Н., Лапичев Н. В., Леонтьев А. И., Номаконова В. Н., Пономарев А. В., Сальников А. В., Соколов О. А., Шумихин Т. А. Исследования фрагментации сферических алюминиевых ударников на тяжелой сетке при скоростях до 7 км/с 2 216
- ## Н
- Наумов С. В. (см. Солин Н. И.) 2 315
- Некрасов Н. (см. Кричевер И.) 4 822
- Немечек З. (см. Савин С. П.) 2 339
- Нестеров А. И. (см. Орлов Ю. С.) 3 479
- Нещадим В. М. (см. Савин С. П.) 2 339
- Николаев С. В. (см. Орлов Ю. С.) 3 479
- Новиков С. П. (см. Мальцев А. Я.) 4 740
- Номаконова В. Н. (см. Мягков Н. Н.) . 2 216
- ## О
- Обухов Ю. Н. (см. Кондратенко П. С.) 4 719
- Овчинников С. Г. (см. Орлов Ю. С.) .. 3 479
- Овчинников Ю. Н. Нули дзета-функции Римана на линии $z = 1/2 + it_0$ II 3 569
- Огневенко В. В. Увеличение разброса по импульсам в потоке ультрарелятивистских электронов в ондуляторе 5 866
- Огородников В. А. (см. Мочалов М. А.) 6 1118
- Орлов Ю. С., Николаев С. В., Нестеров А. И., Овчинников С. Г. Светоиндуцированная сверхбыстрая динамика систем со спиновым кроссовером при высоком давлении 3 479
- Оселедец В. И. (см. Медведев С. Н.) .. 3 533
- Осипов Г. В. (см. Болотов М. И.) 1 150
- ## П
- Пазгалёв А. С. (см. Баранцев К. А.) ... 2 231
- Парамонов М. А. (см. Мочалов М. А.) 6 1118
- Петачча Л. (см. Гогина А. А.) 6 1028
- Петин А. Н. (см. Макаров Г. Н.) 2 281

Петрин А. Б. Элементарный излучатель на границе плоскостной структуры ..	1	35
Пикин С. А. Динамические структуры зарядов в нематике с отрицательной анизотропией электропроводности	4	730
Пиковский А. С. (см. Болотов М. И.) .	1	150
Полников В. Г., Цяо Ф. Характеристики турбулентности, индуцированной механическими волнами в лотке	1	129
Полулях С. Н., Бержанский В. Н., Семук Е. Ю., Белотелов В. И., Ветошко П. М., Попов В. В., Шапошников А. Н., Шумилов А. Г., Чернов А. И. Ферромагнитный резонанс и упругие колебания в эпитаксиальных пленках феррит-граната иттрия	2	307
Пономарев А. В. (см. Мягков Н. Н.) ..	2	216
Поплавски Н. Гравитационный коллапс жидкого объекта с кручением с образованием вселенной в черной дыре	3	448
Попов В. В. (см. Полулях С. Н.)	2	307
Посвянский В. С. (см. Медведев С. Н.)	3	533
Пресняков И. А. (см. Глазкова Я. С.) .	3	511
Прудников В. Н. (см. Блинов М. И.) ..	3	546

Р

Разоренов С. В. (см. Канель Г. И.)	3	524
Разумовская И. В., Ковалец Н. П., Бедин С. А., Григорьев Ю. В. Агломерация нанопроволок на подложке для гигантского комбинационного рассеяния ..	5	924
Рахманова Л. С. (см. Савин С. П.)	2	339
Решетняк В. В., Решетняк О. Б., Филиппов А. В. Нуклеация и рост зародышей стабильной кристаллической фазы в переохлажденной жидкости Юкавы	2	330
Решетняк О. Б. (см. Решетняк В. В.) .	2	330
Романова О. Б., Аплеснин С. С., Ситников М. Н., Удод Л. В. Магнито-транспортные эффекты и электронное фазовое расслоение в сульфидах марганца с электронно-дырочным дошированием ...	5	938
Романовский М. Ю. Статистические свойства систем многих частиц с иерархической структурой	2	350
Рош Ж.-Л. (см. Савин С. П.)	2	339
Рощин Б. С. (см. Тихонов А. М.)	1	5

Ружицкий В. И., Максимовская А. А., Соловьев И. И., Бакурский С. В., Кленов Н. В. Генерация и распространение дробных флаконов в джозефсоновских средах	5	903
Русаков В. С. (см. Глазкова Я. С.)	3	511
Рыбкин А. Г. (см. Гогина А. А.)	6	1028
Рыжков А. В. (см. Мочалов М. А.)	6	1118
Рябцев И. И. (см. Бетеров И. И.)	3	409
Рязанцева М. О. (см. Савин С. П.)	2	339

С

Савин С. П., Ляхов В. В., Нецадим В. М., Зеленый Л. М., Немецек З., Шафранкова Я., Климов С. И., Скальский С. А., Рязанцева М. О., Рахманова Л. С., Ванг Ч., Ли Х., Бленцки Я., Рош Ж.-Л., Козак Л., Суворова А., Лежен Л. А. Собственные колебания границы магнитного барьера, обтекаемого плазмой: мембранная модель границы, линейные и нелинейные резонансы и связи с внутренними модами	2	339
Савиных А. С. (см. Канель Г. И.)	3	524
Сальников А. В. (см. Мягков Н. Н.) ..	2	216
Саргсян К. А. (см. Авчян Б. Р.)	6	1003
Сарычев М. Н., Бондаревская А. С., Жевстовских И. В., Уланов В. А., Шакуров Г. С., Егранов А. В., Суриков В. Т., Аверкиев Н. С., Гудков В. В. Релаксационный вклад системы ян-теллеровских комплексов в модули упругости легированных флюоритов ...	5	892
Сахно Е. В. (см. Астапенко В. А.)	5	877
Седракян Х. В. (см. Авчян Б. Р.)	6	1003
Сеидов С. С. (см. Мухин С. И.)	4	755
Семук Е. Ю. (см. Полулях С. Н.)	2	307
Симич С. (см. Миладинович Т. Б.)	5	851
Сингх Р. (см. Белинский А. В.)	2	258
Синильщиков И. В. (см. Арбеков И. М.)	3	434
Сирюк Ю. А., Безус А. В., Капшук Р. А., Кононеко В. В. Фазовые переходы в полосовой доменной структуре магнитоодноосной пленки феррита-граната	3	500
Ситников М. Н. (см. Романова О. Б.) .	5	938
Скальский С. А. (см. Савин С. П.)	2	339
Скиданов Р. В. (см. Шленов С. А.)	3	400
Смирнов Л. А. (см. Болотов М. И.) ...	1	150
Сморозин Б. Л. (см. Черепанов И. Н.)	2	371

- Соболев А. В.** (см. Глазкова Я. С.) 3 511
Соколов А. В. (см. Кукушкин А. Б.) .. 5 978
Соколов И. М. Субизлучение холодных и разреженных атомных ансамблей, возбуждаемых резонансным импульсным излучением 1 68
Соколов О. А. (см. Мягков Н. Н.) 2 216
Солин Н. И., Наумов С. В. Эффект тренировки электросопротивления в обменно-смещенном кобальтите $GdBaCo_2O_{5.5}$ 2 315
Соловьев И. И. (см. Ружицкий В. И.) . 5 903
Суворова А. (см. Савин С. П.) 2 339
Суриков В. Т. (см. Сарычев М. Н.) 5 892
- Т**
- Таланцев А. Д.** (см. Бахметьев М. В.) . 5 963
Таранов А. В., Хазанов Е. Н., Чарная Е. В. Фононная спектроскопия шоттки-подобных низкоэнергетических возбуждений парамагнитной природы в кристаллах твердых растворов гранатов 1 111
Тарасов А. В. (см. Гогина А. А.) 6 1028
Тихонов А. М., Асадчиков В. Е., Волков Ю. О., Роцин Б. С., Хонкимаки В., Бланко М. В. Исследование поверхности кремнезоля методом рентгеновского рассеяния 1 5
Третьяков Д. Б. (см. Бетеров И. И.) .. 3 409
Трубилко А. И., Башаров А. М. Эффективный квантовый осциллятор резонатора с осциллирующими параметрами 2 262
Тур А. В. (см. Копп М. И.) 6 1090
- У**
- Удод Л. В.** (см. Романова О. Б.) 5 938
Уланов В. А. (см. Сарычев М. Н.) 5 892
- Ф**
- Филиппов А. В.** (см. Решетняк В. В.) . 2 330
Филиппов А. В. Распределение электронов и ионов вблизи поглощающего сферического тела в неравновесной плазме ... 1 176
Фортов В. Е. (см. Мочалов М. А.) 6 1118
Фраерман А. А. (см. Кузнецов М. А.) . 1 95
- Х**
- Хазанов Е. Н.** (см. Таранов А. В.) 1 111
- Хлюстикова И. Н.** Поверхностная сверхпроводимость ванадия 3 541
Ховайло В. В. (см. Блинов М. И.) 3 546
Хомский Д. И. Мультиферроики и не только: электрические свойства различных магнитных текстур 4 581
Хонкимаки В. (см. Тихонов А. М.) 1 5
- Ц**
- Цяо Ф.** (см. Полников В. Г.) 1 129
- Ч**
- Чарная Е. В.** (см. Таранов А. В.) 1 111
Чекалин С. В. (см. Шленов С. А.) 3 400
Черепанов И. Н., Смородин Б. Л. Конвекция коллоидной суспензии в горизонтальном слое при нагреве снизу с учетом взаимодействия наночастиц 2 371
Черненко В. А. (см. Блинов М. И.) 3 546
Чернов А. И. (см. Полулях С. Н.) 2 307
Чернов Е. Д., Лукоянов А. В., Анисимов В. И. Исследование влияния электронных корреляций на электронную структуру соединений $FeAlO_3$ и $FeSiO_3$ 4 644
Чернов С. В. Построение теней черных дыр. Аналитическая теория 6 1018
Чижиков В. А. Анизотропия магнитных фаз кубических гелимагнетиков 4 656
- Ш**
- Шакуров Г. С.** (см. Сарычев М. Н.) ... 5 892
Шалашов А. Г. (см. Абрамов И. С.) ... 2 270
Шамшур Д. В. (см. Шумилин А. В.) .. 5 915
Шапошников А. Н. (см. Полулях С. Н.) 2 307
Шариф М., Джавед Ф. Устойчивость и динамика регулярных гравастаров с тонкой оболочкой 3 457
Шафранкова Я. (см. Савин С. П.) 2 339
Шахрай Д. В. (см. Емельянов А. Н.) .. 1 120
Шацкий А. А. Появление точки поворота в динамическом решении Рейснера–Нордстрема 5 883
Шергин А. П. (см. Зиновьев А. Н.) 1 56
Шикин А. М. (см. Гогина А. А.) 6 1028
Шишмарев А. А., Левин А. Д., Багров В. Г., Гитман Д. М. Полуклассическое описание ондуляторного излучения 2 297

- Шленов С. А., Васильев Е. В., Чекалин С. В., Компанец В. О., Скиданов Р. В.** Спектральное уширение фемтосекундных оптических вихрей при филаментации в плавленом кварце в условиях аномальной дисперсии групповой скорости 3 400
- Шумилин А. В., Козуб В. И., Агринская Н. В., Михайлин Н. Ю., Шамшур Д. В.** Спиновое стекло и изотропное отрицательное магнитосопротивление в квантовых ямах GaAs–AlGaAs с виртуальным переходом Андерсона 5 915
- Шумилов А. Г.** (см. Полулях С. Н.) ... 2 307
- Шумихин Т. А.** (см. Мягков Н. Н.) ... 2 216
- Э**
- Энтин В. М.** (см. Бетеров И. И.) 3 409
- Я**
- Якшина Е. А.** (см. Бетеров И. И.) 3 409
- Яновский В. В.** (см. Копп М. И.) 6 1090
- Ясников И. С., Виноградов А. Ю.** Акустическая эмиссия при инициации полосы сдвига в металлическом стекле как метод верификации существования масштабной инвариантности 3 473
- Ястремский И. А.** (см. Галкина Е. Г.) . 4 671
- А**
- Abanov Ar.** (see Chubukov A. V.) 4 708
- В**
- Bernardini F.** (see Botana A. S.) 4 711
- Botana A. S., Bernardini F., Cano A.** Nickelate superconductors: an ongoing dialog between theory and experiments 4 711
- Brazovskii S., Kirova N.** Phase slips, dislocations, half-integer vortices, two-fluid hydrodynamics, and the chiral anomaly in charge and spin density waves 4 806
- С**
- Cano A.** (see Botana A. S.) 4 711
- Chubova N. M.** (see Grigoriev S. V.) 4 690
- Chubukov A. V., Abanov Ar.** Pairing by a dynamical interaction in a metal 4 708
- D**
- Dewhurst C. D.** (see Grigoriev S. V.) ... 4 690
- G**
- Grigoriev S. V., Utesov O. I., Chubova N. M., Dewhurst C. D., Menzel D., Maleyev S. V.** Critical fluctuations beyond the quantum phase transition in Dzyaloshinskii–Moriya helimagnets Mn_{1-x}Fe_xSi 4 690
- К**
- Katsnelson M. I.** (see Mazurenko V. V.) 4 598
- Kirova N.** (see Brazovskii S.) 4 806
- Kvashnin Y. O.** (see Mazurenko V. V.) .. 4 598
- L**
- Levchenko A., Micklitz T.** Kinetic processes in Fermi–Luttinger liquids 4 776
- Lichtenstein A. I.** (see Mazurenko V. V.) 4 598
- M**
- Maleyev S. V.** (see Grigoriev S. V.) 4 690
- Mazurenko V. V., Kvashnin Y. O., Lichtenstein A. I., Katsnelson M. I.** A Dzyaloshinskii–Moriya interaction guide to magnets micro-world 4 598
- Menzel D.** (see Grigoriev S. V.) 4 690
- Micklitz T.** (see Levchenko A.) 4 776
- S**
- Spaldin N. A.** Analogy between the magnetic dipole moment at the surface of a magnetoelectric and the electric charge at the surface of a ferroelectric 4 594
- U**
- Utesov O. I.** (see Grigoriev S. V.) 4 690
- V**
- Volovik G. E.** Dimensionless physics 4 815

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ ТОМА 159 ЗА 2021 г.

Вып. Стр.	Вып. Стр.
1. Атомы, молекулы, оптика	
1.1 Общие вопросы квантовой механики	
Возбуждение квантового осциллятора заряженными частицами. <i>Астапенко В. А., Кротов Ю. А., Сахно Е. В.</i> 5 877	Источник экстремального ультрафиолетового излучения на основе разряда, поддерживаемого импульсом излучения терагерцевого лазера на свободных электронах. <i>Абрамов И. С., Господчиков Е. Д., Шалашов А. Г.</i> 2 270
1.2 Квантовая информация и физика квантовых компьютеров	
Реализация однокубитовых квантовых операций на СВЧ-переходе в одиночном атоме рубидия в оптической дипольной ловушке. <i>Бетеров И. И., Якшина Е. А., Третьяков Д. Б., Энтин В. М., Альянова Н. В., Митянин К. Ю., Рябцев И. И.</i> 3 409	1.6 Взаимодействие фотонов, электронов, атомов и молекул с конденсированными телами и поверхностями
О простом эвристическом выводе формулы Шеннона для канала связи с непрерывными переменными в квантовом случае. <i>Арбеков И. М., Молотков С. Н., Синильщиков И. В.</i> 3 434	Исследование поверхности кремнезоля методом рентгеновского рассеяния. <i>Тихонов А. М., Асадчиков В. Е., Волков Ю. О., Роцин Б. С., Хонкимаки В., Бланко М. В.</i> 1 5
1.3 Коллективные свойства холодных атомов и молекул (включая БЕК)	
Субизлучение холодных и разреженных атомных ансамблей, возбуждаемых резонансным импульсным излучением. <i>Соколов И. М.</i> 1 68	Особенности бездиссипативного каналирования движущихся заряженных частиц около проводника с током. <i>Высоцкий В. И., Высоцкий М. В.</i> 1 25
1.5 Столкновения атомов и молекул, источники излучения	
Динамическая ионизация и оже-переходы в квазимолекуле при столкновениях $Ne^+ - Ne$. <i>Зиновьев А. Н., Бабенко П. Ю., Шергин А. П.</i> 1 56	Исследования фрагментации сферических алюминиевых ударников на тяжелой сетке при скоростях до 7 км/с. <i>Мяжков Н. Н., Калмыков П. Н., Лапичев Н. В., Леонтьев А. И., Номаконова В. Н., Пономарев А. В., Сальников А. В., Соколов О. А., Шумихин Т. А.</i> 2 216
	Полуклассическое описание ондуляторного излучения. <i>Шилимарев А. А., Левин А. Д., Багров В. Г., Гитман Д. М.</i> 2 297
	Линии Косселя и рентгеновские локализованные конические моды. <i>Беляков В. А.</i> 3 387
	Спектральное уширение фемтосекундных оптических вихрей при филаментации в плавленом кварце в условиях аномальной дисперсии групповой скорости. <i>Шленов С. А., Васильев Е. В., Чекалин С. В., Компанец В. О., Скиданов Р. В.</i> 3 400
	Квазиклассическая динамика модели Дике в сверхизлучательной дипольной фазе в состоянии «связанного сияния». <i>Мухлин С. И., Мукерджи А., Сеидов С. С.</i> 4 755

- Генерация высших гармоник когерентного субтерагерцевого излучения при переходе Лифшица в двухслойном графене со щелью. *Казарян А. Г.* 5 952
- Отклик высших гармоник интенсивного когерентного электромагнитного поля на изменение топологии поверхности Ферми в графеноподобных наносистемах. *Авчян Б. Р., Казарян А. Г., Саргсян К. А., Седракян Х. В.* 6 1003
- 1.7 Взаимодействие атомов и молекул с электромагнитным полем, квантовая и классическая оптика, физика лазеров, нелинейная оптика**
- Элементарный излучатель на границе плоскостной структуры. *Петрин А. Б.* 1 35
- Субизлучение холодных и разреженных атомных ансамблей, возбуждаемых резонансным импульсным излучением. *Соколов И. М.* 1 68
- Число солитонов, порождаемых из интенсивного начального импульса при асимптотически больших временах. *Камчатнов А. М.* 1 76
- Возможны ли изотропные метаматериалы и метаматериалы с отрицательными проницаемостями ϵ и μ ? *Давидович М. В.* .. 2 195
- Эффект встречной поляризации ансамбля щелочных атомов при оптической накачке: исследование при учете движения атомов. *Баранцев К. А., Литвинов А. Н., Пазгалёв А. С., Вершовский А. К.* 2 231
- Тригонометрические операторы разности фаз квантовых электромагнитных полей. *Козловский А. В.* 2 244
- Встречное четырехфотонное смешивание в формировании фантомных изображений. *Белинский А. В., Сингх Р.* 2 258
- Эффективный квантовый осциллятор резонатора с осциллирующими параметрами. *Трубилко А. И., Башаров А. М.* 2 262
- Лазерная изотопно-селективная ИК-диссоциация молекул с небольшим изотопическим сдвигом в спектрах поглощения в неравновесных термодинамических условиях скачка уплотнения. *Макаров Г. Н., Петин А. Н.* 2 281
- Реализация однокубитовых квантовых операций на СВЧ-переходе в одиночном атоме рубидия в оптической дипольной ловушке. *Бетеров И. И., Якишина Е. А., Третьяков Д. Б., Энтин В. М., Альянова Н. В., Митянин К. Ю., Рябцев И. И.* 3 409
- Солитоны в хиральной среде. *Заболотский А. А.* 3 424
- Скорость туннельной ионизации под влиянием поля с распределением $(0, 1)^*$ Лагерра–Гаусса. *Миладинович Т. Б., Симич С., Данилович Н., Еремич М. З.* 5 851
- Увеличение разброса по импульсам в потоке ультрарелятивистских электронов в ондуляторе. *Огнивенко В. В.* 5 866
- Ван-дер-ваальсово притяжение атомов водорода. *Ишханян А. М., Крайнов В. П.* 6 1013
- 1.8 Классическая электродинамика**
- Эффективный квантовый осциллятор резонатора с осциллирующими параметрами. *Трубилко А. И., Башаров А. М.* 2 262
- Полуклассическое описание ондуляторного излучения. *Шушмарев А. А., Левин А. Д., Багров В. Г., Гитман Д. М.* 2 297
- 2. Ядра, частицы, поля, гравитация и астрофизика**
- 2.4 Гравитация и астрофизика**
- О механизме температурных вариаций средней энергии мюонов на больших глубинах. *Агафонова Н. Ю., Мальгин А. С.* 1 88
- Гравитационный коллапс жидкого объекта с кручением с образованием вселенной в черной дыре. *Поплавски Н.* 3 448
- Устойчивость и динамика регулярных гравастаров с тонкой оболочкой. *Шариф М., Джавед Ф.* 3 457
- Dimensionless physics. *Volovik G. E.* 4 815
- Появление точки поворота в динамическом решении Рейснера–Нордстрема. *Шацкий А. А.* 5 883
- Построение теней черных дыр. Аналитическая теория. *Чернов С. В.* 6 1018

2.5 Квантовая теория поля, струны

К вопросу о наперстках Лефшеца в сигма-моделях, *И. Кричевер И., Некрасов Н.* ... 4 822

3. Твердые тела и жидкости**3.1 Рассеяние и поглощение частиц и волн, спектры возбуждения**

Акустическая эмиссия при инициации полосы сдвига в металлическом стекле как метод верификации существования масштабной инвариантности. *Ясников И. С., Виноградов А. Ю.* 3 473

Модификация электронной структуры квазисвободного графена при адсорбции и интеркаляции атомов Mn. *Гогина А. А., Рыбкин А. Г., Шикин А. М., Тарасов А. В., Петапча Л., Ди Санто Г., Елисеев И. А., Лебедев С. П., Давыдов В. Ю., Климовских И. И.* 6 1028

3.2 Структура, механические свойства, дефекты, рост кристаллов

Акустическая эмиссия при инициации полосы сдвига в металлическом стекле как метод верификации существования масштабной инвариантности. *Ясников И. С., Виноградов А. Ю.* 3 473

3.3 Тепловые свойства твердых тел и жидкостей

Об оценке параметров критической точки фазового перехода жидкость–пар металлов из экспериментов по изоэнтропическому расширению ударно-сжатых пористых образцов. *Емельянов А. Н., Шахрай Д. В., Ким В. В.* 1 120

Моделирование нестационарных неустойчивостей Бенара–Марангони в испаряющихся летучих каплях на нагретой подложке. *Гаврилина А. А., Бараки Л. Ю.* . 2 359

Релаксационный вклад системы ян-теллеровских комплексов в модули упругости легированных флюоритов. *Сарычев М. Н., Бондаревская А. С., Жевстовских И. В., Уланов В. А., Шакуров Г. С., Егранов А. В., Суриков В. Т., Авержиев Н. С., Гудков В. В.* 5 892

Гидромагнитные неустойчивости в неоднородно вращающемся слое электропроводящей наножидкости. *Копт М. И., Тур А. В., Яновский В. В.* 6 1090

3.5 Низкоразмерные системы (структура и т. д.)

Исследование поверхности кремнезоля методом рентгеновского рассеяния. *Тихонов А. М., Асадчиков В. Е., Волков Ю. О., Роцин Б. С., Хонжимаки В., Бланко М. В.* 1 5

Релаксационный вклад системы ян-теллеровских комплексов в модули упругости легированных флюоритов. *Сарычев М. Н., Бондаревская А. С., Жевстовских И. В., Уланов В. А., Шакуров Г. С., Егранов А. В., Суриков В. Т., Авержиев Н. С., Гудков В. В.* 5 892

4. Порядок, беспорядок и фазовые переходы в конденсированных средах**4.1 Неоднородные, неупорядоченные и частично разупорядоченные системы**

Об оценке параметров критической точки фазового перехода жидкость–пар металлов из экспериментов по изоэнтропическому расширению ударно-сжатых пористых образцов. *Емельянов А. Н., Шахрай Д. В., Ким В. В.* 1 120

Нуклеация и рост зародышей стабильной кристаллической фазы в переохлажденной жидкости Юкавы. *Решетняк В. В., Решетняк О. Б., Филиппов А. В.* 2 330

Высокоскоростная деформация титана в ударных волнах при нормальной и повышенной температурах. *Канель Г. И., Савиных А. С., Гаркушин Г. В., Разоренов С. В.* 3 524

Распространение цепного изотермического пламени в случайной среде. *Медведев С. Н., Оселедец В. И., Посвянский В. С.* 3 533

Проводимость двумерной модели Рэлея при критической концентрации — пороге протекания. *Балагуров Б. Я.* 3 553

- Анизотропия магнитных фаз кубических гелимагнетиков. *Чижиков В. А.* 4 656
- Critical fluctuations beyond the quantum phase transition in Dzyaloshinskii–Moriya helimagnets $Mn_{1-x}Fe_xSi$. *Grigoriev S. V., Utesov O. I., Chubova N. M., Dewhurst C. D., Menzel D., Maleyev S. V.* 4 690
- Асимптотическая теория анизотропной классической диффузии в неоднородных средах. *Кондратенко П. С., Матвеев А. Л., Обухов Ю. Н.* 4 719
- Неклассический перенос примеси в модели Дыхне с параметрами, зависящими от координат. Принцип Ферма. *Кондратенко П. С., Матвеев А. Л.* 4 724
- 4.2 Магнетизм, пьезо- и сегнетоэлектричество**
- Магнитокалорический эффект в наносистемах на основе ферромагнетиков с различными температурами Кюри. *Кузнецов М. А., Дровосеков А. Б., Фраерман А. А.* 1 95
- Фоновая спектроскопия шоттки-подобных низкоэнергетических возбуждений парамагнитной природы в кристаллах твердых растворов гранатов. *Таранов А. В., Хазанов Е. Н., Чарная Е. В.* 1 111
- Ферромагнитный резонанс и упругие колебания в эпитаксиальных пленках феррит-граната иттрия. *Полулях С. Н., Бержанский В. Н., Семук Е. Ю., Белотелов В. И., Ветошко П. М., Попов В. В., Шапошников А. Н., Шумилов А. Г., Чернов А. И.* 2 307
- Эффект тренировки электросопротивления в обменно-смещенном кобальтите $GdBaCo_2O_{5.5}$. *Солин Н. И., Наумов С. В.* 2 315
- Светоиндуцированная сверхбыстрая динамика систем со спиновым кроссовером при высоком давлении. *Орлов Ю. С., Николаев С. В., Нестеров А. И., Овчинников С. Г.* 3 479
- Фазовые переходы в полосовой доменной структуре магнитоодноосной пленки феррита-граната. *Сирюк Ю. А., Безус А. В., Капшук Р. А., Кононеко В. В.* 3 500
- Магнитные сверхтонкие взаимодействия зондовых атомов ^{57}Fe в манганитах $CaCu_xMn_{7-x}O_{12}$ ($0 \leq x \leq 1$). *Глазкова Я. С., Русаков В. С., Соболев А. В., Гапочка А. М., Губайдулина Т. В., Волкова О. С., Васильев А. Н., Пресняков И. А.* 3 511
- Высокоскоростная деформация титана в ударных волнах при нормальной и повышенной температурах. *Канель Г. И., Савиных А. С., Гаркушин Г. В., Разоренов С. В.* 3 524
- Магнитотранспортные свойства тонких пленок $Ni_{49.7}Fe_{17.4}Co_{4.2}Ga_{28.7}$. *Блинов М. И., Черненко В. А., Прудников В. Н., Асегуинолаза И. Р., Барандиаран Ж. М., Ладеранта Э., Ховайло В. В., Грановский А. Б.* 3 546
- Мультиферроики и не только: электрические свойства различных магнитных текстур. *Хомский Д. И.* 4 581
- Analogy between the magnetic dipole moment at the surface of a magnetoelectric and the electric charge at the surface of a ferroelectric. *Spaldin N. A.* 4 594
- A Dzyaloshinskii–Moriya interaction guide to magnets micro-world. *Mazurenko V. V., Kvashnin Y. O., Lichtenstein A. I., Katsnelson M. I.* 4 598
- Взаимодействие Дзялошинского и обменно-релятивистские эффекты в ортоферритах. *Москвин А. С.* 4 607
- Исследование влияния электронных корреляций на электронную структуру соединений $FeAlO_3$ и $FeSiO_3$. *Чернов Е. Д., Лукьянов А. В., Анисимов В. И.* 4 644
- Пьезомагнетизм в ферромагнитных сверхпроводниках. *Минеев В. П.* 4 653
- Анизотропия магнитных фаз кубических гелимагнетиков. *Чижиков В. А.* 4 656
- Динамика доменных стенок в киральных магнетиках. *Галкина Е. Г., Иванов Б. А., Кулагин Н. Е., Лерман Л. М., Ястремский И. А.* 4 671
- Об аномальном опрокидывании под решеток в антиферромагнитном $Cu(pz)_2(ClO_4)_2$. *Марченко В. И.* 4 687
- Critical fluctuations beyond the quantum phase transition in Dzyaloshinskii–Moriya helimagnets $Mn_{1-x}Fe_xSi$. *Grigoriev S. V., Utesov O. I., Chubova N. M., Dewhurst C. D., Menzel D., Maleyev S. V.* 4 690

Pairing by a dynamical interaction in a metal. <i>Chubukov A. V., Abanov Ar.</i> 4 708	Генерация и распространение дробных флаксонов в джозефсоновских средах. <i>Ружицкий В. И., Максимовская А. А., Соловьев И. И., Бакурский С. В., Кле- нов Н. В.</i> 5 903
Nickelate superconductors: an ongoing di- alog between theory and experiments. <i>Botana A. S., Bernardini F., Cano A.</i> 4 711	
Спиновое стекло и изотропное отрица- тельное магнитосопротивление в кванто- вых ямах GaAs–AlGaAs с виртуальным переходом Андерсона. <i>Шумилин А. В., Козуб В. И., Агринская Н. В., Михай- лин Н. Ю., Шамшур Д. В.</i> 5 915	4.4 Общие вопросы физики фазовых переходов
Агломерация нанопроволок на подложке для гигантского комбинационного рассея- ния. <i>Разумовская И. В., Ковалец Н. П., Бедин С. А., Григорьев Ю. В.</i> 5 924	Нуклеация и рост зародышей стабильной кристаллической фазы в переохлажден- ной жидкости Юкавы. <i>Решетняк В. В., Решетняк О. Б., Филиппов А. В.</i> 2 330
Влияние замороженных немагнитных при- месей на фазовые переходы в трехмерной модели Поттса. <i>Муртазаев А. К., Баба- ев А. Б.</i> 6 1041	5. Электронные свойства твер- дых тел
4.3 Сверхпроводимость и сверхтеку- честь	5.1 Электронные свойства металлов и диэлектриков
Об оценке параметров критической точки фазового перехода жидкость–пар метал- лов из экспериментов по изоэнтропическо- му расширению ударно-сжатых пористых образцов. <i>Емельянов А. Н., Шахрай Д. В., Ким В. В.</i> 1 120	Электрон–электронное взаимодействие и сопротивление в металлах без центра ин- версии. <i>Минеев В. П.</i> 3 563
Поверхностная сверхпроводимость вана- дия. <i>Хлюстикова И. Н.</i> 3 541	Исследование влияния электронных корреляций на электронную структуру соединений FeAlO ₃ и FeSiO ₃ . <i>Чернов Е. Д., Луко- янов А. В., Анисимов В. И.</i> 4 644
Пьезомагнетизм в ферромагнитных сверх- проводниках. <i>Минеев В. П.</i> 4 653	Неклассический перенос примеси в моде- ли Дыхне с параметрами, зависящими от координат. Принцип Ферма. <i>Кондратен- ко П. С., Матвеев А. Л.</i> 4 724
Капли параметра порядка в электронной системе малой плотности с притяжением в присутствии сильного случайного потен- циала. <i>Каган М. Ю., Мазур Е. А.</i> 4 696	5.2 Сильно коррелированные элект- ронные системы
Pairing by a dynamical interaction in a metal. <i>Chubukov A. V., Abanov Ar.</i> 4 708	Светоиндуцированная сверхбыстрая дина- мика систем со спиновым кроссовером при высоком давлении. <i>Орлов Ю. С., Нико- лаев С. В., Нестеров А. И., Овчинни- ков С. Г.</i> 3 479
Nickelate superconductors: an ongoing di- alog between theory and experiments. <i>Botana A. S., Bernardini F., Cano A.</i> 4 711	Магнитотранспортные свойства тонких пленок Ni _{49.7} Fe _{17.4} Co _{4.2} Ga _{28.7} . <i>Бли- нов М. И., Черненко В. А., Прудни- ков В. Н., Асегуинолаза И. Р., Барандиа- ран Ж. М., Ладеранта Э., Ховайло В. В., Грановский А. Б.</i> 3 546
Phase slips, dislocations, half-integer vor- tices, two-fluid hydrodynamics, and the chi- ral anomaly in charge and spin density waves. <i>Brazovskii S., Kirova N.</i> 4 806	Мультиферроики и не только: электричес- кие свойства различных магнитных текс- тур. <i>Хомский Д. И.</i> 4 581

- Исследование влияния электронных корреляций на электронную структуру соединений FeAlO₃ и FeSiO₃. Чернов Е. Д., Лукоянов А. В., Анисимов В. И. 4 644
- Pairing by a dynamical interaction in a metal. Chubukov A. V., Abanov Ar. 4 708
- Kinetic processes in Fermi–Luttinger liquids. Levchenko A., Micklitz T. 4 776
- Спиновое стекло и изотропное отрицательное магнитосопротивление в квантовых ямах GaAs–AlGaAs с виртуальным переходом Андерсона. Шумилин А. В., Козуб В. И., Агринская Н. В., Михайлин Н. Ю., Шамшур Д. В. 5 915
- Магнитотранспортные эффекты и электронное фазовое расслоение в сульфидах марганца с электронно-дырочным допированием. Романова О. Б., Аплеснин С. С., Ситников М. Н., Удод Л. В. 5 938
- 5.3 Физика полупроводников**
- Релаксационный вклад системы ян-теллеровских комплексов в модули упругости легированных флюоритов. Сарычев М. Н., Бондаревская А. С., Жевстовских И. В., Уланов В. А., Шакуров Г. С., Егранов А. В., Суриков В. Т., Авержиев Н. С., Гудков В. В. 5 892
- Примесные состояния в нанопроводе на основе квантовой ямы в магнитном полупроводнике с анизотропным конфайнментом. Калпана П., Джаякумар К. 5 930
- Модификация электронной структуры квазисвободного графена при адсорбции и интеркаляции атомов Mn. Гогина А. А., Рыбкин А. Г., Шикин А. М., Тарасов А. В., Петачча Л., Ди Санто Г., Елисеев И. А., Лебедев С. П., Давыдов В. Ю., Климовских И. И. 6 1028
- Вращательная дипольная плазменная мода в наноразмерных полупроводниковых частицах. Герчиков Л. Г., Ипатов А. Н. ... 6 1047
- 5.4 Низкоразмерные системы (электронные свойства)**
- Проводимость двумерной модели Рэля при критической концентрации — пороге протекания. Балагуров Б. Я. 3 553
- Капли параметра порядка в электронной системе малой плотности с притяжением в присутствии сильного случайного потенциала. Каган М. Ю., Мазур Е. А. 4 696
- Kinetic processes in Fermi–Luttinger liquids. Levchenko A., Micklitz T. 4 776
- Phase slips, dislocations, half-integer vortices, two-fluid hydrodynamics, and the chiral anomaly in charge and spin density waves. Brazovskii S., Kirova N. 4 806
- Генерация и распространение дробных флаксонов в джозефсоновских средах. Ружицкий В. И., Максимовская А. А., Соловьев И. И., Бакурский С. В., Кленов Н. В. 5 903
- Примесные состояния в нанопроводе на основе квантовой ямы в магнитном полупроводнике с анизотропным конфайнментом. Калпана П., Джаякумар К. 5 930
- Генерация высших гармоник когерентного субтерагерцевого излучения при переходе Лифшица в двухслойном графене со щелью. Казарян А. Г. 5 952
- Модификация электронной структуры квазисвободного графена при адсорбции и интеркаляции атомов Mn. Гогина А. А., Рыбкин А. Г., Шикин А. М., Тарасов А. В., Петачча Л., Ди Санто Г., Елисеев И. А., Лебедев С. П., Давыдов В. Ю., Климовских И. И. 6 1028
- Вращательная дипольная плазменная мода в наноразмерных полупроводниковых частицах. Герчиков Л. Г., Ипатов А. Н. ... 6 1047
- Безмассовые электронные возбуждения в графене в окрестности кулоновских примесей. Бреев А. И., Гитман Д. М. 6 1070
- 6. Статистическая и нелинейная физика, физика «мягкой» материи**
- 6.1 Статистическая физика**
- Пространственно-временные режимы в системе неидентичных осцилляторов Курamoto–Баттогтоха. Болотов М. И., Смирнов Л. А., Бубнова Е. С., Осипов Г. В., Пиковский А. С. 1 150

Статистические свойства систем многих частиц с иерархической структурой. <i>Романовский М. Ю.</i>	2	350	Собственные колебания границы магнитного барьера, обтекаемого плазмой: мембранная модель границы, линейные и нелинейные резонансы и связи с внутренними модами. <i>Савин С. П., Ляхов В. В., Нецадим В. М., Зеленый Л. М., Немечек З., Шафранкова Я., Климов С. И., Скальский С. А., Рязанцева М. О., Рахманова Л. С., Ванг Ч., Ли Х., Бленцки Я., Рош Ж.-Л., Козак Л., Суворова А., Лезжен Л. А.</i>	2	339
Моделирование нестационарных неустойчивостей Бенара–Марангони в испаряющихся летучих каплях на нагретой подложке. <i>Гаврилина А. А., Бараиш Л. Ю.</i>	2	359	Конвекция коллоидной суспензии в горизонтальном слое при нагреве снизу с учетом взаимодействия наночастиц. <i>Черепанов И. Н., Смородин Б. Л.</i>	2	371
Конвекция коллоидной суспензии в горизонтальном слое при нагреве снизу с учетом взаимодействия наночастиц. <i>Черепанов И. Н., Смородин Б. Л.</i>	2	371	Осцилляторы с затуханием в рамках общей теории сил Казимира и Ван дер Ваальса. <i>Бараиш Ю. С.</i>	4	761
Осцилляторы с затуханием в рамках общей теории сил Казимира и Ван дер Ваальса. <i>Бараиш Ю. С.</i>	4	761	Законы подобия для функции Грина нестационарного супердиффузионного переноса: прогулки Леви и полеты Леви. <i>Кукучкин А. Б., Куличенко А. А., Соколов А. В.</i>	5	978
Законы подобия для функции Грина нестационарного супердиффузионного переноса: прогулки Леви и полеты Леви. <i>Кукучкин А. Б., Куличенко А. А., Соколов А. В.</i>	5	978	Скобки Пуассона гидродинамического типа и их обобщения. <i>Мальцев А. Я., Новиков С. П.</i>	4	740
6.2 Полимеры, жидкие кристаллы			Симметричный подход в задаче о расширении газов в вакуум. <i>Кузнецов Е. А., Каган М. Ю.</i>	4	794
Исследование поверхности кремнезоля методом рентгеновского рассеяния. <i>Тихонов А. М., Асадчиков В. Е., Волков Ю. О., Роцин Б. С., Хонжимаки В., Бланко М. В.</i>	1	5	Резкое изменение обменного смещения и симметрии магнитной анизотропии при допороговом количестве межслойной меди в гетероструктурах NiFe/Cu/GrMn. <i>Бахметьев М. В., Таланцев А. Д., Моргунов Р. Б.</i>	5	963
Линии Косселя и рентгеновские локализованные конические моды. <i>Беляков В. А.</i>	3	387	Гидромагнитные неустойчивости в неоднородно вращающемся слое электропроводящей наножидкости. <i>Копп М. И., Тур А. В., Яновский В. В.</i>	6	1090
Динамические структуры зарядов в нематике с отрицательной анизотропией электропроводности. <i>Пикин С. А.</i>	4	730	6.6 Физика плазмы, термоядерный синтез		
Комбинированные дефекты в ферроэлектрических нематиках. <i>Кац Е. И.</i>	4	735	Пространственно-временные режимы в системе неидентичных осцилляторов Курamoto–Баттогтоха. <i>Болотов М. И., Смирнов Л. А., Бубнова Е. С., Осипов Г. В., Пиковский А. С.</i>	1	150
6.4 Хаос			Распределение электронов и ионов вблизи поглощающего сферического тела в неравновесной плазме. <i>Филлипов А. В.</i>	1	176
Законы подобия для функции Грина нестационарного супердиффузионного переноса: прогулки Леви и полеты Леви. <i>Кукучкин А. Б., Куличенко А. А., Соколов А. В.</i>	5	978			
6.5 Динамика жидкостей					
Характеристики турбулентности, индуцированной механическими волнами в лотке. <i>Полников В. Г., Цяо Ф.</i>	1	129			

- Собственные колебания границы магнитного барьера, обтекаемого плазмой: мембранная модель границы, линейные и нелинейные резонансы и связи с внутренними модами. *Савин С. П., Ляхов В. В., Нецадим В. М., Зеленый Л. М., Немечек З., Шафранкова Я., Климов С. И., Скальский С. А., Рязанцева М. О., Рахманова Л. С., Ванг Ч., Ли Х., Бленцки Я., Рош Ж.-Л., Козак Л., Суворова А., Лейсен Л. А.* 2 339
- Моделирование нестационарных неустойчивостей Бенара–Марангони в испаряющихся легучих каплях на нагретой подложке. *Гаврилина А. А., Бараиш Л. Ю.* . 2 359
- Квазиизэнтропическое сжатие неидеальной плазмы дейтерия и его смеси с гелием в области давлений до 250 ГПа. *Мочалов М. А., Илькаев Р. И., Фортков В. Е., Ерунов С. В., Аринин В. А., Бликов А. О., Огородников В. А., Рыжков А. В., Комраков В. А., Куделькин В. Г., Максимкин И. П., Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Левашов П. Р., Минаков Д. В., Парамонов М. А.* 6 1118
- 6.7 Вычислительная физика, сложные системы**
- Нули дзета-функции Римана на линии $z = 1/2 + it_0$. *Овчинников Ю. Н.* 3 569
- 6.8 Общие вопросы физики нелинейных систем. Теоретическая и математическая физика**
- Собственные колебания границы магнитного барьера, обтекаемого плазмой: мембранная модель границы, линейные и нелинейные резонансы и связи с внутренними модами. *Савин С. П., Ляхов В. В., Нецадим В. М., Зеленый Л. М., Немечек З., Шафранкова Я., Климов С. И., Скальский С. А., Рязанцева М. О., Рахманова Л. С., Ванг Ч., Ли Х., Бленцки Я., Рош Ж.-Л., Козак Л., Суворова А., Лейсен Л. А.* 2 339
- Симметричный подход в задаче о расширении газов в вакуум. *Кузнецов Е. А., Каган М. Ю.* 4 794
- Phase slips, dislocations, half-integer vortices, two-fluid hydrodynamics, and the chiral anomaly in charge and spin density waves. *Brazovskii S., Kirova N.* 4 806
- К вопросу о наперстках Лефшеца в сигма-моделях, I. *Кричевер И., Некрасов Н.* ... 4 822
- Резкое изменение обменного смещения и симметрии магнитной анизотропии при допороговом количестве межслойной меди в гетероструктурах NiFe/Cu/GrMn. *Бахметьев М. В., Таланцев А. Д., Моргунов Р. Б.* 5 963
- Законы подобия для функции Грина нестационарного супердиффузионного переноса: прогулки Леви и полеты Леви. *Кукушкин А. Б., Куличенко А. А., Соколов А. В.* 5 978

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

Редакция ЖЭТФ принимает статьи как на русском, так и на английском языках. С 1 сентября 2016 г. по требованию МАИК статьи, поступившие в редакцию на английском языке, будут переводиться на русский язык для русскоязычной версии журнала.

Редакция рекомендует направлять статьи в электронном виде по электронной почте или загружать их в режиме «on-line» через сайт журнала <http://jetp.ac.ru/>

Издательство требует от авторов при публикации статьи заключения договора о передаче авторских прав. Заполненные и подписанные договоры (форма договоров отправляется авторам **ВМЕСТЕ С КОРРЕКТУРОЙ**) могут быть представлены лично или по электронной почте в отсканированном виде (PDF файлы).

По всем вопросам можно обращаться в редакцию.

Адрес: 117334, Москва, ул. Косыгина, д. 2, Редакция ЖЭТФ

E-mail: jetp@kapitza.ras.ru Телефон: +7 (499) 137 56 22

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

Редакция ЖЭТФ просит авторов при направлении статей в печать руководствоваться приведенными ниже правилами.

1. В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

2. Статьи должны быть изложены с предельной краткостью, совместимой с ясностью изложения, и окончательно обработаны. Следует избегать повторения данных таблиц или графиков в тексте статьи, а также представления численных результатов в виде таблиц и графиков одновременно. Не следует злоупотреблять введением новых аббревиатур в дополнение к общепринятым, таким как ЯМР, УФ и т. д.

3. К статье необходимо прилагать короткую аннотацию, в которой должны быть четко сформулированы цель и результаты работ (аннотация и раздел «Выводы» не должны дублировать друг друга).

4. Редакция принимает статьи:

- а) по электронной почте по адресу JETP@kapitza.ras.ru;
- б) в «on-line» режиме на веб-странице журнала (www.jetp.ac.ru);
- в) по почте или непосредственно в редакции (статья должна быть представлена в двух экземплярах, электронный вариант также необходим).

В электронном варианте текст должен быть представлен в формате \LaTeX или Word, рисунки — в формате PostScript (*.ps) или EncapsulatedPostScript (*.eps), каждый рисунок отдельным файлом (желательно также представить рисунки в том формате, в котором они готовились). В том случае, если статья посылается по электронной почте, текст должен быть представлен дополнительно в формате ps или pdf.

5. Статьи должны быть напечатаны шрифтом 12 пунктов в одну колонку через полтора интервала, на одной стороне листа, с полями с левой стороны

листа не уже 4 см; рукописные вставки не допускаются. В обозначениях и индексах (в тексте и на рисунках) не должно быть русских букв. Например, следует писать P_{opt} , а не $P_{\text{опт}}$. Все сколько-нибудь громоздкие формулы должны выноситься на отдельные строки. Векторные величины должны быть выделены прямым полужирным шрифтом.

Все страницы рукописи должны быть пронумерованы. Таблицы, аннотация, литература, подписи к рисункам должны быть напечатаны на отдельных страницах.

6. Подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье. Цитируемая литература должна даваться не в виде подстрочных примечаний, а общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой в прямых скобках (например, [1]). Литература дается в порядке упоминания в статье. Указываются инициалы и фамилии авторов (всех авторов, если число авторов меньше четырех, и троих и др., если число авторов больше четырех). Порядок оформления литературы виден из следующих примеров:

1. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1984), с. 1.
2. А. М. Сергеев, Р. И. Чернова, А. Я. Сергиенко, ФТТ **30**, 835 (1988).
3. R. Brewer, J. M. Faber, C. N. Malleson et al., Phys. Rev. A **18**, 1632 (1978).
4. A. N. Stirling and D. Watson, in *Progress in Low Temperature Physics*, ed. by D. F. Brewer, North Holland, Amsterdam (1986), Vol. 10, p. 683.
5. К. Д. Громов, М. Э. Ландсберг, в сб. *Тез. докл. X Всесоюзн. конф. по физике низких температур* (Ташкент, 1986), Наука, Москва (1987), с. 434.
6. M. P. Elliot, V. Rumford, and A. A. Smith, Preprint TH 4302-CERN (1988).

7. Л. Н. Шалимова, А. С. Крюков, Препринт ОИЯИ № Р-16-22 (1987).
 8. Н. В. Васильев, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, МГУ, Москва (1985).
 9. A. Fang and C. Howald, E-print archives, cond-mat/0404452.
7. Все рисунки и чертежи должны быть выполнены четко, в формате, обеспечивающем ясность понимания всех деталей; это особенно относится к фотокопиям. Надписи на рисунках следует по возможности заменять цифрами и буквенными обозначениями, разъясняемыми в подписи к рисунку или в тексте. В рукописи рисунки должны быть представлены на отдельных страницах в конце статьи.
8. Редакция посылает автору одну корректуру по электронной почте в виде *.ps-файла. Постраничный список исправлений должен быть отправлен автором на электронный адрес журнала в течение недели.
 9. К рукописи необходимо приложить электронный адрес (e-mail), почтовый адрес места работы с индексом, фамилию, полное имя и отчество автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номер телефона, служебного или домашнего.

Главный редактор *А. Ф. АНДРЕЕВ*

Редколлегия:

д-р физ.-мат. наук *И. Г. ЗУБАРЕВ*,
д-р физ.-мат. наук *Е. И. КАЦ* (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции),
д-р физ.-мат. наук *В. П. КРАЙНОВ*, акад. *М. В. САДОВСКИЙ*, канд. физ.-мат. наук *С. С. СОСИН*,
канд. физ.-мат. наук *Ю. С. БАРАШ*, член-корр. РАН *С. В. ТРОИЦКИЙ* (зам. гл. редактора),
член-корр. РАН *И. А. ФОМИН* (зам. гл. редактора),
д-р физ.-мат. наук *Д. Е. ХМЕЛЬНИЦКИЙ* (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ
в Великобритании), акад. *А. М. ЧЕРЕПАЩУК*

Редакционный совет:

д-р физ.-мат. наук *В. Т. ДОЛГОПОЛОВ*, член-корр. РАН *В. В. ЛЕБЕДЕВ*,
д-р физ.-мат. наук *В. С. ПОПОВ*

Зав. редакцией *Н. Г. Церевитинова*
Редакторы: *Л. Б. Кульчицкая*, *Т. Г. Орехова*, *Т. Н. Смирнова*