РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА — *ТОМ 159, ВЫПУСК 3*

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД — *МАРТ 2021*

М О С К В А — Р А Н

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ

ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 3, стр. 387–399

ЛИНИИ КОССЕЛЯ И РЕНТГЕНОВСКИЕ ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ КОНИЧЕСКИЕ МОДЫ

В. А. Беляков[*]

Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 29 октября 2020 г.,
после переработки 19 ноября 2020 г.
Принята к публикации 24 ноября 2020 г.

Предлагается альтернативный способ описания рентгеновских линий Косселя, основанный на теории локализованных конических рентгеновских мод, существующих в совершенных кристаллах. Теория линий Косселя изложена в рамках приближения двуволновой динамической теории дифракции. Теоретические результаты сравниваются с известными экспериментальными данными и демонстрируют хорошее общее согласие с экспериментом. Обсуждается влияние на форму линий Косселя существенных параметров кристалла (совершенства, размера, эффекта Бормана и т. д.). Для доказательства прямой связи линий Косселя с локализованными коническими рентгеновскими модами предлагается использовать рентгеновскую технику задержанного временного детектирования.

DOI: 10.31857/S0044451021030019

1. ВВЕДЕНИЕ

Существующие в дифракции рентгеновского излучения на совершенных монокристаллах линии (рис. 1) были обнаружены Косселем [1] и названы его именем. Подобные линии, наблюдаемые в дифракции электронов на совершенных монокристаллах, также наблюдались авторами работы [2] и были названы линиями Кикучи. Сравнительно недавно подобные линии были обнаружены в дифракции нейтронов [3]. Природа линий Косселя (Кикучи) была понята весьма быстро. Их возникновение обусловлено некогерентным процессом в акте рассеяния (обычно инициированным дифракцией рентгеновского излучения). Этим процессом оказывается испускание излучения отдельным атомом, находящимся в узле кристаллической решетки [4, 5]. Оно приводит к существенному угловому перераспределению выходящего из кристалла рентгеновского излучения, по сравнению со случаем однородной изотропной среды, для направлений излучения, близких к направлениям, для которых выполняется условие Брэгга. Как правило, ответственным за линии Косселя (KL) является рентгеновское излучение флюоресценции, выступающее в качестве некогерентного канала рассеяния в ходе дифракции рентгеновского излучения. Разумеется, в общем случае нет необходимости в дифракции рентгеновского излучения и KL возникают в результате взаимодействия с монокристаллом различных видов излучения, например, быстрых протонов [6, 7].

Теоретическое описание KL представляется достаточно сложной проблемой, так как экспериментально наблюдаемое излучение в каждой точке KL представляет собой некогерентную сумму излучения от всех участвующих в процессе атомов монокристалла. Решение теоретической проблемы было предложено Лауэ, показавшим, что для описания KL может быть использована теорема взаимности [8]. Тем не менее описание KL в рамках теоремы взаимности сохраняет необходимость выполнения суммирования излучения от всех участвующих в процессе атомов монокристалла.

В поисках альтернативных путей теоретического описания KL полезно обратить внимание на следующие относящиеся к ним наблюдения. Во-первых, вид KL очень слабо зависит от расположения излучающих атомов в образце [4]. Во-вторых, картина KL (в основном интенсивность) сильно зависит от толщины образца [9]. Оба эти наблюдения указывают на сильное влияние параметров образца на фор-

[*] E-mail: bel@landau.ac.ru

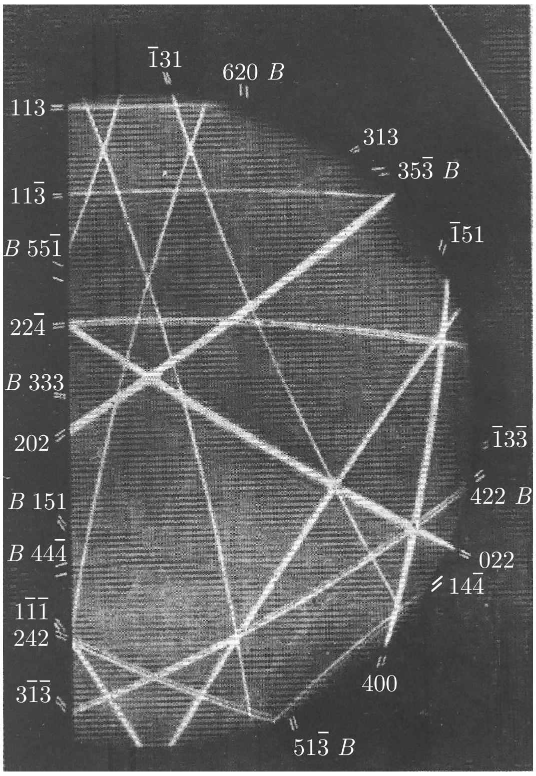


Рис. 1. Линии Косселя для монокристалла германия (рис. 14.4 из работы [4])

мирование KL. Здесь следует напомнить, что распространение испущенного в образце излучения отличается от его распространения в вакууме (или в однородной изотропной среде) и происходит согласно правилам распространения собственных волн в этом образце. Поэтому характеристики выходящего из образца излучения (в том числе и KL) зависят от свойств собственных волн в этом образце. А именно, эти характеристики могут зависеть от локализованных собственных мод образца, в частности, от локализованных рентгеновских мод [10]. В случае KL соответствующими собственными модами оказываются локализованные конические рентгеновские моды (XRCEM) [11, 12]. Отметим, что в оптике локализованные оптические моды хорошо известны, обнаружены и объяснены [12], поэтому, в силу общей природы оптических и рентгеновских локализованных мод, некоторые результаты, полученные для оптических мод, могут быть легко воспроизведены для XRCEM.

Основные наблюдаемые свойства KL можно описать, предполагая, что точечный рентгеновский источник в монокристалле возбуждает XRCEM. Последующий распад XRCEM (утечка рентгеновских фотонов через поверхность образца) описывает свойства KL. В частности, наблюдаемая сильная зависимость интенсивности KL от толщины образца связана с тем, что помимо утечки фотонов существует еще один канал затухания XRCEM, а именно, их поглощение внутри образца, которое сильно зависит от его толщины.

В настоящей работе представлена теория XRCEM [10, 11] в рамках приближения двуволновой динамической теории дифракции для неколлинеарной геометрии, неоднократно использовавшейся в приложении к рентгеновским KL (см., например, [4, 5, 7, 13]). Приложение этой теории к KL обсуждается для различных интервалов значений параметров образцов: непоглощающие кристаллы, кристаллы с изотропным поглощением, образцы с сильным проявлением эффекта Бормана и многослойные искусственно выращенные структуры, широко используемые в качестве рентгеноских зеркал.

2. РЕНГЕНОВСКИЕ СОБСТВЕННЫЕ ВОЛНЫ

Как хорошо известно (см., например, [14, 15]), в условиях дифракции рентгеновские собственные волны в кристалле в приближении двуволновой динамической теории дифракции представимы в виде следующей суперпозиции двух плоских волн:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \exp(i\omega t) \times \\ \times \left[\mathbf{E}^+ \exp(i\mathbf{K}^+ \cdot \mathbf{r}) + \mathbf{E}^- \exp(i\mathbf{K}^- \cdot \mathbf{r})\right], \quad (1)$$

$$\mathbf{K}^+ - \mathbf{K}^- = \boldsymbol{\tau}, \quad \mathbf{K}_j^+ = \boldsymbol{\tau}/2 \pm \mathbf{q}^\pm,$$

где $\mathbf{E}^+$ и $\mathbf{E}^-$ — амплитуды электрического поля в отдельных плоских волнах этой суперпозиции, $\mathbf{q}^\pm$ — обусловленные дифракцией добавки к волновым векторам, волновые векторы $\mathbf{K}^\pm$ связаны посредством условия Брэгга с вектором обратной решетки кристалла $\boldsymbol{\tau}$, соответствующим рассматриваемому дифракционному условию. Амплитуды $\mathbf{E}^+$ и $\mathbf{E}^-$ в суперпозиции (1) определяются системой линейных уравнений

$$\begin{aligned} &(\varepsilon_0 - \mathbf{K}^{+2}/\kappa^2)\mathbf{E}^+ + \varepsilon_\tau \mathbf{E}^- = 0, \\ &\varepsilon_{-\tau}\mathbf{E}^+ + (\varepsilon_0 - \mathbf{K}^{-2}/\kappa^2)\mathbf{E}^- = 0, \end{aligned} \quad (2)$$

где выражения для амплитуд фурье-разложения тензора диэлектрической проницаемости кристалла ε_0 и ε_τ оказываются различными для различных периодических структур, $\kappa = \omega\varepsilon_0^{1/2}/c$ вне кристалла. В случае достаточно жесткого рентгеновского излучения и обычных кристаллов эти величины выражаются через рентгеновскую структурную амплитуду рассеяния (см., например, [14, 15]):

$$\varepsilon_0 = (4\pi/Vk^2)F_0, \qquad \varepsilon_\tau = (4\pi/Vk^2)F_\tau, \tag{3}$$

где F_τ — рентгеновская структурная амплитуда рассеяния на угол, определенный рефлексом, соответствующим $\boldsymbol{\tau}$, F_0 — та же амплитуда рассеяния на нулевой угол, а V — объем элементарной ячейки.

Решение системы (2) показывает, что собственными поляризациями являются π- и σ-поляризации, так что векторная система (2) разделяется на две скалярных системы для скалярных амплитуд E^+ и E^-, относящихся к π- и σ-поляризациям собственных волн, соответственно. Поэтому амплитуды и другие параметры, входящие в (1)–(3), будут записываться как $\mathbf{K}_p^\pm$ и $\mathbf{E}_p^\pm$, т. е с добавленным поляризационным индексом «p», принимающим два значения π и σ, относящихся к π- и σ-поляризациям собственных волн, соответственно. В результате решения системы (2) для каждой собственной поляризации находятся две собственные волны с различными дифракционными добавками к волновым векторам $\mathbf{q}^\pm$, сильно зависящие от величины отклонения волновых векторов (или частоты) от точного условия Брэгга.

Отношение E^+ к E^- в двух найденных собственных волнах дается следующей формулой:

$$\xi^\pm = \left(\frac{E^-}{E^+}\right)_\pm = \frac{\varepsilon_\tau}{\alpha^\pm[\alpha^2 - (\varepsilon_\tau)^2]^{1/2}}, \tag{4}$$

где $\alpha = \boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{\tau} + 2\mathbf{k})/k^2$ — параметр, определяющий отклонение от точного условия Брэгга.

Чтобы найти XRCEM, требуется решить граничную задачу (отдельную для собственной π- и σ-поляризаций). Поскольку соответствующие решения отличаются только благодаря поляризационному фактору, ниже будет рассмотрен только случай σ-поляризации. Случай π-поляризации описывается теми же формулами при замене в них величин $F_{\sigma\tau}$ на $F_{\pi\tau}$.

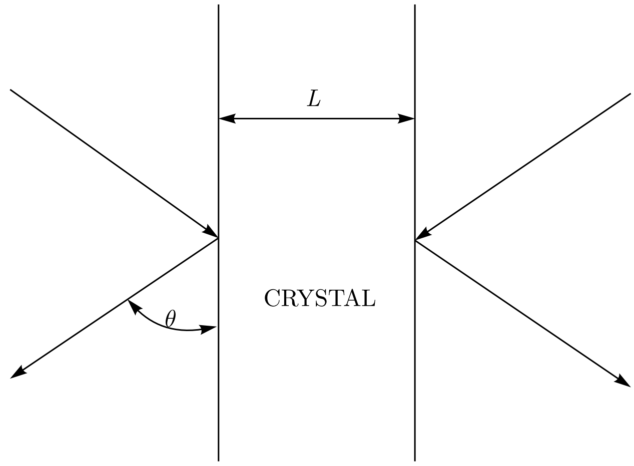


Рис. 2. Схема граничной задачи для рентгеновских локализованных конических мод

3. ГРАНИЧНАЯ ЗАДАЧА

Начнем рассмотрение граничной задачи в формулировке, предлагающей, что плоская вона дифрагирующей σ-поляризации наклонно падает на планарный кристаллический слой (см. рис. 2). Амплитуды двух собственных волн E^+ и E^-, возбужденных в кристаллическом слое падающей волной с волновым вектором $\mathbf{k}$ (предполагается, что амплитуда падающей волной равна единице, а направление распространения близко к направлению, удовлетворяющему условию Брэгга), определяются уравнениями

$$E_+^+ + E_-^+ = 1, \qquad \exp[iK_+^{t-}L]\xi^+E_+^+ + \exp[iK_-^{t-}L]\xi^-E_-^+ = 0, \tag{5}$$

где L — толщина слоя, а K_+^{t-} и K_-^{t-} — компоненты волновых векторов, параллельные вектору $\boldsymbol{\tau}$.

Амплитудные коэффициенты отражения R_a и прохождения T_a для дифрагирующей σ-поляризации принимают вид

$$R_a = -i\varepsilon_\tau\frac{\sin qL}{(4q/\tau)\cos qL - i\alpha\sin qL}, \qquad T_a = \frac{4q}{\tau}\,\frac{\exp[i\tau L/2]}{(4q/\tau)\cos qL - i\alpha\sin qL}, \tag{6}$$

где $q = (\tau/4)[(b\alpha)^2 + b(\varepsilon_\tau)^2]^{1/2}$, а геометрический параметр $b = \cos(\mathbf{K}^-, \mathbf{s})/\cos(\mathbf{K}^+, \mathbf{s})$ зависит от взаимной ориентации τ, нормали к образцу s и волнового вектора $\mathbf{K}^+$ (или $\mathbf{K}^-$) следующим образом:

$$b = -\frac{\operatorname{tg}^2(\boldsymbol{\tau},\mathbf{s}) + \operatorname{tg}^2(\mathbf{K}^-,\mathbf{s}) - \operatorname{cosec}^2(\boldsymbol{\tau},\mathbf{s}) - \operatorname{cosec}^2(\mathbf{K}^-,\mathbf{s}) - 2\cos\varphi \operatorname{tg}(\boldsymbol{\tau},\mathbf{s})\operatorname{tg}(\mathbf{K}^-,\mathbf{s})}{\operatorname{tg}^2(\boldsymbol{\tau},\mathbf{s}) + \operatorname{tg}^2(\mathbf{K}^-,\mathbf{s}) - \operatorname{cosec}^2(\boldsymbol{\tau},\mathbf{s}) - \operatorname{cosec}^2(\mathbf{K}^-,\mathbf{s}) - 2\cos(\varphi-\pi) \operatorname{tg}(\boldsymbol{\tau},\mathbf{s})\operatorname{tg}(\mathbf{K}^-,\mathbf{s})}. \quad (7)$$

Отметим, что уравнение (6) описывает отражение и прохождение в случае как непоглощающих, так и поглощающих кристаллов. В частности, изотропное поглощение может быть учтено путем мнимой добавки к компоненте амплитуды фурье-разложения тензора диэлектрической проницаемости кристалла ε_0, а специфика поглощеня, связанная с дифракцией, учитывается путем мнимой добавки к ε_τ.

Коэффициенты отражения $R = |R_a|^2$ и прохождения $T = |T_a|^2$ испытывают осцилляции как функции частот вне области селективного отражения (BSR). Для непоглощающих слоев соотношение $R + T = 1$ выполняется для всех частот. При $q = n\pi/L$, где n — целое число, $R = 0$, а $T = 1$.

На частотной границе BSR коэффициент отражения $R = |R_a|^2$ равен

$$R = \frac{1}{1 + (2/\varepsilon_\tau L\tau)^2}. \quad (8)$$

Точно на частотной середине BSR коэффициент отражения $R = |R_a|^2$ равен

$$R = \frac{(\operatorname{sh}\varepsilon_\tau L\tau)^2}{(\operatorname{ch}\varepsilon_\tau L\tau)^2}. \quad (9)$$

Для простоты изложения граничная задача для рентгеновских локализованных конических мод была сформулирована выше для симметричного случая Брэгга ($b = -1$).

4. РЕНТГЕНОВСКИЕ КРАЕВЫЕ МОДЫ

Существует полная аналогия между оптикой рентгеновского излучения и оптикой видимого света, поэтому подобно хорошо известным в фотонных кристаллах оптическим локализованным краевым модам на дискретных частотах вне BSR должны также существовать XRCEM на дискретных частотах вне BSR. Так же, как в оптическом случае, изученном в работе [12], дисперсионное уравнение для XRCEM может быть получено как условие разрешимости однородного уравнения, получаемого из уравнения (5). Отметим, что, как следует из решения однородного уравнения, краевая мода является линейной суперпозицией двух собственных волн с отношением амплитуд

$$\frac{E_-^+}{E_+^+} = -1.$$

Условие разрешимости требует обращения в нуль детерминанта уравнения (5) и приводит к следующему дисперсионному уравнению для XRCEM:

$$\operatorname{tg}(qL) = -4i(q/\tau)/\alpha. \quad (10)$$

В общем случае решение уравнения (10), определяющего частоты XRCEM (ω_{XREM}), могут быть найдены только численно. Частоты XRCEM ω_{XREM} оказываются комплексными величинами, которые могут быть представлены в виде

$$\omega_{XREM} = \omega_{EM}^0(1 + \Delta i),$$

где Δ оказывается малым параметром в реальных ситуациях. Таким образом, XRCEM оказываются слабо затухающими во времени, т. е. они являются квазистационарными модами. К счастью, для некоторого предельного случая может быть найдено аналитическое решение для достаточно малого значения параметра Δ, обеспечивающего выполнение условия

$$(qL)\operatorname{Im}(q/\tau) \ll 1.$$

В этом случае значения действительной части ω_{XREM}, т. е. ω_{XREM}^0, оказываются совпадающими с частотами нулевого значения коэффициента отражения R для непоглощающего слоя и комплексная частота XRCEM определяется соотношением

$$Lq = n\pi,$$
$$\Delta = -\frac{1}{2}\,\frac{\varepsilon_\tau(n\pi)^2}{[(\varepsilon_\tau L\tau/4)]^2}, \quad (11)$$

где n — целое число, нумерующее XRCEM.

Время жизни XRCEM, зависящее от мнимой части частоты (Δ), в этом предельном случае оказывается пропорциональным третьей степени толщины образца L и дается выражением

$$\tau_{XREM} \approx (L\varepsilon_0^{1/2}/c)[L(\varepsilon_\tau)\tau/\pi n]^2. \quad (12)$$

Свойства XRCEM подобны свойствам оптических краевых мод, а их детальное описание можно найти в работе [12], поэтому ниже мы обсудим только основные свойства XRCEM, без их подробного вывода. XRCEM нумеруются целым числом n ($n = 1$ соответствует XRCEM с частотой ближайшей к частотной границе BSR), электромагнитное поле XRCEM локализовано внутри слоя и промодулировано в пространстве на толщине слоя с числом периодов модуляции, совпадающим с номером XREM n. В непоглощающем слое конечное время жизни XRCEM обусловлено утечкой излучения через поверхности слоя, поэтому время жизни возрастает с увеличением толщины слоя L в рассматриваемом предельном случае как третья степень L, что приводит к бесконечному времени жизни XRCEM для бесконечного L.

5. СПЕКТРАЛЬНОЕ (УГЛОВОЕ) РАСПРЕДЕЛЕНИЕ В ЛИНИИ КОССЕЛЯ

Рассматривая характеристики выходящего из образца рентгеновского излучения (в нашем случае линий Косселя), которые зависят от свойств собственных волн в образце, мы видим, что в случае линий Косселя соответствующими собственными модами оказываются XRCEM. В рентгеновской оптической задаче, соответствующей граничной задаче, схематически показанной на рис. 2 (как раз к которой относится рассматриваемая ниже задача испускания фотона точечным рентгеновским источником, помещенным в совершенный кристалл), должно быть исследовано уравнение вида

$$\operatorname{rot}\operatorname{rot}\mathbf{E} - c^{-2}\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r})\partial^2\mathbf{E}/\partial t^2 = \mathbf{F}(\mathbf{r},t), \qquad (13)$$

где $\mathbf{E}$ — электрический вектор, $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r})$ — тензор диэлектрической проницаемости слоя на рис. 2, $\mathbf{F}(\mathbf{r},t)$ — векторная функция, явный вид которой определяется конкретным изучаемым физическим процессом. Это может быть задача нелинейного преобразования частоты или задача об излучении движущейся заряженной частицы и т. д. [12]. Общим результатом названных конкретных случаев является нахождение амплитуд собственных волн, возбуждаемых в слое благодаря неоднородности $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ в (13). В рассматриваемом здесь случае линий Косселя [1, 4, 5] (излучение точечного рентгеновского источника, помещенного в совершенный кристалл) в качестве неоднородности в (13) должна быть использована функция $\mathbf{F}(\mathbf{r})$, соответствующая точечному рентгеновскому источнику и отличающаяся от нуля только внутри слоя. Известно, что влияние кристалла проявляется в подавлении испускания фотонов в направлении, соответствующем BSR (для фиксированной частоты рентгеновского излучения), и в существенном перераспределении углового распределения рентгеновского излучения вблизи границы BSR (как раз это перераспределение и создает линию Косселя). Для направлений испускания, далеких от границы BSR, периодичность кристалла практически не влияет на угловое распределение рентгеновского излучения. Таким образом, проявляется тонкая угловая структура распределения рентгеновского излучения вблизи границы BSR. Наряду с подавлением испускания в направлениях, соответствующих BSR, возникают максимумы испускания вне BSR для направлений, определяемых XRCEM с различными номерами n, также вне BSR, однако близких к направлениям, соответствующим границам BSR.

Если для начала пренебречь поглощением рентгеновского излучения в образце, амплитуды XREM для различных n могут быть найдены из решения системы (5). Как было показано в работах [12, 16], найденные из решения системы (5) на частоте XRCEM величины E_+^+ и E_-^+ при выполнении соотношений

$$Lq = n\pi, \quad q = (\tau/2)[(\alpha_p)^2 - (F_p)^2]^{1/2}, \qquad (14)$$

практически совпадают с соответствующими амплитудами XRCEM, возбужденными в образце. Таким образом, для фиксированного направления испускания существует тонкая частотная структура линии эмиссии, определяемая различием частот XRCEM, соответствующих различным n. Поскольку существуют направления испускания, эквивалентные рассматриваемому, они (на обсуждаемых частотах) формируют так называемый конус Косселя с осью, совпадающей с направлением $\boldsymbol{\tau}$. Геометрия конуса Косселя приведена на рис. 3. Углы между векторами $\mathbf{K}^-$ и $\mathbf{s}$ (нормаль к поверхности образца), $(\mathbf{K}^-,\mathbf{s})$, и между векторами $\boldsymbol{\tau}$ и $\mathbf{s}$, $(\boldsymbol{\tau},\mathbf{s})$, а также угол φ в выражении (7) совместно с соответствующими векторами представлены на рис. 3). В случае, если векторы $\boldsymbol{\tau}$ и $\mathbf{s}$ параллельны (симметричный случай Брэгга), параметр $b = -1$ (см. рис. 3*а*) и не зависит от азимутального угла φ.

В эксперименте обычно наблюдается сечение конуса Косселя поверхностью образца (линии Косселя, см. рис. 1). Поэтому наблюдаемые линии Косселя — это либо окружности (для векторов $\boldsymbol{\tau}$, перпендикулярных поверхности образца), либо эллипсы (в эксперименте типична только частичная регистрация названных фигур, как на рис. 1).

В двуволновом приближении динамической теории дифракции явные выражения для частот XRCEM с различными номерами n, следующие из (14) в первом порядке дифракции, и соответственно, положения частотных максимумов в спектре линии Косселя (KL) определяются выражением

$$\pm(\omega-\omega_B)/\omega_B = (1/2)[\varepsilon_\tau^2 + (2\pi n/\tau L)^2]^{1/2}, \quad n = 1,2,3,\ldots, \qquad (15)$$

где брэгговская частота равна

$$\omega_B = (c\tau/2\varepsilon_0^{1/2})/\sin\theta.$$

Таким образом, существует тонкая структура линии эмиссии, определяемая разностью частот XRCEM, с различными номерами n. На рис. 4 и 5 представлены

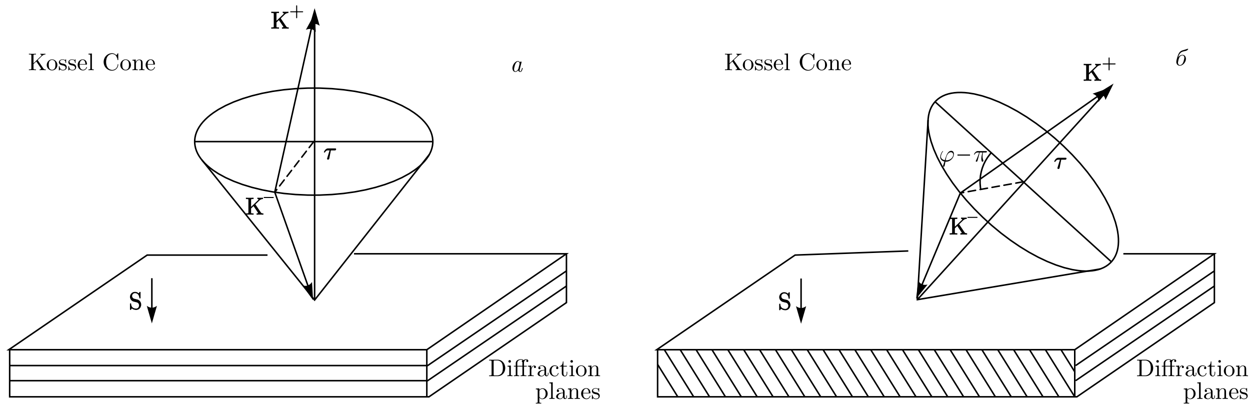


Рис. 3. Схема геометрии линий Косселя (к определению углов в (7)): a — $\boldsymbol{\tau}$ перпендикулярен к поверхности образца, $б$ — $\boldsymbol{\tau}$ под углом к поверхности образца, отличным от $\pi/2$. Представлено сечение конуса Косселя плоскостью, перпендикулярной к $\boldsymbol{\tau}$, на расстоянии от вершины конуса, равном $\tau/2$, сплошная линия на этой плоскости — ее пересечение с плоскостью $(\boldsymbol{\tau}\mathbf{s})$, штриховая линия — ее пересечение с плоскостью $(\boldsymbol{\tau}\mathbf{K}^-)$, φ — азимутальный угол вектора $\mathbf{K}^-$ относительно $\boldsymbol{\tau}$

результаты расчетов, выполненных путем решения системы (5), для квадрата амплитуд XRCEM для нескольких первых XRCEM ($n = \pm1, \pm2, \pm3$). Можно видеть, что спектр линии Косселя симметричен относительно BSR, если в образце отсутствует поглощение. На рис. 4 и 5 видно, что положение частотных максимумов амплитуд XRCEM совпадает с положением частотных нулей коэффициента отражения R.

На рис. 4 и 5 также видна сильная зависимость спектрального положения и интенсивности линий Косселя от толщины образца.

6. ПОГЛОЩАЮЩИЕ КРИСТАЛЛЫ

Спектральное распределение KL, которое мы обсуждали выше, в пренебрежении поглощением в образце имеет ограниченное применение для описания реального эксперимента. Оно может соответствовать очень тонким образцам или монокристаллам, образованным легкими химическими элементами. Однако, как правило, поглощение определяет существенные черты эксперимента. Поэтому ниже к рассмотрениям предыдущего раздела мы добавим учет поглощения рентгеновского излучения, начиная со случая изотропного поглощения рентгеновского излучения. Изотропное поглощение рентгеновского излучения можно учесть введением небольшой мнимой части в изотропную составляющую ε_0 рентгеновского тензора диэлектрической проницаемости, т. е., полагая $\varepsilon = \varepsilon_0(1 + i\gamma)$, где γ — небольшой положительный параметр. На рис. 6 и 7

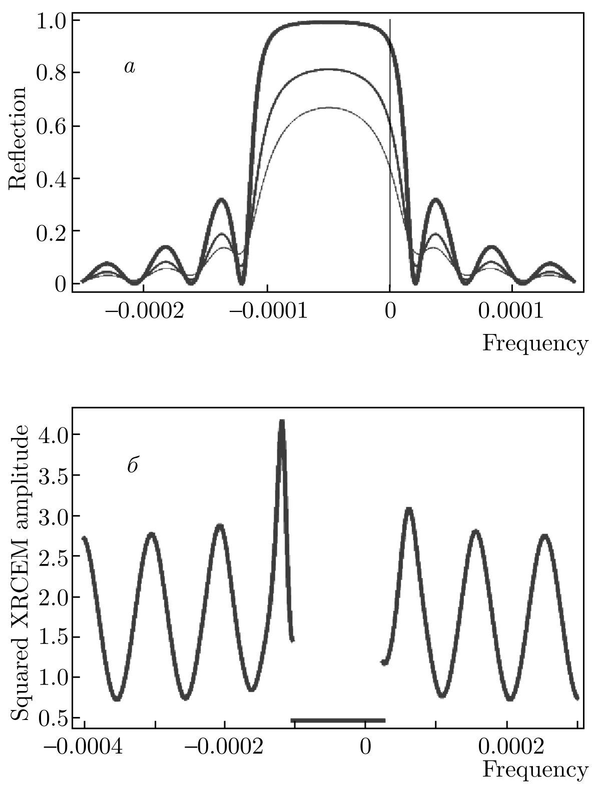


Рис. 4. Зависимости коэффициента отражения от безразмерной частоты $\omega_d = \varepsilon_\tau[2(\omega - \omega_B)/(\omega_B\varepsilon_\tau - 1)]$ для различных значений мнимой части диэлектрической восприимчивости $\gamma = 0$, 0.00001 и 0.00002, где γ определяется соотношением $\varepsilon = \varepsilon_0(1 + i\gamma)$ (чем больше поглощение γ, тем тоньше линия) (a). Квадрат амплитуды XRCEM (здесь и на рисунках далее в произвольных единицах) при $\gamma = 0$ для трех первых XRCEM ($n = \pm1$, ±2, ±3) ($б$). $\varepsilon_\tau = 0.0001$, толщина образца в числе периодов $N = 20000$

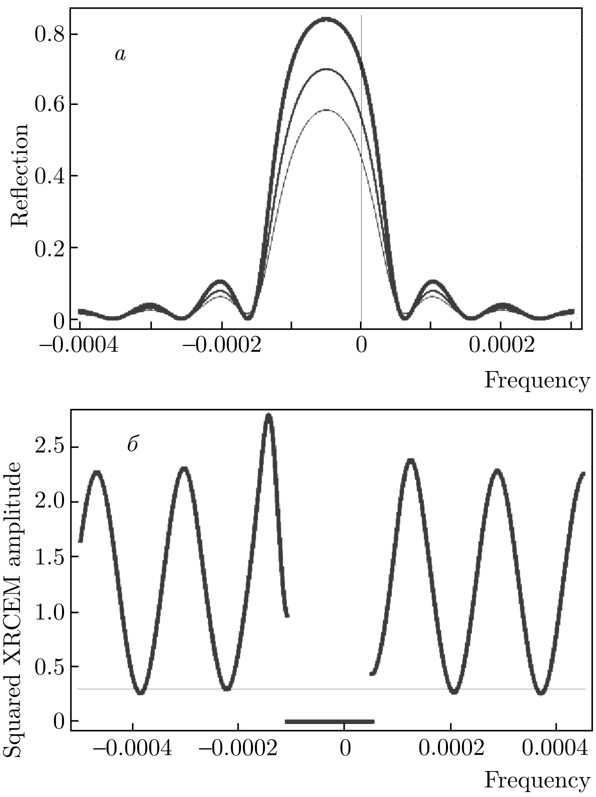


Рис. 5. То же, что на рис. 4, для $N = 12\ 000$

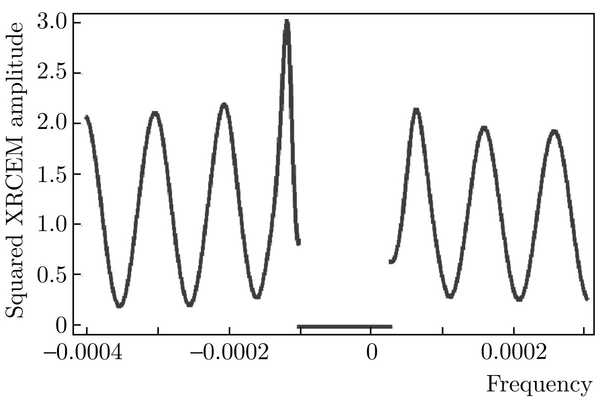


Рис. 6. Рассчитанные зависимости квадрата амплитуды XRCEM от частоты для изотропно поглощающего кристалла при $\gamma = 0.00002$ для трех первых XRCEM ($n = \pm1$, ±2, ±3). $\varepsilon_\tau = 0.0001$, толщина в числе периодов $N = 20\ 000$

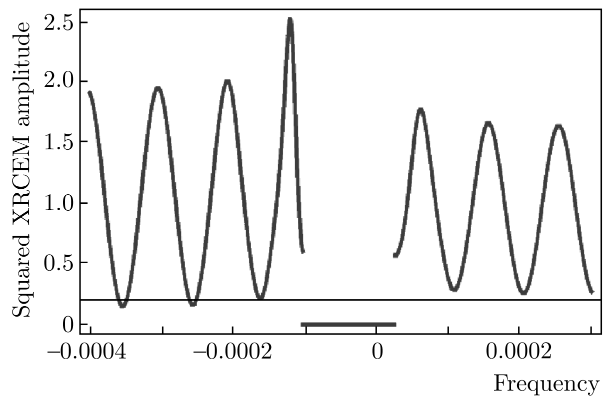


Рис. 7. То же, что на рис. 6, для увеличенного поглощения ($\gamma = 0.00004$)

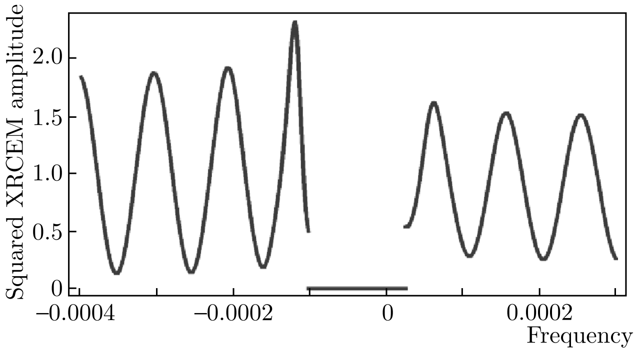


Рис. 8. То же, что на рис. 6, для дальнейшего увеличения поглощения ($\gamma = 0.00005$)

представлены результаты расчетов тех же величин, что и на рис. 4 и 5, но для изотропно поглощающего образца.

Как видно из рис. 4–8, изотропное поглощение не изменяет спектральную форму спектрального распределения KL, сохраняя, в частности, симметрию спектра относительно BSR и уменьшая при этом амплитуды XRCEM для всех номеров n.

В случае изотропного поглощения интенсивность излучения из образца в KL на один акт испускания уменьшается по сравнению со случаем непоглощающего кристалла, причем это уменьшение растет с увеличением толщины образца. Физическая интерпретация этого явления выглядит следующим образом. С увеличением толщины образца L время жизни фотона, находящегося в состоянии XRCEM, растет (как третья степень L), следовательно, время его взаимодействия с кристаллом также растет, приводя к увеличению его поглощения в состоянии XRCEM.

В непоглощающих кристаллах утечка фотонов через поверхности образца является единственным процессом, определяющим интенсивность KL и затухание (время жизни) XRCEM. В поглощающих кристаллах существует дополнительный процесс, влияющий на затухание (время жизни) XRCEM. Это — поглощение фотонов внутри слоя, которое приводит к уменьшению утечки фотонов через поверхности и, следовательно, к уменьшению интенсивности KL. Количественно влияние поглощения на интенсивности KL можно описать, вводя времена жизни XRCEM по отношению к утечке фотонов через поверхности τ_l и по отношению к поглощению фотонов в слое τ_a. Отношение доли фотонов, «вытекших» из слоя, к доле фотонов, поглощенных в слое, равно τ_a/τ_l. Время утечки τ_l определяется выражением (12). Как показано в работе [16], поглощение фотонов в слое, зависящее от γ, увеличивается на частоте XRCEM, что означает уменьшение времени жизни XRCEM τ_a по отношению к поглощению в слое при росте γ и, соответственно, к уменьшению доли фотонов, «вытекших» из слоя. Для слабого поглощения уменьшение доли фотонов, «вытекших» из слоя, на частоте XRCEM при условии $(\pi n)^2 > \gamma a^3$ по сравнению со случаем непоглощающих кристаллов может быть представлено аналитическим выражением:

$$R + T = 1 - 2\gamma a^3/(\pi n)^2, \tag{16}$$

где $a = \tau L \varepsilon_\tau/4$. Поскольку, согласно (12), время жизни XRCEM по отношению утечке фотонов через поверхности τ_l растет как куб толщины образца L, утечка фотонов через поверхности образца в общем случае для совершенного поглощающего слоя становится слабой для достаточно большой толщины L. Этот вывод объясняет очень старое наблюдение уменьшения интенсивности линий Косселя при увеличении толщины образца L (см., например, рис. 1.6 в работе [5]).

Изменение утечки фотонов в KL при вариациях толщины образца может быть оценено путем вычисления величины $T + R$ для изменяемых толщин образца L. Минимумы величины $R+T$, расположенные на частотах XRCEM, дают оценку уменьшения утечки фотонов в XRCEM при увеличении поглощения и толщины слоя L. На рис. 9 и 10 показано, как убывает утечка фотонов в KL с увеличением L и γ (растет глубина минимумов величины $R + T$ на частотах XREM).

Отметим, что значения минимумов величины $T + R$ на рис. 9 и 10 согласуются с их значениями, следующими из формулы (16).

Зависимости, рассчитанные для значений параметров образца, допускающих экспериментальное разрешение индивидуальных компонент KL (различных n), дают частотное (угловое) положение индивидуальных компонент и их относительные интенсивности. Следующее общее, но не очевидное утверждение «интенсивность KL на индивидуальный акт эмиссии уменьшается с увеличением толщины образца», относящееся к KL в образцах с

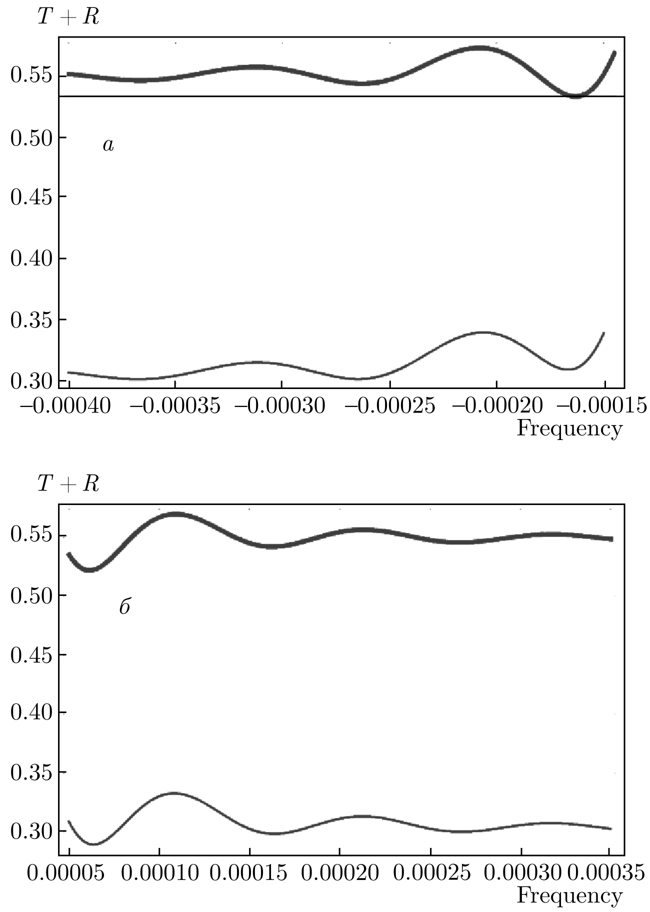


Рис. 9. Значения T+R, вычисленные для частотного интервала, содержащего три первые XRCEM ($n = \pm 1$, ± 2, ± 3) для высокочастотной (*б*) и низкочастотной (*а*) границ BSR при различных значениях параметра поглощения $\gamma = 0.00001$ (жирные линии) и $\gamma = 0.00002$. $\varepsilon_\tau = 0.0001$, толщина образца в числе периодов $N = 20000$

изотропным поглощением, следует из выполненных расчетов, а также из приведенных выше рассуждений.

Что касается достаточно толстых образцов, в которых из-за очень малых частотных (угловых) интервалов между индивидуальными компонентами они не разрешаются экспериментально, измеренные экспериментально спектры KL состоят только из двух непрерывных компонент.

На рис. 11 и 12 представлены спектры KL для толстых поглощающих образцов (на рис. 12*а* для более сильного, чем на рис. 11). Сравнение спектров, приведенных на рис. 12*б*, позволяет сделать вывод о том, насколько сильно однородное и изотропное поглощения влияет на спектр KL для толстых поглощающих образцов.

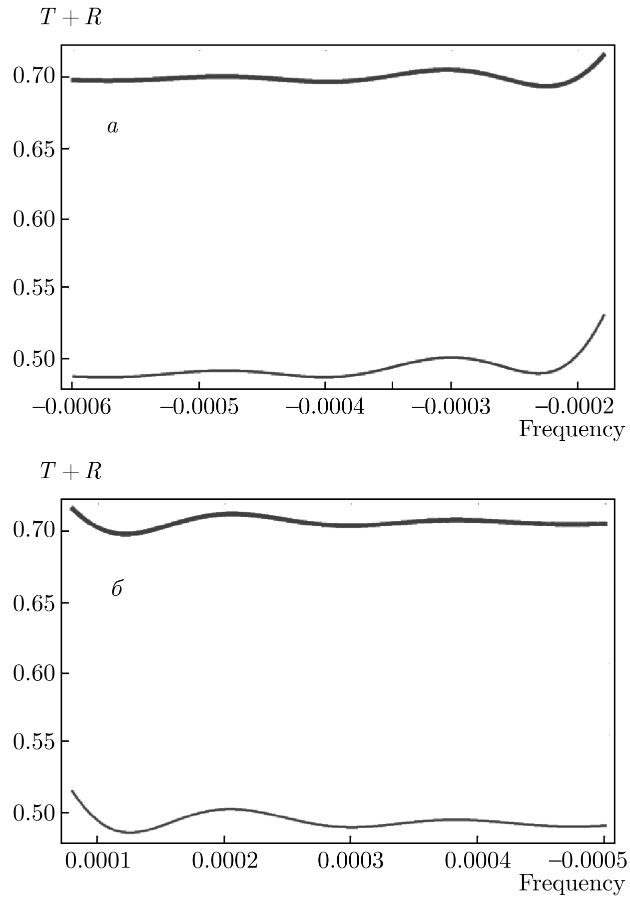


Рис. 10. Значения $T+R$, вычисленные для частотного интервала, содержащего три первые XRCEM ($n = \pm 1$, ± 2, ± 3), для высокочастотной (*б*) и низкочастотной (*a*) границ BSR при различных значениях параметра поглощения $\gamma = 0.00001$ (жирные линии) и $\gamma = 0.00002$. $\varepsilon_\tau = 0.0001$, толщина образца в числе периодов $N = 12000$

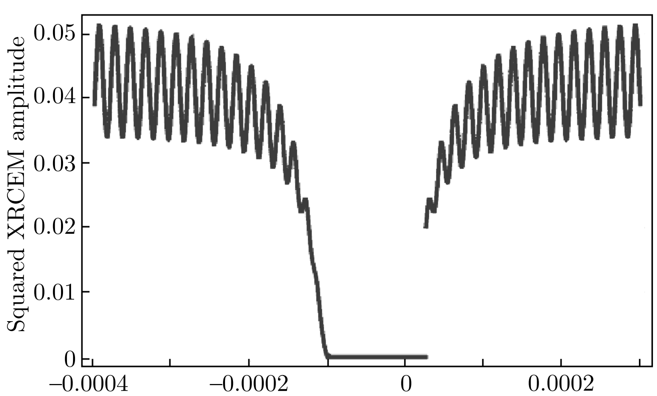


Рис. 11. Спектр линии Косселя, вычисленный для толстого поглощающего образца, $\varepsilon_\tau = 0.0001$, $\gamma = 0.00001$, $N = 100000$

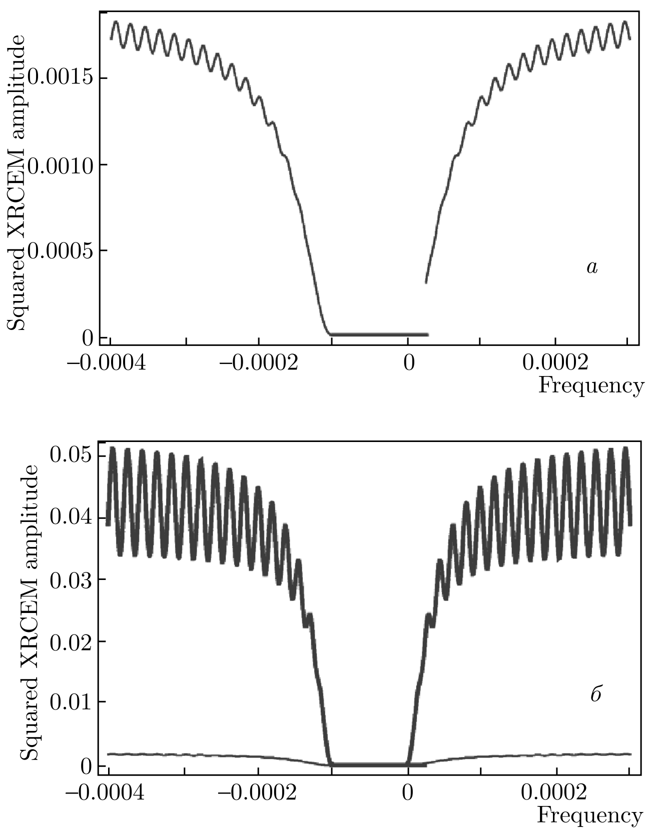


Рис. 12. Спектр линии Косселя, вычисленный для толстого поглощающего (более сильно, чем на рис. 11) образца (*a*). Иллюстрация степени зависимости спектра от величины поглощения для толстого образца (*б*). Кривые представлены в одном масштабе, $\gamma = 0.00001$ (жирная линия) и 0.00002. $\varepsilon_\tau = 0.0001$, $\gamma = 0.00002$, $N = 100000$

7. ВЛИЯНИЕ ЭФФЕКТА БОРМАНА НА СПЕКТРЫ

Как известно, в совершенных поглощающих монокристаллах процесс дифракции может быть подвержен сильному влиянию эффекта Бормана [4,5,7]. В узком угловом интервале проявление эффекта Бормана может приводить к ослаблению поглощения рентгеновского пучка, тогда как для узкого углового интервала в близком направлении пучка эффект Бормана приводит к усилению поглощения рентгеновского пучка. Другими словами, эффект Бормана проявляет себя уменьшением или увеличением поглощения рентгеновского излучения в условиях дифракции в совершенных поглощающих монокристаллах.

На рис. 13 показано, как эффект Бормана влияет на спектры отражения. Как известно, влияние эффекта Бормана в рамках двуволновой динамической теории дифракции описывается добавлением

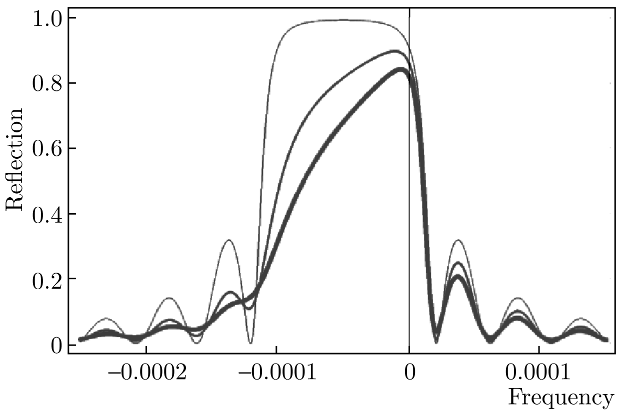


Рис. 13. Влияние эффекта Бормана на спектр отражения рентгеновского излучения для случаев разной силы его проявления при $\mathrm{Re}\,\varepsilon_\tau = 0.0001$, $\gamma = 0$, $\mathrm{Im}\,\varepsilon_\tau = 0$, 0.00001, 0.00002, $N = 20000$. Чем больше величина эффекта Бормана, тем толще линия

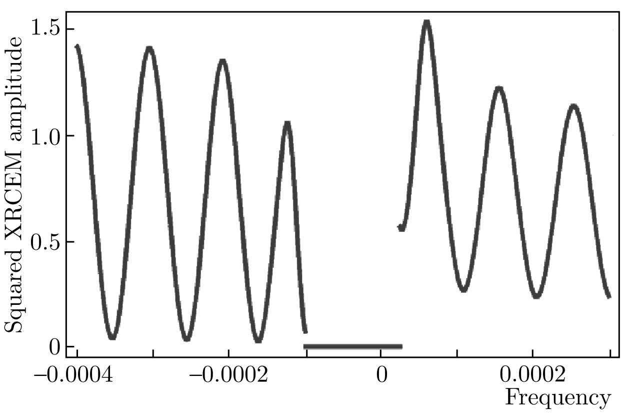


Рис. 14. Влияние эффекта Бормана на спектр линии Косселя при $\mathrm{Re}\,\varepsilon_\tau = 0.0001$, $\gamma = 0$, $\mathrm{Im}\,\varepsilon_\tau = 0.00001$, $N = 20000$

к рентгеновской структурной амплитуде рассеяния (ε_τ) мнимой добавки [14], т. е. разной силе проявления эффекта Бормана в приведенных на рис. 13 рассчитанных зависимостях соответствуют различные величины мнимых добавок к ε_τ. Очевидно, что эффект Бормана [4, 5, 7] влияет на спектр KL. Как будет показано ниже, влияние эффекта Бормана на спектры KL естественно описывается в рамках развиваемого здесь подхода, основанного на XRCEM.

Влияние эффект Бормана на спектр KL для толстых поглощающих образцов при низком частотном (угловом) экспериментальном разрешении XRCEM для различных n показано на рис. 16 и 17.

На рис. 14–17 видно, что эффект Бормана нарушает симметрию KL относительно BSR (поглощение на низкочастотной границе BSR меньше, чем на вы-

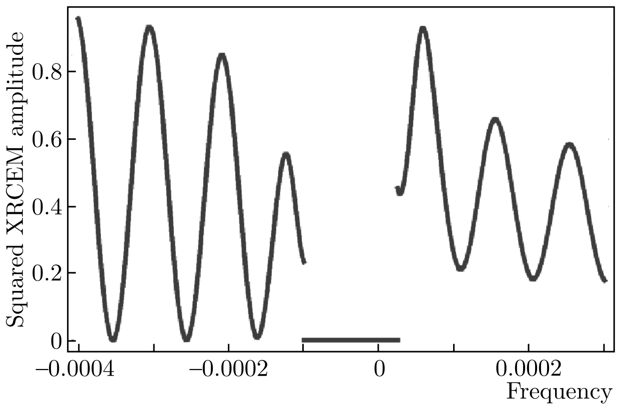


Рис. 15. Влияние эффекта Бормана на спектр линии Косселя при $\mathrm{Re}\,\varepsilon_\tau = 0.0001$, $\gamma = 0$, $\mathrm{Im}\,\varepsilon_\tau = 0.00002$, $N = 20000$

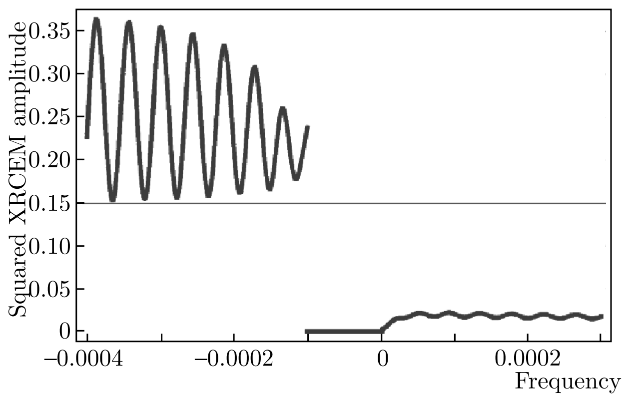


Рис. 16. Влияние эффекта Бормана на спектр линии Косселя при $\mathrm{Re}\,\varepsilon_\tau = 0.0001$, $\gamma = 0.00002$, $\mathrm{Im}\,\varepsilon_\tau = 0.00001$, $N = 45000$

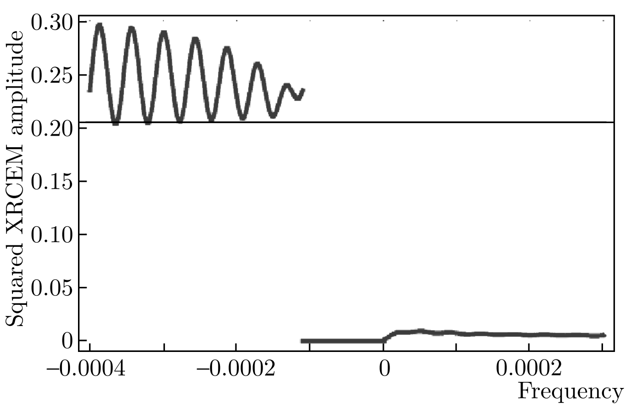


Рис. 17. Влияние эффекта Бормана на спектр линии Косселя при $\mathrm{Re}\,\varepsilon_\tau = 0.0001$, $\gamma = 0.00002$, $\mathrm{Im}\,\varepsilon_\tau = 0.00002$, $N = 45000$

сокочастотной ее границе), причем это нарушение сильно возрастает с увеличением толщины образца. Для достаточно толстых образцов отдельные моды XRCEM оказываются неразрешенными в эксперименте и спектр KL выглядит как сглаженные кривые на рис. 16 и 17. Рисунки 14 и 15 соответствуют эффекту Бормана в отсутствие изотропного поглощения ($\gamma = 0$). Однако при наличии изотропного поглощения ($\gamma > 0$) проявление эффекта Бормана может усилиться (ср. рис. 16, 17 и рис. 14, 15), при этом XRCEM могут быть практически полностью подавлены на высокочастотной границе BSR.

8. ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты выполненного выше изучения линий Косселя в рамках теории XRCEM находятся в хорошем общем согласии с известными экспериментальными данными. Тем не менее, не все теоретические предсказания по причине современных ограничений возможностей рентгеновской техники уже наблюдены (по сравнению с более продвинутой техникой оптического эксперимента). Эти ограничения для рентгеновских длин волн, в частности, относятся к спектральному разрешению и поляризационным измерениям. Поэтому спектральные (угловые) вариации интенсивности KL, соответствующие различным номерам XRCEM n, будучи порядка 10^{-5}, как видно на рис. 4–10 и рис. 13–17, оказываются обычно вне экспериментального разрешения рентгеновской техники. Разрешение дополнительно понижается в связи с типичным отсутствием рентгеновских поляризационных измерений. Напомним, что наблюдаемая интенсивность в случае низкого разрешения соответствует суперпозиции двух конусов Косселя, относящихся к π- и σ-поляризации с угловым различием в доли 10^{-4} радиана. Тем не менее, нет сомнений, что названные спектральные (угловые) вариации KL будут наблюдаться по мере улучшения рентгеновской техники (современный прогресс рентгеновской техники очень впечатляющ [17] и вселяет надежды на достижение ее необходимого улучшения уже в ближайшем будущем).

Здесь надо также принять во внимание, что спектральные зависимости, вычислявшиеся выше, относятся к источнику с «плоским» спектром, однако для рентгеновской флюоресценции конечная частотная ширина источника ограничивает спектральную ширину наблюдаемых KL.

В качестве дополнительного аргумента в поддержку сказанного можно назвать недавний прогресс в наблюдении и интерпретации явления той же природы, а именно, оптических линий Косселя [18–21]. В экспериментальных статьях по оптическим линиям Косселя в фотонных жидких кристаллах [18–20] были наблюдены вариации интенсивности линий Косселя, относящихся к различным номерам n оптических аналогов XRCEM, в частности, был наблюден оптический аналог эффекта Бормана [20], подобный эффекту, демонстрируемому на рис. 14–17.

Что касается измерений рентгеновских KL без разрешения индивидуальных максимумов, относящихся к XRCEM с различными номерами n, то соответствующие спектры должны состоять из двух непрерывных линий с их частотным (угловым) расположением вне высокочастотной и низкочастотной границ BSR (см. рис. 11, 12 и рис. 16, 17). Если поглощение оказывается изотропным и однородным, то линии оказываются симметричными относительно BSR с сильной зависимостью их интенсивности от толщины образца (см. рис. 11, 12). Однако если KL подвержена действию эффекта Бормана, то симметрия спектра относительно BSR нарушается и интенсивности двух линий оказываются различными, вплоть до того, что интенсивность одной из них может быть исчезающе малой для достаточно толстых образцов (см. рис. 16, 17). Эти качественные заключения развиваемой здесь теории находят свое подтверждение на рис. 1, на котором представлены результаты наблюдения рентгеновских KL в совершенном монокристалле германия, в котором разрешенные двойные линии состоят из двух разделенных линий различных интенсивностей. Другой общий вывод теории о понижении интенсивностей рентгеновских KL с увеличением толщины образца также находит свое экспериментальное подтверждение (см. рис. 1.6 в работе [5], на котором показано понижение интенсивностей KL и даже исчезновение некоторых из них с ростом толщины образца).

9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результатом выполненной работы является формирование ясной физической картины рентгеновских линий Косселя (и их возникновения в рамках единого подхода, основанного на теории XRCEM), существующих в совершенных монокристаллических слоях (прежде всего, соответствующие результаты относятся к особенностям рентгеновской флюоресценции в совершенных кристаллах). Развитый подход дает аналитический метод для описания результатов измерений, относящихся к упомянутым особенностям рентгеновской флюоресценции в совершенных кристаллах (рентгеновские линии Косселя) для каждого конкретного эксперимента. Что касается поляризационных свойств рентгеновской флюоресценции в совершенных кристаллах в линиях Косселя, то они определяются поляризационными свойствами XRCEM и оказываются двух типов, с π- и σ-поляризаций (в соответствии с двумя типами конусов Косселя, π- и σ-поляризованных). Положение максимумов интенсивности флюоресценции в спектре KL совпадает с последовательными частотами XRECM для последовательных n, которые нумеруют XRCEM. Спектр KL для пренебрежимо малого поглощения в кристаллическом слое является симметричным относительно области селективного отражения, в то время как для достаточно сильного поглощения эта симметрия может быть нарушенной из-за эффекта Бормана. В результате выполненного исследования может быть сформулировано следующее нетривиальное утверждение. Интенсивность линии Косселя в поглощающем кристаллическом слое для отдельного акта эмиссии уменьшается с увеличением толщины образца, однако это уменьшение может отсутствовать или быть уменьшенным на частоте флюоресценции, для которой реализуется эффекта Бормана.

Однако существует вопрос, который выходит за рамки проведенного рассмотрения. Это — вычисление абсолютной интенсивности эмиссии рентгеновской флюоресценции, выходящей из слоя в конусе Косселя. В эксперименте детектируемая интенсивность рентгеновской флюоресценции представляет собой результат некогерентного суммирования многих актов эмиссии, происходящих в различных положениях эмитирующих атомов внутри кристаллического слоя. Выше мы рассматривали эмиссию (затухание) XRCEM, существующую в кристаллическом слое. В нашем подходе конус Косселя флюоресценции в кристаллическом слое возникает в результате затухания (эмиссии) XRCEM. Очевидно, что для вычисления абсолютной интенсивности эмиссии в конус Косселя необходимо знать, как вероятность возбуждения XRCEM в отдельном акте эмиссии зависит от положения эмитирующего атома в кристаллическом слое. Естественно, например, что вероятность возбуждения XRCEM актом эмиссии вблизи поверхности и в середине слоя должны быть различными. Поэтому выше приводилась интенсивность рентгеновской флюоресценции, испускаемой в конус Косселя, в произвольных единицах, что вполне приемлемо, поскольку соответствующее спектральное распределение отличается от распределения абсолютной интенсивности только некоторым множителем, определяемым зависимостью вероятности возбуждения XRCEM в акте эмиссии от положения эмитирующего атома в кристаллическом слое.

Представленные выше соображения относительно абсолютной интенсивности на конусе Косселя не имеют отношения к частотным (угловым) положениям на конусе Косселя максимумов интенсивности (которые, согласно теории, одни и те же независимо от положения эмитирующего атома в кристаллическом слое). Этот теоретический результат находится в полном согласии с упомянутым во Введении экспериментальным фактом очень слабой зависимости наблюдаемой картины зависимости линий Косселя от расположения эмитирующих атомов в кристаллическом слое.

Экспериментальное наблюдение KL с характеристиками, согласующимися с представленной здесь теорией XRCEM, само по себе может рассматриваться как наблюдение XRCEM. Тем не менее, прямым доказательством связи KL с XRCEM может быть их подтверждение в измерениях с применением рентгеновской техники временной задержки детектирования. Если образование конуса Косселя рентгеновской флюоресценции при эмиссии отдельного атома происходит посредством возбуждения XRCEM, то эмиссия фотона рентгеновской флюоресценции из кристаллического слоя будет задержана относительно момента эмиссии отдельным атомом на временной интервал, определяемый временем жизни XRCEM. Для достаточно толстых и совершенных кристаллических слоев соответствующее время задержки может превосходить время флюоресценции отдельного атома. Таким образом, наблюдение временной задержки рентгеновской флюоресценции в конус Косселя может рассматриваться как прямое доказательство физического механизма флюоресценции в конус Косселя как процесса, осуществляющегося через возбуждение XRCEM.

Выше были изучены рентгеновские KL в обычных кристаллах с величинами периодичности порядка 10^{-8} см (и, следовательно, с величинами длин волн в XREM того же порядка). Заметим, что существуют искусственно выращенные структуры существенной прикладной важности с величинами периодичности, соответствующими мягкому рентгеновскому излучению. Это — многослойные рентгеновские зеркала (см., например, [22]), где мягкие рентгеновские линии Косселя наблюдаются в рентгеновской флюоресценции на характеристических линиях, определяемых химическим составом соответствующих слоев [23]. Детектирование KL в этих многослойных рентгеновских зеркалах может быть применено для изучения совершенства этих зеркал. Однако эта проблема выходит за рамки настоящей статьи. Отметим, что наблюдавшиеся сравнительно недавно нейтронные линии Косселя [3], как и для случая рентгеновских KL, могут быть описаны в рамках теории нейтронных локализованных мод [24].

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования России № 0033-2019-0001.

ЛИТЕРАТУРА

1. W. Kossel, V. Loeck, and H. Voges, Z. Für Phys. **94**, 139 (1935).

2. S. Kikuchi, Jap. J. of Phys. **5**, 83 (1928); doi:10.1038/1211019a0.

3. B. Sur, R. B. Rogge, R. P. Hammond et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 06505 (2002).

4. J. M. Cowley, *Diffraction Physics*, North-Holland, Amsterdam (1995).

5. A. Authier, *Dynamical Theory of X-Ray Diffraction*, Oxford University Press (2001).

6. V. Geist and R. Flagmeyer, Phys. Stat. Sol. (a) **26**, K1 (1974).

7. V. V. Lider, Crystallography Rep. **56**, 169 (2011).

8. M. von Laue, Ann. Phys. Lpz. **23**, 705 (1935).

9. G. Borrmann, Z. Kristallogr. **120**, 143 (1964).

10. V. A. Belyakov and N. Kaputkina, *Proc. of XIV Int. Symp. Nanophysics and Nanoelectronics*, Nizhnii Novgorod, Vol. 2, 327 (2010).

11. V. A. Belyakov, *Proc. of XXIV Int. Symp. Nanophysics and Nanoelectronics*, Nizhnii Novgorod, Vol. 2, 829 (2020).

12. V. A. Belyakov, *Diffraction Optics of Complex Structured Periodic Media*, 2nd ed., Springer, Chapts. 5–8 (2019).

13. A. M. Afanas'ev et al., JETP **95**, 472 (2002).

14. B. W. Batterman and H. Cole, Rev. Mod. Phys. **36**, 681 (1964).

15. V. A. Belyakov, *Diffraction Optics of Complex Structured Periodic Media*, Springer Verlag, Chapt. 3 (1992).

16. V. A. Belyakov and S. V. Semenov, JETP **109**, 687 (2009).

17. G. Bortel, G. Faigel, M. Tegze, and A. Chumakov, J. Synchrotron Rad. **23**, 214 (2016); doi:10.1107/s1600577515019037.

18. J. Schmidtke and W. Stille, Eur. Phys. J. B **31**, 179 (2003).

19. A. M. Risse and J. Schmidtke, J. Phys. Chem. C **123**, 2428 (2019); doi:10.1021/jpcc.8b11134.

20. L. Penninck, J. Beeckman, de P. Visschere, and K. Neyts, Phys. Rev. E **85**, 041702 (2012).

21. V. A. Belyakov, Crystals **10**, 541 (2020); doi:10.3390/cryst10060541.

22. N. N. Salashenko, N. I. Chkhalo, S. V. Gaponov et al., CEJP **1**, 191 (2003).

23. P. Jonnard et al., Phys. Res. B **452**, 12 (2019).

24. V. A. Belyakov, JETP **124**, 994 (2017).

ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 3, стр. 400–408

СПЕКТРАЛЬНОЕ УШИРЕНИЕ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ВИХРЕЙ ПРИ ФИЛАМЕНТАЦИИ В ПЛАВЛЕНОМ КВАРЦЕ В УСЛОВИЯХ АНОМАЛЬНОЙ ДИСПЕРСИИ ГРУППОВОЙ СКОРОСТИ

С. А. Шленов [a*], *Е. В. Васильев* [a**], *С. В. Чекалин* [b], *В. О. Компанец* [b], *Р. В. Скиданов* [c]

[a] *Физический факультет и Международный лазерный центр Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова 119991, Москва, Россия*

[b] *Институт спектроскопии Российской академии наук (ИСАН) 142190, Троицк, Москва, Россия*

[c] *Самарский государственный университет 443086, Самара, Россия*

Поступила в редакцию 10 ноября 2020 г.,
после переработки 24 ноября 2020 г.
Принята к публикации 25 ноября 2020 г.

Экспериментально и численно исследованы особенности спектрального уширения фемтосекундных оптических вихрей при самовоздействии в среде с аномальной дисперсией групповой скорости. Установлено, что уширение частотно-углового спектра сопровождается появлением в окрестности нелинейного фокуса локализованных максимумов в стоксовой и антистоксовой областях, которые имеют полосатую структуру. Показано, что в условиях аномальной дисперсии групповой скорости при одинаковом превышении мощности выше критического значения уширение спектра в оптическом вихре меньше, чем в гауссовом пучке.

DOI: 10.31857/S0044451021030020

1. ВВЕДЕНИЕ

Интерес к распространению лазерного излучения в режиме филаментации во многом обусловлен тем, что он может рассматриваться как основа новых лазерных технологий и приложений, связанных с передачей световой энергии на большие расстояния, созданием удаленных источников белого света в атмосфере, использованием наведенных плазменных каналов филаментов, включая разработку элементов микрофотоники [1,2]. Основой для зарождения филаментов служит самофокусировка излучения в кубической среде [3, 4], которая совместно с другими конкурирующими механизмами, в частности, ионизацией среды, обеспечивает поддержание высокой плотности энергии изучения на расстояниях, существенно больших дифракционной (рэлеевской) длины. При этом происходит сильное уширение частотного спектра импульса. В средах с аномальной дисперсией групповой скорости (ДГС) вследствие одновременной пространственной самофокусировки и временной самокомпрессии импульса возможно формирование квазиустойчивых экстремально сжатых во времени волновых пакетов с высокой локализацией светового поля — так называемых световых пуль [5, 6].

Физическая картина фемтосекундной филаментации и сопутствующая ей генерация суперконтинуума достаточно хорошо исследованы на примере гауссовых пучков. Однако в последнее время появляется все больше исследований, посвященных филаментации пучков более сложной формы [7], в том числе, кольцевым пучкам с вихревой дислокацией фазы на оси — оптическим вихрям или вортексам [8]. Вихревые пучки обладают орбитальным угловым моментом и винтовым фазовым фронтом [8, 9],

* E-mail: shlenov@physics.msu.ru
** E-mail: vasilev.evgeniy@physics.msu.ru

который препятствует «затеканию» поля на оптическую ось, где интенсивность излучения обращается в нуль. В условиях самовоздействия излучения эта особенность сохраняется, тем самым поддерживается кольцевая форма вихревых пучков [10].

Наряду с пространственно-временными характеристиками, в настоящее время исследованы спектральное уширение и генерация суперконтинуума при самовоздействии оптических вихрей в средах с нормальной дисперсией групповой скорости. В частности, во фториде кальция наблюдалась интерференционная картина пучка в коротковолновой области спектра, которая обусловлена когерентным сложением спектральных компонент суперконтинуума от нескольких филаментов на кольцевой структуре исходного вортекса [10]. В сравнении с гауссовым пучком уширение спектра вихревого пучка в условиях нормальной ДГС оказывается больше. Это показано численно для импульсов, распространяющихся в воздухе [11] и в кварце [12].

Распространение фемтосекундных оптических вихрей в условиях филаментации в среде с аномальной дисперсией групповой скорости исследовано в осесимметричном приближении в [13, 14]. Показано, что при самовоздействии кольцевых пучков с фазовой дислокацией с топологическим зарядом $m = 1$ в плавленом кварце на центральной длине волны $\lambda_0 = 1800$ нм образуется последовательность кольцевых световых пуль длительностью около 10 фс и радиусом не менее 10 мкм. При этом излучение имеет многофокусную структуру с наиболее сильным последним нелинейном фокусом, где достигаются глобальные по трассе максимумы интенсивности и концентрации плазмы.

В настоящей работе экспериментально и численно исследованы особенности спектрального уширения фемтосекундных оптических вихрей при самовоздействии в среде с аномальной дисперсией групповой скорости.

2. ПОЛУЧЕНИЕ ОПТИЧЕСКОГО ВИХРЯ ФЕМТОСЕКУНДНОГО ИК-ИЗЛУЧЕНИЯ С ПОМОЩЬЮ ФАЗОВОГО ТРАНСПАРАНТА

Для формирования оптического вихря из гауссового пучка фемтосекундного излучения использовался специальный фазовый транспарант со спиралевидной рельефной поверхностью. Такие транспаранты были изготовлены для формирования волнового фронта излучения с топологическим зарядом $m = 1$ на длине волны $\lambda = 1800$ нм, лежащей в области аномальной дисперсии групповой скорости в плавленом кварце. Предварительные численные расчеты показали, что рассогласование длин волн пучка и фазового транспаранта в 2.5 % практически не влияет на формирование оптического вихря [15]. Качественно эволюция гауссового пучка за фазовым транспарантом меняется при рассогласовании по длинам волн более 20 %. Это позволяет, во-первых, использовать фазовый транспарант для получения оптических вихрей в фемтосекундных импульсах, типичная ширина спектра которых составляет около 100 нм, и во-вторых, допускает возможность варьировать центральную длину волны излучения, не меняя транспарант.

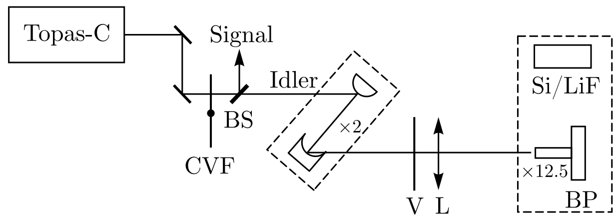


Рис. 1. Схема эксперимента по преобразованию гауссового пучка фемтосекундного ИК-излучения в оптический вихрь с кольцевым распределением интенсивности с помощью фазового транспаранта (V) и собирающей кварцевой линзы (L). CVF — ослабитель энергии, BS — делитель пучка. Штриховыми линиями выделены опциональные элементы схемы, описанные в тексте

Лучевая стойкость использованного фоторезиста соответствует лучевой стойкости оргстекла. Выполненные ранее эксперименты показали, что сформированная фоторезистом структура не повреждается при импульсном лазерном облучении на длине волны 1064 нм импульсами длительностью 5 нс с энергией 20 мкДж при ширине пучка 4 мм. Плотность потока энергии при этом составляет около 160 мкДж/см^2. Эти данные и результаты экспериментов [16] позволили прогнозировать сохранность структуры поверхности в экспериментах с получением в плавленом кварце филаментов фемтосекундным лазерным излучением на длине волны 1800–1900 нм, когда при аналогичном размере пучка на фазовом транспаранте энергия импульса должна составлять порядка 10 мкДж.

Для получения из гауссового пучка оптического вихря с кольцевым распределением интенсивности использована схема, приведенная на рис. 1. Экспериментальная установка была создана на основе лазерного комплекса, который позволяет генерировать фемтосекундные лазерные импульсы с перестраиваемой частотой в широком диапазоне длин волн при частоте повторения 1 кГц [17]. Измеренная одноимпульсным автокоррелятором ASF длительность гауссового импульса в диапазоне 1800–1900 нм составила 56 фс по уровню e^{-1}. Ширина спектра при этом составляет 80 нм по полувысоте. Материальная дисперсия в кварцевой линзе и фазовом транспаранте на кварцевой основе (рис. 1) увеличивает длительность импульса еще примерно на 10 % в каждом элементе. Таким образом, после прохождения этих двух оптических элементов длительность импульса увеличивается до 67 фс.

Фемтосекундное излучение с перестраиваемого параметрического усилителя TOPAS-C после прохождения регулируемого ослабителя энергии CVF и делителя пучка BS с дихроическим интерференционным фильтром с максимумом разделения на длине волны 1900 нм попадало на фазовый транспарант V. Потери энергии при прохождении фазового транспаранта составляют около 7 %. При необходимости уширения пучка перед фазовым транспарантом монтировался отражательный телескоп с коэффициентом увеличения ×2. Через 3 см после фазового транспаранта пучок проходил собирающую линзу L, в окрестности фокальной плоскости которой формировалась кольцевая пространственная мода с дислокацией фазы на оси (оптический вихрь). В зависимости от целей эксперимента вихревой оптический пучок подавался либо на профилометр BP с целью его характеризации, либо на образец плавленого кварца Si для исследования спектральных характеристик излучения при самовоздействии в среде с аномальной дисперсией групповой скорости. Эта же схема без фазового транспаранта позволяла получать филаменты в гауссовом пучке.

Фокусное расстояние используемой в эксперименте собирающей линзы L составляло 15.8 см. При диаметре исходного гауссового пучка 5.1 мм по уровню e^{-2} диаметр пучка в фокальной плоскости линзы L на длине волны 1800 нм составляет около 80 мкм, что меньше размера пикселя инфракрасного профилометра Pyrocam III (Spiricon), который равен 124 мкм. Поэтому для характеризации пучка на входе в профилометр устанавливался телескоп с коэффициентом увеличения ×12.

На кадрах с профилометра поперечного сечения видно (рис. 2), что с помощью фазового транспаранта в пределах перетяжки удалось получить кольцевой пучок фемтосекундного излучения на длине волны 1800 нм с глубоким минимумом интенсивности на оси. Однако азимутальная симметричность, характерная для идеального оптического вихря, в пучке отсутствует. Наблюдаемая несимметричная кольцевая структура обычно содержит два ярких пятна, которые в фокальной плоскости линзы располагаются на диаметре. Такой профиль оптического вихря может быть связан как с пространственной неоднородностью входного гауссового пучка, так и с радиальной неоднородностью используемого транспаранта.

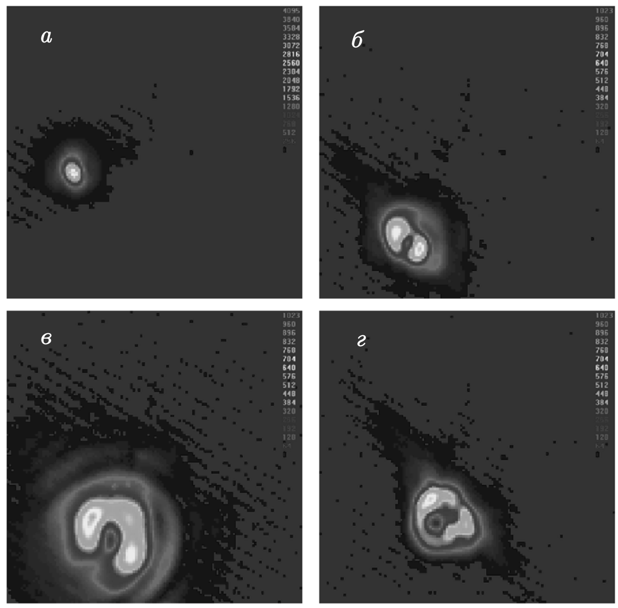


Рис. 2. Визуализация гауссового (*а*, без фазового транспаранта) и вихревого пучка (*б*–*г*) на длине волны 1800 нм в окрестности фокальной плоскости собирающей линзы с $F = 158$ мм: *а*,*б* — в фокусе, *в* — перед фокусом, *г* — после фокуса

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ ВИХРЕВОГО ПУЧКА В РЕЖИМЕ ФИЛАМЕНТАЦИИ

Для исследования спектральных характеристик импульса в режиме филаментации в фокусе собирающей линзы L располагалась передняя грань образца плавленого кварца длиной 3 см. При изменении энергии импульса по появлению излучения видимой части суперконтинуума в кварце фиксировался момент старта филаментации. При этом также регистрировалась люминесценция плазменных каналов и рассеянное излучение суперконтинуума при помощи фотокамеры с макрообъективом (рис. 3).

В оптическом вихре старт режима филаментации наблюдался при увеличении энергии в импульсе на входе в образец до 4.6 мкДж, что в три с

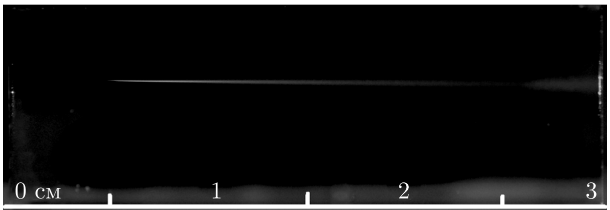


Рис. 3. Расходящееся излучение видимой части суперконтинуума оптического вихря в образце плавленого кварца длиной 3 см. Импульс распространяется слева направо

лишним раза превышает критическую мощность самофокусировки гауссова пучка излучения такой же длительности. Полученная величина близка к аналитической оценке, согласно которой критическая мощность самофокусировки $P_V^{(1)}$ аксиально симметричного оптического вихря с топологическим зарядом $m = 1$ выше критической мощности самофокусировки гауссового пучка P_G в 4 раза [18].

Для измерения частотно-углового спектра суперконтинуума на выходе из образца в ИК-диапазоне от 1200 до 2600 нм использовался спектрометр ASP-IR, установленный на подвижке с микрометрическим винтом. Спектрометр размещался в дальней зоне на расстоянии 30 см от выходной грани образца плавленого кварца, где видимый диаметр расходящегося пучка суперконтинуума составлял порядка 1 см. Входная щель спектрометра смещалась в поперечном сечении от оси пучка с шагом 20 мкм, что соответствует изменению угла прихода излучения на 0.029°. Полученная серия частотных спектров для набора различных углов преобразовывалась в тоновые изображения частотно-угловых спектров (рис. 4*а*). При обработке все частотные спектры были нормированы на глобальный максимум в серии, сглажены с помощью гауссового окна шириной 10 нм и приведены в логарифмическом масштабе с отсечкой на уровне -2. Изображения для отрицательных углов были получены симметричным отражением спектра.

Частотные спектры измерялись в начале устойчивого режима филаментации импульсов на центральной длине волны 1850 нм, что явилось компромиссом между оптимальной для фазового транспаранта длиной волны 1800 нм и на оптимальной для дихроического фильтра длиной волны 1900 нм. Сравнительный анализ частотно-угловых спектров оптического вихря и гауссового пучка (рис. 4*а*I, *а*II) показал, что уширение спектров носит, в целом, близкий характер. В частности, в частотно-угловом спектре обоих пучков можно наблюдать отчетливо выделенные центральную, стоксову и антистоксову области. При этом в гауссовом пучке стоксова область спектра имеет большую относительную интенсивность и ширину как по углу, так и по длине волны, чем в вихревом пучке, и в ней наблюдается максимум в области длин волн больше 2 мкм. Большее по сравнению с оптическим вихрем спектральное уширение гауссового пучка связано с тем, что его самофокусировка происходит на оси, где возникают существенно большие градиенты интенсивности, и в условиях аномальной дисперсии групповой скорости сильнее растет крутизна волнового фронта импульса, чем при кольцевой самофокусировке оптического вихря. В условиях нелинейности такая временная динамика импульса сопровождается более сильным по сравнению с оптическим вихрем уширением не только частотного, но и углового спектра гауссова пучка.

В то же время спектр вихревого пучка имеет ряд особенностей. Прежде всего, это отсутствие компоненты, распространяющейся вдоль оптической оси (темная горизонтальная полоса в частотно-угловом спектре), во всем диапазоне длин волн, что характерно для пучков с фазовой дислокацией. При уширении спектра в процессе самовоздействия эта темная полоса воспроизводится для всех длин волн. Важной особенностью частотно-углового спектра вихревого пучка является появление дополнительных (к нулевому углу) темных горизонтальных полос, свидетельствующих об отсутствии (или существенном ослаблении) излучения под определенными углами. В центральной области спектра можно наблюдать от двух до трех таких полос с характерной шириной около 0.12 рад (рис. 4*а*II).

Для измерения частотного спектра интегрального по углу излучения в схему дополнительно ставилась собирающая линза, которая фокусировала излучение на входную щель спектрографа. Измеренные и построенные в логарифмическом масштабе эти спектры содержат те же особенности частотного уширения, которые были отмечены ранее (рис. 4*б*). В частности, на графиках хорошо видны пики, соответствующие центральной, стоксовой и антистоксовой областям спектра. Можно отметить, что дополнительный пик на длине волны больше 2 мкм наблюдается и в спектре оптического вихря, но существенно меньшей амплитуды, чем в спектре гауссового пучка. В целом, ширина частотного спектра гауссового пучка больше, чем оптического вихря, в 1.4 раза по уровню 10^{-1} и в 2 раза по уровню 10^{-2}.

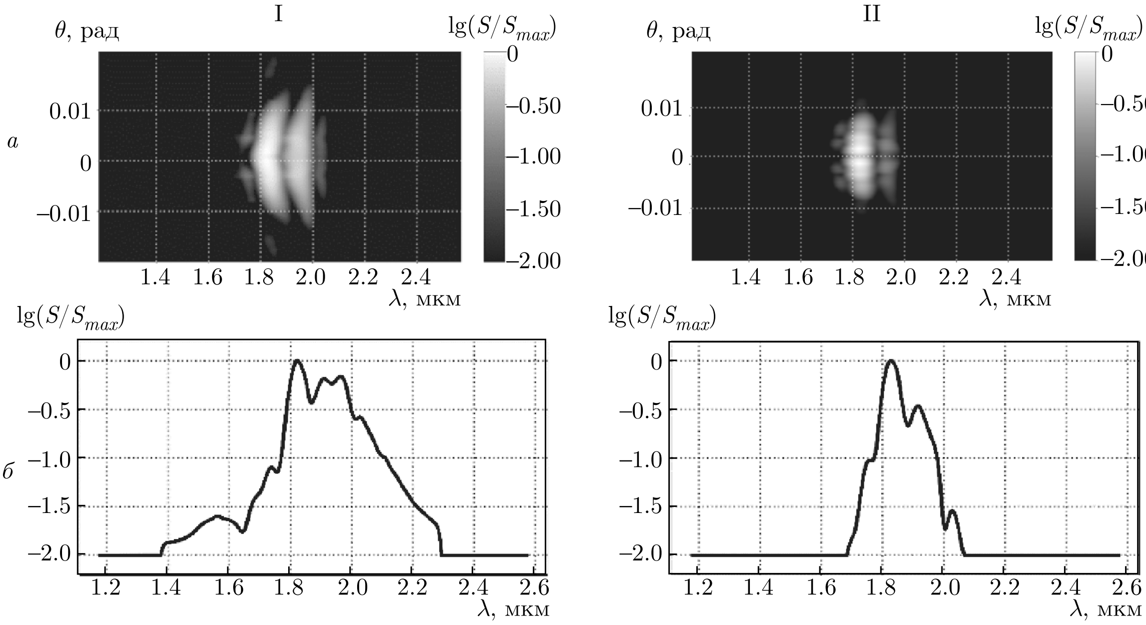


Рис. 4. Экспериментальные частотно-угловые (*а*) и частотные (*б*) спектры суперконтинуума филамента, в плавленом кварце фемтосекундного излучения на центральной длине волны 1850 нм для гауссового пучка (I) и оптического вихря (II). Спектры получены при небольшом превышении критической мощности в начале устойчивого режима филаментации

4. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЛАМЕНТАЦИИ ОПТИЧЕСКОГО ВИХРЯ В ПЛАВЛЕНОМ КВАРЦЕ

Численное моделирование самовоздействия фемтосекундных вихрей в образце плавленого кварца проводилось с помощью решения замкнутой системы нелинейных уравнений относительно медленно меняющейся комплексной амплитуды $A(r,t,z)$ и концентрации электронов плазмы $N_e(r,t,z)$ с учетом оператора волновой нестационарности $\hat{T}$ [13,19]:

$$\begin{aligned}
&2ik_0\frac{\partial A(r,t,z)}{\partial z} = \\
&= \hat{T}^{-1}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{m^2}{r^2}\right]A(r,t,z)+ \\
&+\hat{T}^{-1}\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\Big(k^2(\omega_0+\Omega)-(k_0+k_1\Omega)^2\Big)\times \\
&\times\tilde{A}(r,\Omega,z)\exp\{i\Omega t\}\,d\Omega+\frac{2k_0^2}{n_0}\hat{T}\Delta n_k A(r,t,z)+ \\
&+\frac{2k_0^2}{n_0}\hat{T}^{-1}\Delta n_{pl}A(r,t,z)+i\hat{T}^{-2}\sigma A(r,t,z)- \\
&\qquad -ik_0(\alpha+\delta)A(r,t,z), \\
&\frac{\partial N_e(r,t)}{\partial t} = R_E(N_0-N_e(r,t))+ \\
&\qquad +\nu_i N_e(r,t)-\beta N_e(r,t),
\end{aligned} \tag{1}$$

где в правой части (1) присутствуют слагаемые, ответственные за дифракцию, дисперсию, керровскую и плазменную нелинейности, а также поглощение излучения. Комплексная амплитуда светового поля вихря задавалась в виде $A(r,t,z)\exp\Big\{im\varphi\Big\}$, что предполагает сохранение топологического заряда m при распространении импульса. При описании дифракции вихря в осесимметричном приближении появляется слагаемое $-m^2/r^2$, которое возникает при записи лапласиана в цилиндрических координатах. Материальная дисперсия описывалась эмпирической формулой Селлмейера для $k(\omega)$ [20] без дополнительных приближений, ω_0 — несущая частота импульса, $\Omega=\omega-\omega_0$. Приращение показателя преломления Δn_k, вызванное керровской нелинейностью, учитывает как мгновенную, так и инерционную составляющие. Плазменная добавка к показателю преломления Δn_{pl} зависит от концентрации свободных электронов N_e. В свою очередь, кинетическое уравнение для расчета N_e учитывает полевую ионизацию согласно модели Келдыша [21], лавинную ионизацию и рекомбинацию, которые описываются соответственно коэффициентами $R_E(I)$, $\nu_i(I)$ и β. Коэффициенты σ, α и δ в (1) учитывают соответственно обратное тормозное, нелинейное и линейное поглощения.

Предполагалось, что оптический вихрь на входе в среду имеет вид

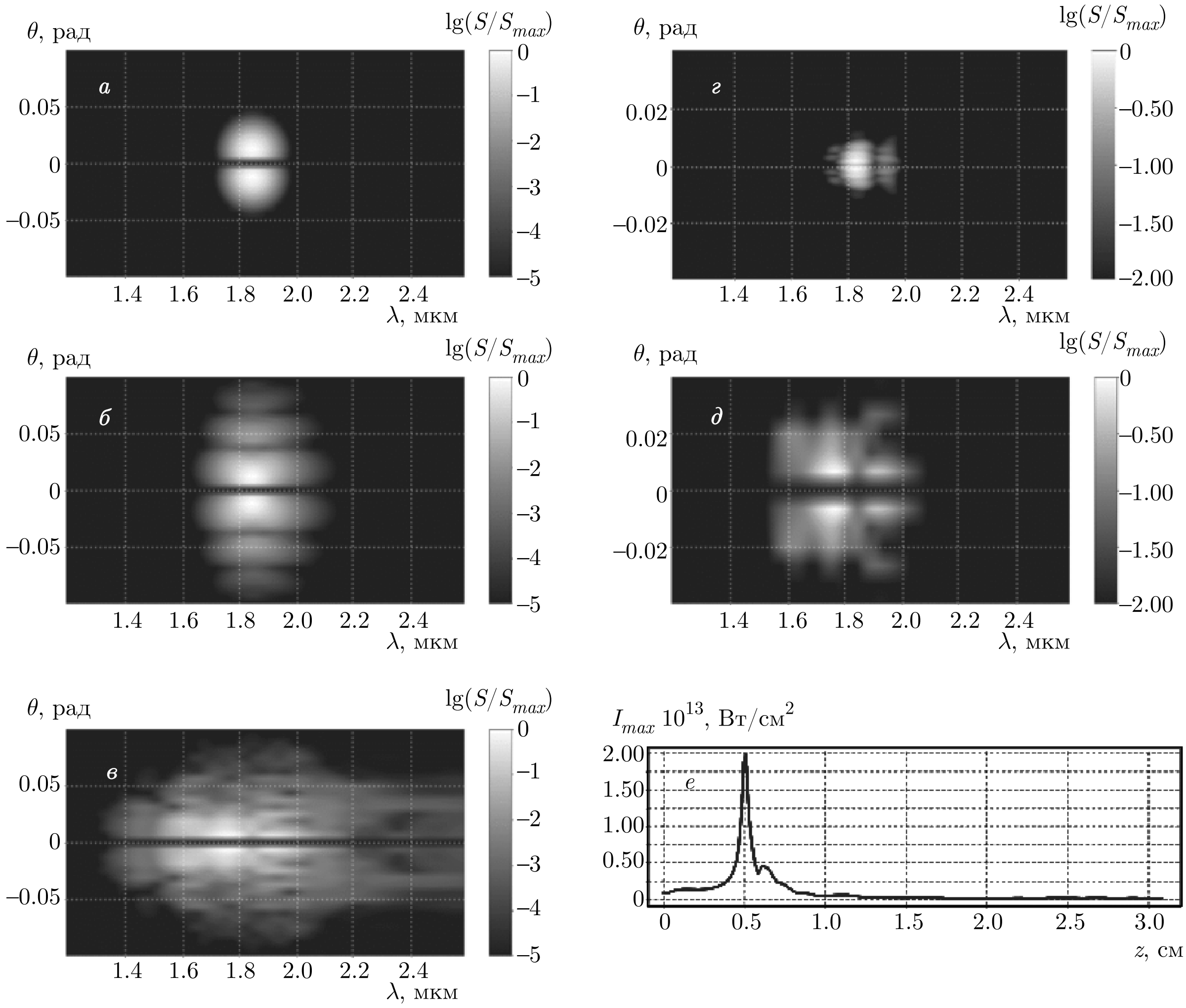


Рис. 5. Частотно-угловые спектры (a–∂) и пиковая интенсивность (e) при распространении оптического вихря в плавленом кварце. Численный расчет: a — на входе в образец при $z = 0$ см, $б$ — до нелинейного фокуса на расстоянии $z = 0.13$ см, $в$, ∂ — после прохождения образца при $z = 3$ см, $г$ — экспериментальный спектр на выходе из образца

$$A^{(m)}(x, y, z = 0, t) = A_0 \left(\frac{r}{r_0}\right)^m \exp\left\{-\frac{r^2}{2r_0^2}\right\} \times \\ \times \exp\left\{-\frac{t^2}{2t_0}\right\} \exp\Big\{im\varphi(x, y)\Big\}, \quad (2)$$

где $\varphi(x, y) = \operatorname{arctg} 2(x, y)$, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Рассматривался гауссов импульс с параметрами, близкими к экспериментальным: длительностью $t_0 = 67$ фс на центральной длине волны $\lambda_0 = 1850$ нм (дисперсионный коэффициент $k_2 = -71.5$ фс^2/мм [20]). Пространственный размер кольцевого пучка, формируемого после прохождения фазового транспаранта и собирающей линзы, на входной грани образца плавленого кварца равнялся $r_0 = 28$ мкм, топологический заряд $m = 1$. Превышение мощности над критической составляло $R = P_0/P_{cr}^{(1)} = 1.5$, максимальная начальная интенсивность при этом составляет $I_{max0} = 9.0 \cdot 10^{11}$ Вт/см^2. При такой пиковой мощности образование филамента происходило, как и в эксперименте (рис. 3), на расстоянии 0.5 см от входной плоскости образца.

Частотно-угловой спектр вихря на входе в среду имеет бимодальную структуру с отсутствующей нулевой пространственной гармоникой, что объясняется наличием фазовой сингулярности на оси пучка (рис. 5a). В ходе распространения оптического вихря самофокусировка и самокомпрессия приводят к уширению частотно-углового спектра излучения по обеим координатам. Приблизительно на расстоянии $z = 0.06$ см уширение спектра по углу достигает 0.05 рад и в нем можно наблюдать дополнительные тем-

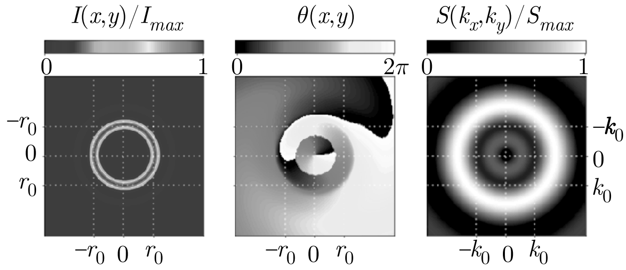


Рис. 6. Распределения интенсивности $I(x,y)$ (*а*), фазы $\theta(x,y)$ (*б*) и углового спектра $S(k_x,k_y)$ (*в*) вихревого пучка при самофокусировке на расстоянии, соответствующем образованию нескольких колец в спектре

ные полосы вдоль оси частот (длин волн). При приближении к нелинейному фокусу наблюдается увеличение числа таких полос, т. е. фактически минимумов спектральной интенсивности под определенными углами (рис. 5*б*). Чередование максимумов и минимумов по угловой координате означает формирование структуры излучения в виде вложенных конусов.

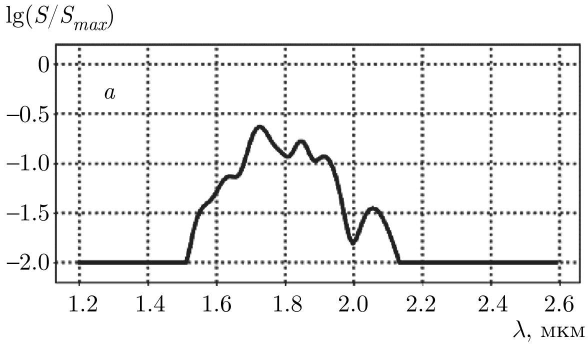
В окрестности первого нелинейного фокуса ($z = 0.5$ см) радиус кольцевого распределения интенсивности начинает уменьшаться, энергия излучения перетекает по направлению к оптической оси. Пиковая интенсивность в фокусе достигает значений $2.0 \cdot 10^{13}$ Вт/см^2 (рис. 5*е*). Заметим, что наиболее четкая полосатая картина в частотно-угловом спектре наблюдается до нелинейного фокуса (рис. 5*б*), пока характер изменения кольцевых распределений интенсивности в пространстве одинаков в каждом временном слое импульса.

Объяснить формирование полосатой структуры спектра можно, рассматривая стационарную самофокусировку оптических вихрей. В процессе распространения при возрастании пиковой интенсивности импульса во временном слое формируются два пространственных кольца — одно представляет собой самофокусирующуюся моду, которая постепенно уменьшается в радиусе и ширине, а другое — расходящееся на периферию излучение. Первая мода является высокоинтенсивной. На рис. 6*а* ее максимальные значения представлены красным цветом. Вторая — гораздо менее интенсивная с максимумом синего цвета в той же шкале, ее радиус составляет приблизительно $1.5r_0$. Угловой спектр каждой моды представляет собой кольцевую структуру из эквидистантно расположенных колец.

При наложении этих мод в результирующем угловом спектре возникает система колец (рис. 6*в*). Наиболее четкой картина колец в спектре становится на тех расстояниях z, когда в распределении фазы пучка за счет дополнительного нелинейного набега образуются несколько областей, соответствующих вложенным друг в друга по апертуре спиральным «фазовым пластинкам», сдвинутых друг относительно друга на π. На рис. 6*б* можно увидеть три такие области, которые имеют криволинейные линии скачка фазы. Граница центральной области расположена на расстоянии около $0.7r_0$ от оси, вторая граница примерно в два раза дальше. Расстояния между кольцами в спектре, а также их характерная толщина, определяются параметрами кольцевой структуры каждой моды, которые, в свою очередь, нелинейно меняются в процессе самовоздействия. Так, на рис. 6*в* высокоинтенсивное кольцо в спектре генерируется самофокусирующейся модой, внутреннее слабоинтенсивное кольцо — модой, уходящей на периферию, а внешнее слабоинтенсивное кольцо — суперпозицией вторичных максимумов, генерируемых указанными модами.

Описанная динамика формирования углового спектра не зависит от длины волны, поэтому в частотно-угловом спектре образуются горизонтальные полосы (рис. 5*б*). После прохождения образца (рис. 5*в*) полосатая структура спектра замывается. Уширение как в коротковолновую, так и в длинноволновую части, становится больше, чем в первом нелинейном фокусе, при этом максимум спектральных компонент смещается в антистоксову область, что отчетливо видно на рис. 5*д*, где изображена центральная часть спектра.

В сравнении с экспериментальным (рис. 5*г*) среднее уширение углового спектра в расчетах почти в два раза больше, что, по всей видимости, связано с более высоким превышением критической мощности. В обоих спектрах отсутствует нулевая пространственная гармоника, что подтверждает наличие сингулярности фазы на оси. Как в экспериментальном, так и в расчетном спектрах можно выделить три достаточно хорошо локализованные частотные области: одна — вблизи центральной длины волны $\lambda_0 = 1850$ нм, другая — коротковолновая часть (антистоксова), и третья — длинноволновая область (стоксова). Однако в численном расчете большая часть энергии импульса трансформировалась в антистоксову область. В целом, наблюдается качественное сходство картины уширения спектра в обоих случаях. Отметим, что для количественного сравнения результатов численных расчетов с выполненными экспериментами следует перейти к моделированию самовоздействия аксиально-несимметричных оптических вихрей.



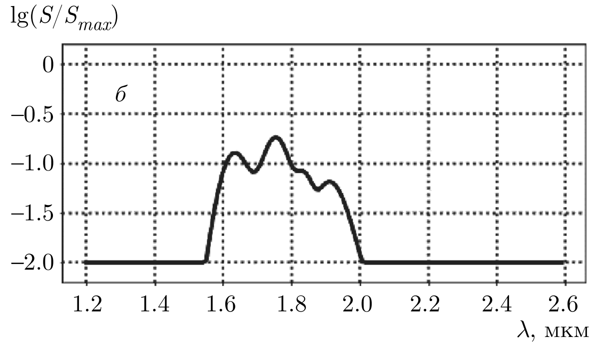


Рис. 7. Частотный спектр импульса на выходе из образца гауссового пучка (*а*) и оптического вихря (*б*). Численный эксперимент

На рис. 7 изображены частотные спектры оптических вихрей на выходе из образца, которые представляют собой проинтегрированные по углу частотно-угловые спектры. Видно, что численные спектры на рис. 7 качественно соответствуют экспериментальным (рис. 4*б*) при заметном в расчетах смещении «центра тяжести» спектрального распределения в антистоксову область. Характерная ширина спектров по уровню 10^{-2} составляет около 400 нм. При этом, как в численных расчетах, так и в эксперименте, ширина спектра оптического вихря на выходе из образца плавленого кварца меньше, чем у гауссового пучка.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполненные экспериментальные и численные исследования самовоздействия оптического вихря на центральной длине волны 1850 нм при распространении в образце плавленого кварца выявили характерные особенности трансформации его частотно-углового спектра. Установлено, что уширение спектра сопровождается появлением в окрестности нелинейного фокуса локализованных максимумов в стоксовой и антистоксовой частях. В уширенном спектре наблюдается полосатая структура — дополнительные темные полосы вдоль частотной координаты. Численные эксперименты позволили в рамках простой модели качественно объяснить появление этих полос, которые свидетельствуют о формировании структуры излучения в виде вложенных конусов. Показано, что в условиях аномальной дисперсии групповой скорости при одинаковом превышении критической мощности уширение спектра в оптическом вихре меньше, чем в гауссовом пучке, так как фазовая дислокация препятствует самофокусировке излучения на оси и, соответственно, достижению больших градиентов интенсивности.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-02-00624).

ЛИТЕРАТУРА

1. В. П. Кандидов, С. А. Шленов, О.Г. Косарева, КЭ **39**, 205 (2009).
2. J. Kasparian and J.-P. Wolf, Opt. Express **16**, 466 (2008).
3. Г. А. Аскарьян, ЖЭТФ **42**, 1567 (1962).
4. R. Y. Chiao, E. Garmire, and C. H. Townes, Phys. Rev. Lett. **13**, 479 (1964).
5. L. Berge and S. Skupin, Phys. Rev. Lett. **100**, 113902 (2008).
6. S. V. Chekalin, A. E. Dokukina, A. E. Dormidonov, V. O. Kompanets, E. O. Smetanina, and V. P. Kandidov, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys **48**, 094008 (2015).
7. P. Polynkin, M. Kolesik, and J. Moloney, Opt. Express **17**, 575 (2009).
8. В. В. Котляр, А. А. Ковалев, *Ускоряющиеся и вихревые лазерные пучки*, Физматлит, Москва (2018).
9. L. Allen, M. W. Beijersbergen, R. J. C. Spreeuw, and J. P. Woerdman, Phys. Rev. A **45**, 8185 (1992).

10. D. N. Neshev, A. Dreischuh, G. Maleshkov, M. Samoc, and Y. S. Kivshar, Opt. Express **18**, 18368 (2010).

11. Р. А. Власов, В. М. Волков, Д. Ю. Дедков, КЭ **43**, 157 (2013).

12. Е. В. Васильев, С. А. Шленов, КЭ **46**, 1002 (2016).

13. Е. В. Васильев, С. А. Шленов, В. П. Кандидов, Опт. и спектр. **126**, 24 (2019).

14. E. V. Vasilyev, S. A. Shlenov, and V. P. Kandidov, Laser Phys. Lett. **15**, 115402 (2018).

15. A. A. Dergachev, F. I. Soyfer, and S. A. Shlenov, *Proc. 19th International Conference Laser Optics ICLO* 2020, IEEE (2020).

16. F. C. Cheong, B. Varghese, S. Sindhu, C. M. Liu, S. Valiyaveettil, A. A. Bettiol, J. A. Van Kan, F. Watt, W. S. Chin, C. T. Lim, and C. H. Sow, Appl. Phys. A: Mater. Sci. Proc. **87**, 71 (2007).

17. С. В. Чекалин, УФН **176**, 657 (2006).

18. V. I. Kruglov, Yu. A. Logvin, and V. M. Volkov, J. Mod. Opt. **39**, 2277 (1992).

19. T. Brabec and F. Krausz, Phys. Rev. Lett. **78**, 3282 (1997).

20. I. H. Malitson, J. Opt. Soc. Amer. **55**, 1205 (1965).

21. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ **20**, 1307 (1965).

ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 3, стр. 409–423

РЕАЛИЗАЦИЯ ОДНОКУБИТОВЫХ КВАНТОВЫХ ОПЕРАЦИЙ НА СВЧ-ПЕРЕХОДЕ В ОДИНОЧНОМ АТОМЕ РУБИДИЯ В ОПТИЧЕСКОЙ ДИПОЛЬНОЙ ЛОВУШКЕ

И. И. Бетеров [a,b,c]***, Е. А. Якшина*** [a,b]***, Д. Б. Третьяков*** [a,b]***, В. М. Энтин*** [a,b]***,***

Н. В. Альянова [a,b]***, К. Ю. Митянин*** [a,b]***, И. И. Рябцев*** [a,b*]

[a] *Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук*
630090, Новосибирск, Россия

[b] *Новосибирский государственный университет*
630090, Новосибирск, Россия

[c] *Новосибирский государственный технический университет*
630073, Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 11 ноября 2020 г.,
после переработки 11 ноября 2020 г.
Принята к публикации 15 декабря 2020 г.

Представлены результаты экспериментов по реализации однокубитовых квантовых операций с одиночным атомом ^{87}Rb в оптической дипольной ловушке с длиной волны 850 нм. Ловушка сформирована длиннофокусным объективом, расположенным снаружи вакуумной камеры магнитооптической ловушки. Регистрация атома осуществлялась по сигналу резонансной флуоресценции с помощью sCMOS-видеокамеры. В экспериментах были реализованы захват и удержание одиночного атома на временах до 50 с, оптическая накачка поляризованным лазерным излучением, СВЧ-переходы между двумя сверхтонкими подуровнями основного состояния и измерение квантового состояния атома методом выталкивания из ловушки. Получены осцилляции Раби на «часовом» СВЧ-переходе $5S_{1/2}(F=2, M_F=0) \to 5S_{1/2}(F=1, M_F=0)$ между двумя рабочими уровнями кубита с частотой до 4.2 кГц, контрастом до 95 % и временем когерентности до 3 мс. Данные осцилляции соответствуют реализации двух базовых однокубитовых квантовых операций (вентиля Адамара и вентиля NOT) из различных начальных состояний кубита со средней точностью $95.2 \pm 3\%$.

DOI: 10.31857/S0044451021030032

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из перспективных вариантов построения квантового компьютера является использование одиночных нейтральных атомов в качестве квантовых битов (кубитов) [1–3]. Такие атомы, захваченные с помощью лазерного излучения в массивы оптических дипольных ловушек с периодом в несколько микрон [4–9], образуют квантовый регистр. В случае атомов щелочных металлов рабочими уровнями кубитов являются два сверхтонких подуровня основного состояния. Инициализация кубитов осуществляется с помощью метода оптической накачки. Однокубитовые операции выполняются на основе СВЧ или рамановских переходов между уровнями кубита. Выполнение двухкубитовых операций, требующих управляемого включения и выключения взаимодействия между кубитами, достигается путем кратковременного лазерного возбуждения атомов в высоковозбужденные (ридберговские) состояния, для которых характерно сильное диполь-дипольное взаимодействие между атомами [10]. Квантовые алгоритмы должны выполняться в виде последовательности одно- и двухкубитовых квантовых операций.

Для формирования оптических дипольных ловушек и последующей регистрации одиночных атомов в них по резонансной флуоресценции обычно применяются многолинзовые объективы или асферические линзы с большой числовой апертурой

* E-mail: ryabtsev@isp.nsc.ru

(NA > 0.5). Они обеспечивают фокусировку лазерного луча в пятно малого радиуса ($\sim$ 1 мкм) для хорошей локализации атомов и их захвата в режиме столкновительной блокады [11], когда загрузка более одного атома в ловушку подавляется. Кроме того, линзы с большой числовой апертурой имеют большую эффективность сбора фотонов резонансной флуоресценции, что обеспечивает уверенную регистрацию одиночных атомов с помощью счетчика фотонов (без пространственного разрешения) за время в несколько миллисекунд или высокочувствительной охлаждаемой EMCCD-видеокамеры за время в несколько десятков миллисекунд.

Недостатком асферических линз с большой числовой апертурой является короткое фокусное расстояние (5–10 мм), поэтому их приходится размещать внутри вакуумной камеры магнитооптической ловушки (МОЛ) [4, 9]. При долговременной работе МОЛ на поверхностях линз постепенно осаждаются рабочие атомы (обычно Rb или Cs), что приводит к формированию паразитных зарядов и электрических полей. На атомы в основном состоянии эти поля влияют слабо. Но при выполнении двухкубитовых квантовых операций с возбуждением атомов в ридберговские состояния их влияние очень велико, так как поляризуемости ридберговских состояний с ростом главного квантового числа n увеличиваются как n^7. В результате нарушается когерентность взаимодействия ридберговских атомов [12] и существенно снижается точность выполнения двухкубитовых операций [3].

Чтобы частично решить эту проблему, можно использовать не асферические линзы, а многолинзовые объективы с рабочим расстоянием 20–40 мм и размещать их снаружи вакуумной камеры МОЛ. Но это также существенно ограничивает возможные размеры и расстояния между атомами и поверхностями, поскольку вместо вакуумной камеры приходится применять малогабаритные стеклянные ячейки, загружаемые атомами из МОЛ [13–15]. Отметим, что при реализации обычных оптических дипольных ловушек для захвата больших ансамблей атомов применяются длиннофокусные объективы с малой числовой апертурой [16–20], поэтому для них таких проблем не возникает.

В нашей недавней работе [21] мы реализовали оптическую дипольную ловушку для одиночного атома Rb на основе длиннофокусного объектива с числовой апертурой NA = 0.172 и фокусным расстоянием 119 мм, расположенного снаружи вакуумной камеры МОЛ. Были продемонстрированы захват и удержание одиночного атома на временах до 50 с. При этом для регистрации атома применялась цифровая sCMOS-видеокамера FLIR Tau CNV. Такая камера значительно дешевле EMCCD-камер. В то же время, она обеспечивает малые шумы регистрации и считывания. Мы показали, что она пригодна для регистрации одиночных атомов при временах экспозиции 50–200 мс. Это время в несколько раз больше, чем для EMCCD-камер, но оно достаточно коротко для выполнения квантовых операций с одиночным атомом.

Целью настоящей работы была демонстрация базовых однокубитовых квантовых операций (вентиля Адамара и вентиля НЕ) с одиночным атомом Rb в имеющейся экспериментальной установке с длиннофокусным объективом и sCMOS-видеокамерой. Ниже представлены описание и результаты этих экспериментов.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА

Для выполнения однокубитовых квантовых операций с одиночными атомами Rb в одиночной оптической дипольной ловушке необходимо обеспечить ряд последовательных стадий их реализации: 1) захват одиночного атома Rb в одиночную ловушку; 2) контроль наличия атома в ловушке; 3) оптическую накачку атома на определенный зеемановский подуровень одного из сверхтонких подуровней основного состояния (инициализация кубита); 4) управляемое изменение населенностей сверхтонких подуровней основного состояния на основе магнитодипольных СВЧ-переходов или рамановских переходов в двухчастотном лазерном поле с осцилляциями населенностей Раби (вращение вектора состояний кубита на заданный угол); 5) измерение конечного состояния кубита по сигналу резонансной флуоресценции на CCD-камере.

Принципиальная оптическая схема используемой экспериментальной установки приведена на рис. 1. Первоначально атомы Rb охлаждаются и захватываются в магнитооптическую ловушку (МОЛ) в вакуумной камере, в центре которой формируется облако холодных атомов с температурой 80–100 мкК. Затем для захвата атомов из МОЛ в оптическую дипольную ловушку используется излучение лазерной системы с длиной волны 850 нм на основе задающего DFB-лазера Eagleyard EYP-DFB-0852 и полупроводникового усилителя Toptica Boosta Pro с выходной мощностью 1.4 Вт. Оно может модулироваться с помощью акустооптического модулятора (АОМ). Излучение заводится в

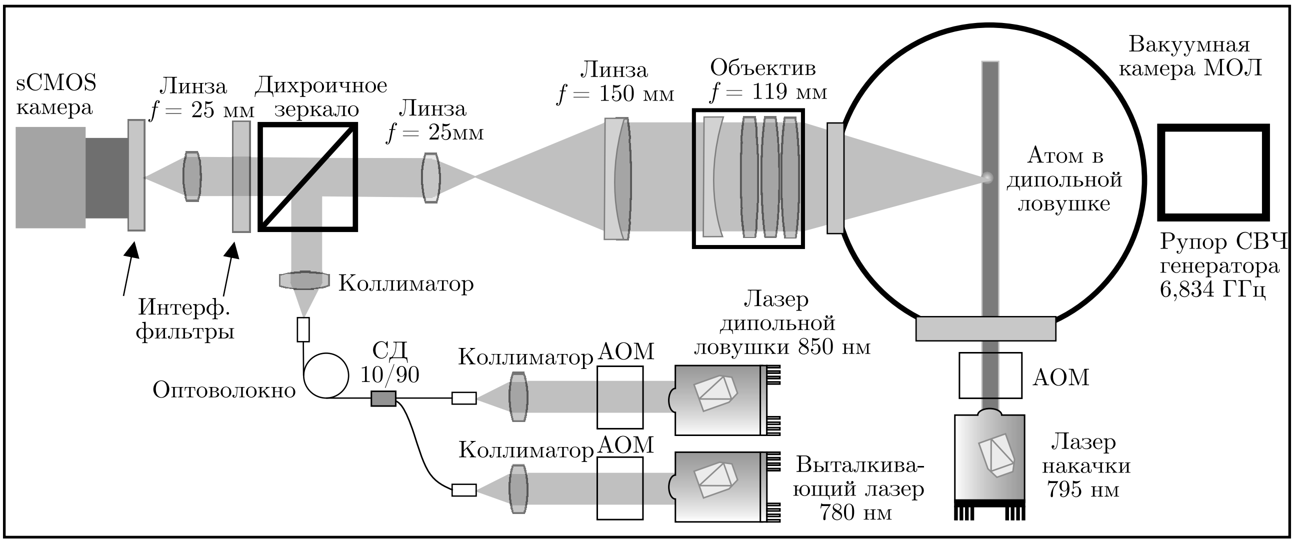


Рис. 1. Схема экспериментальной установки для захвата одиночных атомов Rb в оптическую дипольную ловушку, их регистрации, оптической накачки и выполнения однокубитовых квантовых операций на основе СВЧ-перехода

оптическую систему по оптоволокну, служащему в качестве пространственного фильтра. Отраженное от дихроичного зеркала лазерное излучение фокусируется в облако холодных атомов Rb объективом с фокусным расстоянием $f = 119$ мм и числовой апертурой 0.172. Данный объектив был сконструирован и впервые применен в работе [22]. Перед объективом установлен телескоп из двух линз с фокусными расстояниями $f = 25$ мм и $f = 150$ мм для расширения лазерного пучка и увеличения степени фокусировки. Оптическая система настраивается до получения диаметра пучка в перетяжке по уровню интенсивности e^{-2} менее 10 мкм, чтобы обеспечить загрузку преимущественно одиночных атомов за счет эффекта светоиндуцированной столкновительной блокады.

Для визуализации изображения захваченных атомов Rb используется резонансная флуоресценция, индуцированная охлаждающими лазерами с длиной волны 780 нм (не показаны на рис. 1). Спонтанно испускаемые фотоны собираются тем же объективом $f = 119$ мм, проходят через телескоп, дихроичное зеркало и фокусируются линзой $f = 25$ мм на цифровую sCMOS-видеокамеру FLIR Tau CNV. Для устранения влияния паразитных засветок на длине волны лазера дипольной ловушки перед видеокамерой установлены два интерференционных фильтра, пропускающих излучение только на длине волны 780 нм. Изображение с видеокамеры передается на компьютер через интерфейс CameraLink.

При выполнении однокубитовых операций рамановские переходы имеют преимущество прямой индивидуальной адресации к отдельным кубитам с помощью сфокусированного лазерного излучения, поэтому они выглядят более предпочтительными для атомов в массивах ловушек, чем СВЧ-переходы. Однако в эксперименте с одиночным кубитом более простым является применение СВЧ-перехода, обеспечивающего большее время когерентности при осцилляциях Раби. Кроме того, как было продемонстрировано в работах [23, 24], адресацию к отдельным кубитам в массивах ловушек можно осуществлять с помощью сфокусированного лазерного излучения, подстраивающего за счет светового сдвига уровни этого кубита в резонанс с СВЧ-излучением, тогда необходимость в рамановских переходах отпадает.

В настоящем эксперименте демонстрация однокубитовой квантовой операции с одиночным атомом ^{87}Rb в одиночной оптической дипольной ловушке осуществлялась на основе магнитодипольного СВЧ-перехода $5S_{1/2}(F = 2, M_F = 0) \rightarrow \rightarrow 5S_{1/2}(F = 1, M_F = 0)$ на частоте 6.834 ГГц между сверхтонкими подуровнями основного состояния, служащими рабочими уровнями кубита. Для этого в схему на рис. 1 добавлен лазер накачки для накачки атомов на определенный зеемановский подуровень (инициализация кубита), выталкивающий лазер для измерения состояния кубита и СВЧ-генератор с рупором для индуцирования осцилляций Раби между двумя рабочими уровнями кубита (вращение вектора состояний кубита на заданный угол).

Излучения всех лазеров модулируются АОМ для формирования импульсов нужной длительности. Излучение выталкивающего лазера подмешивается к излучению лазера дипольной ловушки с помощью оптоволоконного светоделителя СД10/90, что обеспечивает автоматическое совмещение его луча с атомами в ловушке и значительно облегчает настройку оптической схемы. Излучение лазера накачки заводится ортогонально лучу лазера дипольной ловушки. В качестве лазера накачки на определенный сверхтонкий подуровень основного состояния могут также использоваться охлаждающий либо перекачивающий лазеры МОЛ (не показаны на рис. 1), освещающие атомы Rb в ловушке с шести сторон. Однако они не обеспечивают оптическую накачку на определенный магнитный подуровень и применяются только в предварительных экспериментах для проверки эффективности диагностики сверхтонких подуровней выталкиванием и СВЧ-спектроскопии.

Временная диаграмма выполнения эксперимента по захвату одиночного атома ^{87}Rb, оптической накачке и реализации однокубитовой квантовой операции представлена на рис. 2. Эксперимент проводится в импульсном режиме. Атомы Rb первоначально загружаются в МОЛ в течение 0.1–5 с и одновременно загружаются в оптическую дипольную ловушку. При этом излучение лазера дипольной ловушки модулируется прямоугольными импульсами с частотой 1 МГц, чтобы в отсутствие излучения лазера ловушки избежать влияния световых сдвигов на регистрацию, накачку и выталкивание (световой сдвиг увеличивает отстройку оптических переходов на десятки мегагерц и уменьшает сигнал флуоресценции в несколько раз), а в течение импульсов удерживать атомы в ловушке. Цифровая sCMOS-видеокамера FLIR Tau CNV регистрирует атомы последовательностью снимков со временем экспозиции 100–150 мс до момента загрузки одиночного атома и появления первого сигнала резонансной флуоресценции.

По факту загрузки одиночного атома запускается процедура измерений. Охлаждающие лазеры и градиентное магнитное поле МОЛ выключаются. Атомы удерживаются в дипольной ловушке в течение 10–15 мс, в то время как атомы в МОЛ разлетаются. Затем включаются лучи охлаждающих лазеров и видеокамера для первой регистрации сигнала флуоресценции от захваченного атома. После этого охлаждающий лазер выключается и включается постоянное магнитное поле величиной 2–5 Гс для снятия вырождения по магнитным подуровням и задания оси квантования. Затем включается лазер накачки с линейной поляризацией излучения, который действует на атомы в течение 0.1–2 мс и накачивает их на зеемановский подуровень $5S_{1/2}(F=2, M_F=0)$ в присутствии излучения лазера перекачки.

Затем лазеры накачки и перекачки выключаются, и включается импульс СВЧ-излучения. СВЧ-переходы между двумя сверхтонкими подуровнями основного состояния изменяют их населенности. После этого включается выталкивающий лазер, с помощью которого определяется конечное состояние атома. В отсутствие излучения лазера накачки и без СВЧ-импульса оно может быть случайным, а в присутствии накачки должно быть всегда одним и тем же. Например, для изотопа ^{87}Rb состоянию $5S_{1/2}(F=2)$ будет соответствовать отсутствие сигнала, так как выталкивающий лазер настроен на замкнутый переход $5S_{1/2}(F=2) \to 5P_{3/2}(F=3)$ и выталкивает из ловушки атомы в состоянии $5S_{1/2}(F=2)$. Состоянию $5S_{1/2}(F=1)$ будет соответствовать максимальный сигнал, так как выталкивающий лазер не воздействует на атомы в этом состоянии. Окончательное измерение конечного состояния одиночного атома осуществляется путем включения охлаждающих лазеров и второй регистрации сигнала флуоресценции на цифровой видеокамере. При обработке данных проводится пост-селекция только тех событий, когда после загрузки в дипольную ловушку был зарегистрирован один атом, в том числе исключаются редкие двухатомные события.

Во всей процедуре измерения излучения лазеров охлаждения, перекачки, накачки и выталкивания модулируются на частоте 1 МГц в противофазе с модуляцией излучения лазера дипольной ловушки. Это позволяет значительно снизить влияние паразитных процессов во включенной ловушке, особенно в процессе выталкивания.

Экспериментальная демонстрация захвата одиночного атома Rb и его регистрация согласно временной диаграмме рис. 2 (без накачки, СВЧ-импульса и выталкивания) были представлены ранее в работе [21]. Изображение одиночного атома проецировалось на один пиксель видеокамеры согласно схеме рис. 1. Из видеосигнала этого пикселя вычитался средний уровень шумов и засветок, поэтому измеряемый сигнал был пропорционален интенсивности резонансной флуоресценции одиночного атома. Временная зависимость видеосигнала имела характер хаотических импульсов длительностью 1–50 с, соответствующих наличию или отсутствию разного числа атомов в ловушке (обычно от 0 до 2). Это так называемый «телеграфный» сигнал, имеющий сту-

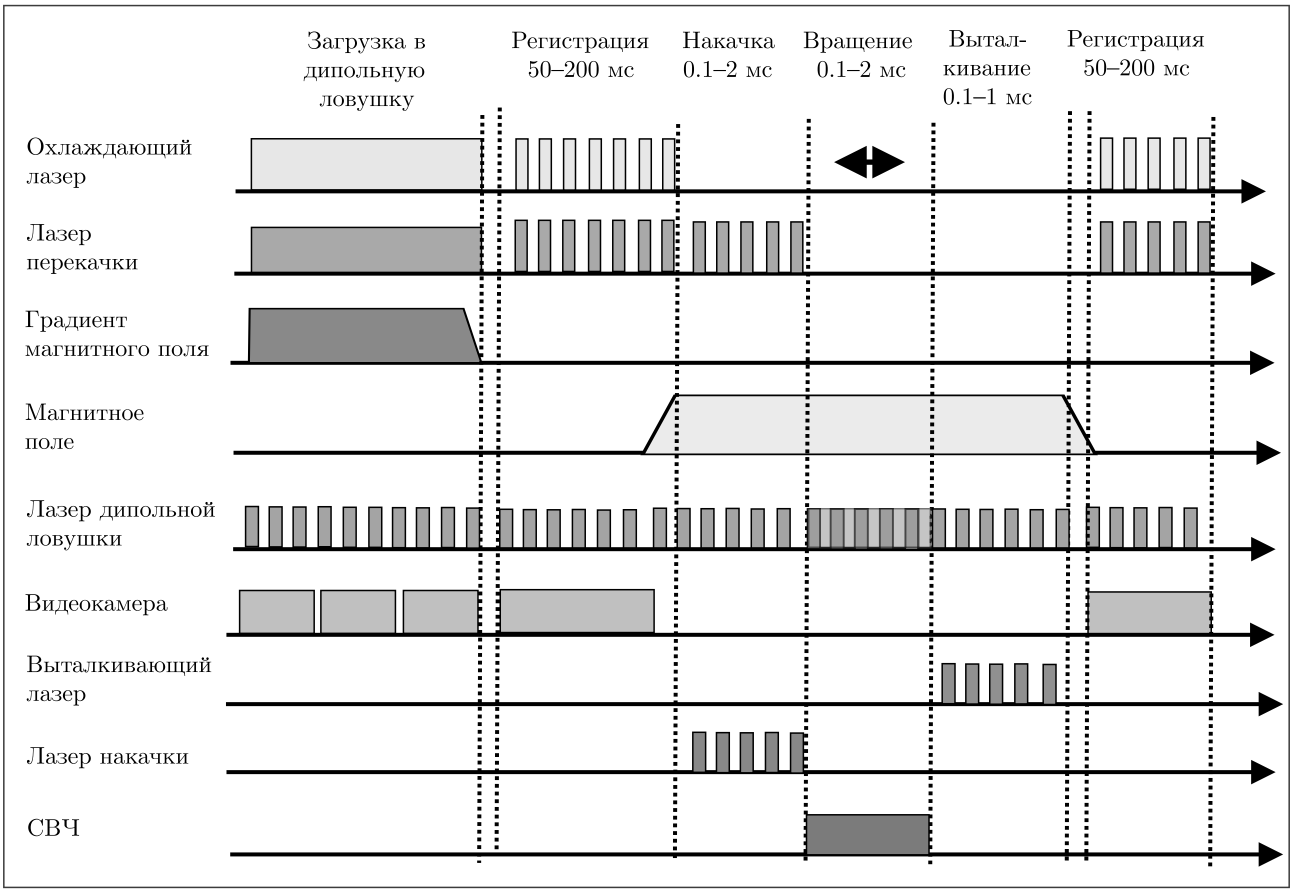


Рис. 2. Временная диаграмма выполнения эксперимента по захвату одиночного атома ^{87}Rb, оптической накачке и реализации однокубитовой квантовой операции

пенчатый характер в зависимости от числа захваченных атомов на фоне шумов видеокамеры. Если шумы достаточно низки, то такая видеокамера пригодна для регистрации одиночных атомов. В гистограмме распределения амплитуд видеосигнала имелись три пика. Первый пик — темновой шум видеокамеры, второй пик — излучение от одного атома, третий пик — излучение от двух атомов. Согласно этой гистограмме, можно было проводить селекцию событий только с одиночными атомами.

В представленных ниже экспериментах все измерения выполнялись в импульсном режиме с селекцией по величине видеосигнала. Из них выбирались события, соответствующие присутствию только одного атома в ловушке. При этом среднее время удержания одиночного атома в ловушке составляло десятки секунд, что обеспечивало высокую точность измерений.

3. ОПТИЧЕСКАЯ НАКАЧКА ОДИНОЧНОГО АТОМА ^{87}Rb

Схема переходов для оптической накачки атомов ^{87}Rb в состояние $5S_{1/2}(F=2)$ с проекцией полного момента $M_F=0$ приведена на рис. 3*a*. При включении излучения лазера накачки с линейной поляризацией вдоль внешнего магнитного поля индуцируются переходы $5S_{1/2}(F=2)\to 5P_{1/2}(F=2)$ в возбужденное состояние $5P_{1/2}(F=2)$ на магнитные подуровни без изменения проекции момента, кроме перехода между магнитными подуровнями с проекцией полного момента $M_F=0$, матричный элемент которого равен нулю. В присутствии излучения лазера перекачки, настроенного на переход $5S_{1/2}(F=1)\to 5P_{3/2}(F=2)$, вся населенность постепенно скапливается на зеемановском подуровне $5S_{1/2}(F=2)$ с проекцией полного момента $M_F=0$ вследствие спонтанного распада возбужденного со-

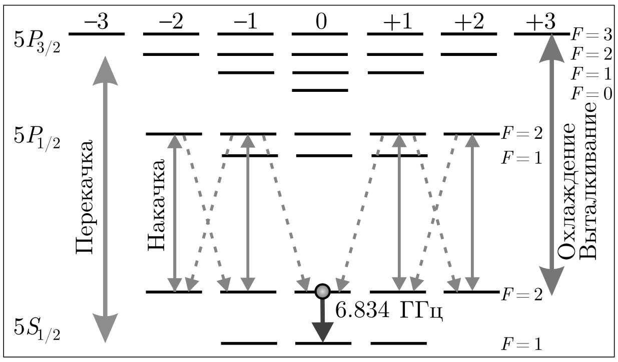


Рис. 3. Схема переходов для оптической накачки атомов ^{87}Rb на переходе $5S_{1/2}(F=2) \to 5P_{1/2}(F=2)$ в состояние $5S_{1/2}(F=2)$ с проекцией полного момента M_F=0 при линейной поляризации лазерного излучения

стояния. Это состояние будет служить начальным состоянием кубита при выполнении однокубитовой квантовой операции. Конечным состоянием кубита является состояние $5S_{1/2}(F=1)$ с проекцией полного момента $M_F=0$, отстроенное на частоту 6.834 ГГц от начального состояния. Переход в конечное состояние можно вызвать с помощью резонансного СВЧ-излучения.

Поскольку методом выталкивания измеряется вероятность одиночному атому остаться в состоянии $5S_{1/2}(F=1)$, а атомы в состоянии $5S_{1/2}(F=2)$ выталкиваются независимо от их проекции момента, зарегистрировать оптическую накачку именно на зеемановский подуровень $5S_{1/2}(F=2, M_F=0)$ методом выталкивания невозможно. Это можно сделать только путем СВЧ-спектроскопии переходов $5S_{1/2}(F=2) \to 5S_{1/2}(F=1)$ между подуровнями с различными проекциями момента в магнитном поле, когда присутствует зеемановское расщепление отдельных СВЧ-резонансов.

Для такой спектроскопии необходимо сначала перекачать населенность в один из сверхтонких подуровней $5S_{1/2}(F=2)$ или $5S_{1/2}(F=1)$ без селекции по магнитным подуровням. Осуществить полную перекачку населенности в состояние $5S_{1/2}(F=2)$ можно излучением лазера перекачки в произвольном магнитном поле. Осуществить полную перекачку населенности в состояние $5S_{1/2}(F=1)$ можно излучением лазера накачки, но в отсутствие дополнительного магнитного поля. В этом случае прецессия магнитного момента вокруг произвольно направленного слабого лабораторного магнитного поля приведет постепенно к перемешиванию магнитных подуровней и полному опустошению состояния $5S_{1/2}(F=2)$ под действием лазера накачки.

На основе этого эффекта можно также косвенно оценивать качество накачки в состояние $5S_{1/2}(F=2, M_F=0)$ после одновременного действия лазеров накачки и перекачки в магнитном поле. Если после этого включить только излучение лазера накачки, оно не должно приводить к перекачке населенности в состояние $5S_{1/2}(F=1)$, если его поляризация строго совпадает с магнитным полем и идут только переходы без изменения проекции момента. Если же присутствует погрешность в установке поляризации относительно магнитного поля, задающего ось квантования, то лазером накачки также возбуждаются переходы с изменением проекции момента. В результате населенность будет постепенно перекачиваться в состояние $5S_{1/2}(F=1)$, но гораздо медленнее, чем в лабораторном магнитном поле, так как прецессия в лабораторном поле будет значительно подавлена.

Исходя из сказанного выше, эксперименты по измерению зависимости от времени для населенности состояния $5S_{1/2}(F=1)$ после действия оптической накачки и выталкивания выполнялись не по временной диаграмме рис. 2, а по модифицированным диаграммам, представленным справа на рис. 4. Лазер накачки имел интенсивность 6 мВт/см^2, суммарная интенсивность лучей лазера перекачки составляла 40 мВт/см^2, а лучей охлаждающего лазера — 55 мВт/см^2. Лучи лазера перекачки и охлаждения освещали атом изотропно с шести сторон во избежание светового давления этих лучей на атом, их поляризацию можно также считать изотропной. Луч лазера накачки заводился через окно вакуумной камеры МОЛ ортогонально лучу оптической дипольной ловушки и имел линейную поляризацию в горизонтальной плоскости, совпадающую с направлением дополнительного однородного магнитного поля величиной 4–5 Гс с точностью лучше 5°. Луч выталкивающего лазера имел интенсивность свыше 100 Вт/см^2, благодаря жесткой фокусировке, и удалял из ловушки атомы в состоянии $5S_{1/2}(F=2)$ с эффективностью выше 97 %, что было определено в отдельных измерениях.

На рис. 4*a* приведена измеренная зависимость (синие кружки) населенности состояния $5S_{1/2}(F=1)$ от времени T при первоначальной оптической накачке на переходе $5S_{1/2}(F=2) \to$ $\to 5P_{1/2}(F=2)$ под действием лазеров накачки и перекачки в течение 2 мс, и последующем действии одного только лазера накачки в течение варьируемого времени T, согласно временной диаграмме справа на рис. 4*a*. Дополнительное однородное магнитное поле при этом не прикладывалось, поэтому

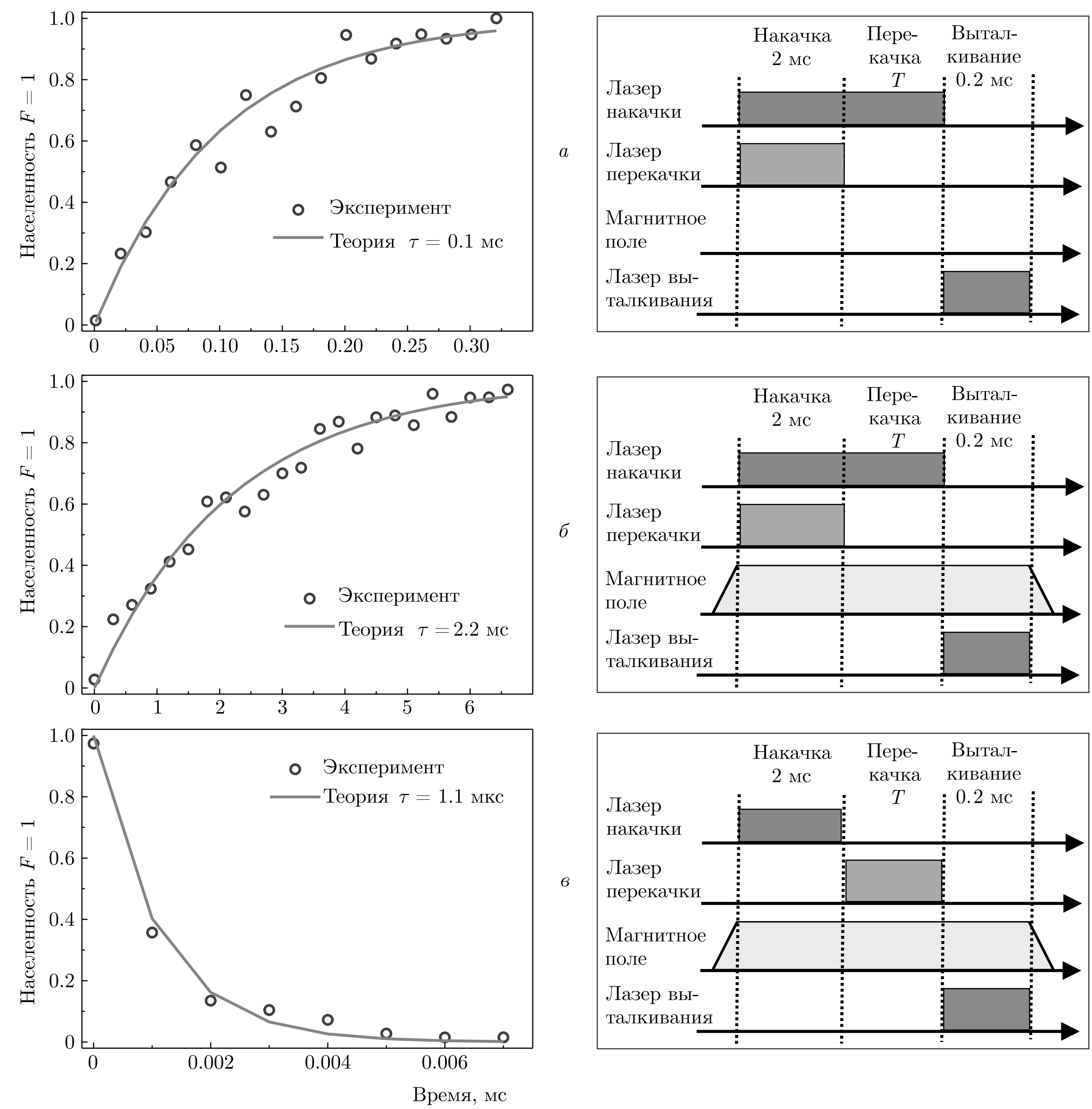


Рис. 4. *а*) Измеренная зависимость населенности состояния $5S_{1/2}(F=1)$ от времени T при первоначальной оптической накачке на переходе $5S_{1/2}(F=2) \to 5P_{1/2}(F=2)$ под действием лазеров накачки и перекачки в течение 2 мс и последующем действии одного только лазера накачки в течение варьируемого времени T согласно временной диаграмме справа. Дополнительное однородное магнитное поле при этом не прикладывалось. *б*) То же самое с приложением дополнительного магнитного поля. *в*) Измеренная зависимость населенности состояния $5S_{1/2}(F=1)$ от времени T при первоначальной полной перекачке населенности в состояние $5S_{1/2}(F=1)$ излучением лазера накачки, а затем в состояние $5S_{1/2}(F=2)$ излучением лазера перекачки в течение варьируемого времени T согласно временной диаграмме справа

атомы находились в остаточном лабораторном магнитном поле ($\sim$ 10 мГс согласно отдельным измерениям). При $T = 0$ населенность состояния $5S_{1/2}(F = 1)$ равна $1.5 \pm 1\,\%$, что говорит о том, что вся остальная населенность ($98.5\,\%$) приходится на состояние $5S_{1/2}(F = 2)$ и оптическая накачка работает. При увеличении T под действием лазера накачки происходит перекачка населенности в состояние $5S_{1/2}(F = 1)$ с постоянной времени 0.1 мс, которая найдена из аппроксимации эксперимента экспоненциальной кривой насыщения (красная кривая на рис. 4*а*). Населенность выходит на стационарное значение около $98 \pm 2\,\%$ за время 0.3 мс. Таким образом, в отсутствие дополнительного магнитного поля происходит быстрое (за время $\sim$ 0.1 мс) перемешивание магнитных подуровней состояния $5S_{1/2}(F = 2)$ в лабораторном магнитом поле, которое разрушает оптическую накачку.

На рис. 4*б* приведена аналогичная зависимость, измеренная в присутствии дополнительного однородного магнитного поля величиной 4–5 Гс. При $T = 0$ населенность состояния $5S_{1/2}(F = 1)$ составила $2.7 \pm 1\,\%$. При увеличении T под действием лазера накачки происходит перекачка населенности в состояние $5S_{1/2}(F = 1)$ с постоянной времени 2.2 мс. Населенность выходит на стационарное значение около $97 \pm 2\,\%$ за время 6 мс. Таким образом, в присутствии дополнительного магнитного поля перемешивание магнитных подуровней состояния $5S_{1/2}(F = 2)$ происходит в 20 раз медленнее, чем в лабораторном магнитом поле. Отсюда можно сделать вывод, что погрешность оптической накачки не превышает 5 %, а свыше 95 % населенности накачивается в состояние $5S_{1/2}(F = 2, M_F = 0)$. Точность ограничена погрешностью установки поляризации лазера накачки по отношению к однородному магнитному полю (1–2 %), а также погрешностью определения состояния одиночного атома при его регистрации методом выталкивания (2–3 %).

С точки зрения скорости выполнения пробных экспериментов по СВЧ-спектроскопии, может быть полезна также быстрая накачка в состояние $5S_{1/2}(F = 1)$ излучением лазера накачки по схеме рис. 4*а*. Атомы в состоянии $5S_{1/2}(F = 2)$ каждый раз удаляются выталкивающим лазером, поэтому для следующего измерения необходимо каждый раз загружать новый атом, в то время как атомы в состоянии $5S_{1/2}(F = 1)$ можно использовать в адаптивной схеме измерений (запуск по факту загрузки одиночного атома) несколько раз.

Осуществлять быструю оптическую накачку сверхтонкого состояния $5S_{1/2}(F = 2)$ без селекции по магнитным подуровням можно также излучением одного лишь лазера перекачки. На рис. 4*в* приведена измеренная зависимость населенности состояния $5S_{1/2}(F = 1)$ от времени при первоначальной полной перекачке населенности в состояние $5S_{1/2}(F = 1)$ излучением лазера накачки, а затем в состояние $5S_{1/2}(F = 2)$ излучением лазера перекачки в течение варьируемого времени T согласно временной диаграмме на рис. 4*в* справа. На ней видно, что перекачка в состояние $5S_{1/2}(F = 2)$ лазером перекачки происходит с постоянной времени 1.1 мкс, и при времени 6 мкс в состоянии $5S_{1/2}(F = 1)$ остается всего $1.5 \pm 1\,\%$ населенности.

Таким образом, нами была успешно реализована оптическая накачка как на сверхтонкий подуровень $5S_{1/2}(F = 2)$, так и на сверхтонкий подуровень $5S_{1/2}(F = 1)$ с точностью свыше 95 %, достаточно высокой для выполнения однокубитовых квантовых операций с одиночным атомом Rb в одиночной ловушке. В идеале точность оптической накачки может быть близка к 100 % [3], поэтому в настоящее время ведутся работы по дальнейшему улучшению накачки путем подбора различных параметров эксперимента.

4. СВЧ-ПЕРЕХОД В ОДИНОЧНОМ АТОМЕ ^{87}Rb

В атомах ^{87}Rb СВЧ-поле на частоте 6.834 ГГц вызывает магнитодипольные переходы между сверхтонкими зеемановскими подуровнями $5S_{1/2}(F = 2, M_F = 0) \to 5S_{1/2}(F = 1, M_F = 0)$ основного состояния (рис. 3*а*). СВЧ-переходы соответствуют вращению вектора состояний кубита на заданный угол и представляют собой однокубитовую операцию. Демонстрация наличия СВЧ-перехода проводится путем записи зависимости населенности конечного состояния $5S_{1/2}(F = 1)$ от времени (фактически, от площади СВЧ-импульса). При когерентных переходах должны наблюдаться осцилляции населенностей Раби. Мощность СВЧ-излучения подбирается для достижения максимальной вероятности перехода за время менее 10 мс. При обработке сигналов проводится пост-селекция событий, когда в дипольную ловушку был загружен один атом.

Для наблюдения СВЧ-переходов в одном атоме ^{87}Rb по схеме рис. 1 была реализована временная последовательность рис. 2. В качестве источника СВЧ-излучения использовался широкополосный перестраиваемый генератор Agilent E8257D-567 UNT1E 1007, имеющий максимальную выходную мощность 25–28 дБм, фазовый шум −143 дБм/Гц на частоте 1 ГГц и разрешающую способность перестройки частоты 0.01 Гц при ширине линии около 100 Гц. Генератор позволяет осуществлять импульсную модуляцию СВЧ-излучения с фронта-ми менее 100 нс. Излучение с генератора подается на рупорную антенну, установленную вплотную к одному из окон вакуумной камеры МОЛ. Линейно-поляризованная магнитная составляющая СВЧ-излучения на выходе антенны была сориентирована вдоль однородного магнитного поля, чтобы индуцировать СВЧ-переходы без изменения проекции полного момента атома.

Целью эксперимента было наблюдение «часового» СВЧ-перехода $5S_{1/2}(F = 2, M_F = 0) \to \to 5S_{1/2}(F = 1, M_F = 0)$ в присутствии однородного магнитного поля величиной 2–5 Гс. Естественная ширина этого перехода практически близка к нулю, так как радиационное время жизни рабочих уровней близко к бесконечности. Если СВЧ-импульс имеет конечную длительность, то ширина спектра перехода будет целиком определяться фурье-шириной импульса и частотой Раби. Этот переход не подвержен линейному эффекту Зеемана и имеет только квадратичный сдвиг $+575$ Гц/Гс^2 в магнитном поле. В отсутствие магнитного поля частота «часового» перехода известна с высокой точностью и равна 6834.682611 МГц. При калиброванной частоте генератора «часовой» переход должен обнаруживаться путем сканирования частоты и измерения населенностей, при этом шаг сканирования должен быть не более 1 кГц, так как ожидаемая ширина резонанса составляет такую же величину при длительности СВЧ-импульса 1 мс.

Другие возможные СВЧ-резонансы на рис. 3*а* (между состояниями с разными проекциями момента) имеют высокую чувствительность к магнитному полю (± 0.7 МГц/Гс) и большую ширину. Благодаря этому их легче обнаружить и идентифицировать. Даже в отсутствие дополнительного однородного магнитного поля они могут существенно сдвигаться лабораторным магнитным полем и иметь частоту, значительно отличающуюся от частоты «часового» перехода. Этот эффект был обнаружен нами в первых экспериментах по СВЧ-спектроскопии. Атом ^{87}Rb накачивался на подуровень $5S_{1/2}(F = 1)$ излучением охлаждающего лазера. Как уже упоминалось, работа с атомами в этом состоянии значительно увеличивает скорость выполнения экспериментов, так как атомы не удаляются выталкивающим лазером и их можно использовать многократно.

На рис. 5*а* представлены обзорные спектры СВЧ-переходов в атоме ^{87}Rb из состояния $5S_{1/2}(F = 1)$ в состояние $5S_{1/2}(F = 2)$ при использовании охлаждающего лазера в качестве лазера накачки. При такой накачке селективность по магнитным подуровням не обеспечивается, поэтому возможно наблюдение различных переходов. Первоначальный поиск «часового» перехода $5S_{1/2}(F = 2, M_F = 0) \to \to 5S_{1/2}(F = 1, M_F = 0)$ проводился вблизи расчетной частоты 6834.6826 МГц согласно имеющейся калибровке частоты СВЧ-генератора (зеленая стрелка на рис. 5*а*), при этом дополнительное магнитное поле не включалось.

На этой частоте был действительно обнаружен СВЧ-резонанс (правый синий провал на рис. 5*а*) в отсутствие внешнего магнитного поля. Однако он исчезал при приложении однородного магнитного поля величиной более 200 мГс. При изменении магнитного поля даже на небольшую величину (~ 20 мГс) этот резонанс заметно сдвигался (правый красный провал на рис. 5*а*), что говорит о том, что это на самом деле не «часовой» переход. Был сделан вывод, что калибровка частоты используемого СВЧ-генератора по неизвестной причине сбита на некоторую величину при частоте 6.834 ГГц. Впоследствии была выполнена дополнительная калибровка с использованием стандарта частоты на атомах Rb, которая обнаружила неточность установки частоты величиной около 100 кГц.

После этого были выполнены эксперименты со сканированием частоты СВЧ-генератора в более широких пределах. Сначала был обнаружен сравнительно широкий дополнительный СВЧ-резонанс на частоте 6834.48 МГц (левый синий провал на рис. 5*а*). При изменении магнитного поля на 20–30 мГс он заметно сдвигался (левый красный провал на рисунке рис. 5*а*). Это оказался также не «часовой» переход. Только после этого стало понятно, что «часовой» переход должен лежать посредине между правым и левым синими пиками на рис. 5*а*.

Далее были выполнены эксперименты со сканированием СВЧ-генератора вблизи центральной частоты 6834.57 МГц между двумя крайними резонансами. При уменьшении шага сканирования до 400 Гц был обнаружен «часовой» переход, не сдвигающийся в магнитном поле (центральный синий провал на рис. 5*а*). Его частота 6834.574 МГц сдвинута на 112 кГц относительно расчетной (зеленая стрелка на рис. 5*а*). На рис. 5*б* приведен полученный спектр «часового» перехода $5S_{1/2}(F = 2, M_F = 0) \to 5S_{1/2}(F = 1, M_F = 0)$, записанный с высоким разрешением. При длительности СВЧ-импульса 2 мс ширина резонанса составляет 600 Гц, что близко к фурье-ширине импульса. На крыльях спектра видны признаки осцилляций Раби. Поскольку в этом эксперименте для

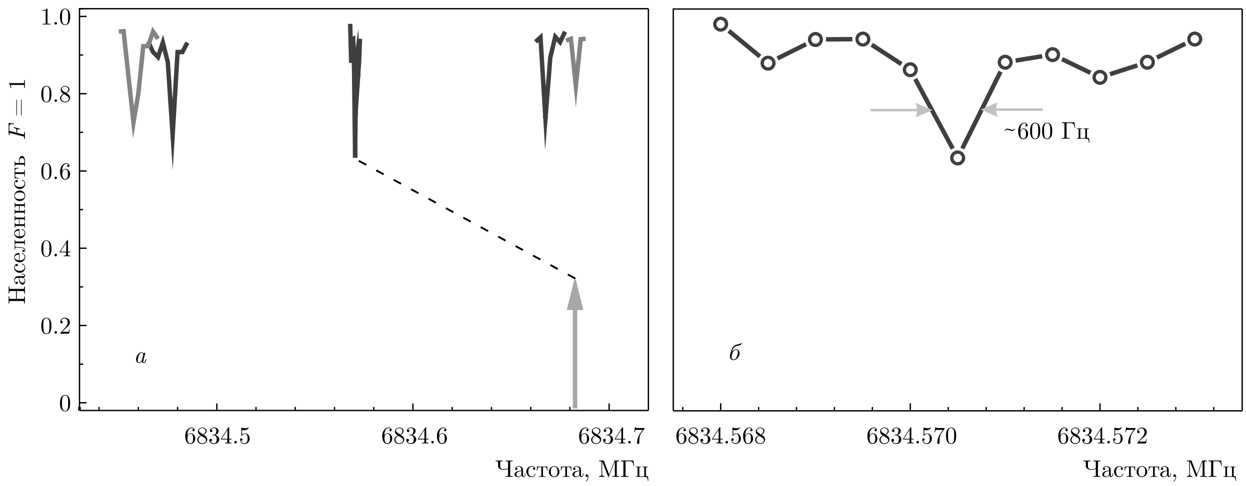


Рис. 5. *а*) Обзорные спектры СВЧ-переходов в атоме ^{87}Rb из состояния $5S_{1/2}(F = 1)$ в состояние $5S_{1/2}(F = 2)$ при использовании охлаждающего лазера в качестве лазера накачки. В центре наблюдается «часовой» переход, не сдвигающийся в магнитном поле, однако его частота сдвинута на 112 кГц относительно расчетной (зеленая стрелка). *б*) Спектр «часового» перехода $5S_{1/2}(F = 1, M_F = 0) \to 5S_{1/2}(F = 2, M_F = 0)$, записанный с высоким разрешением. При длительности СВЧ-импульса 2 мс ширина перехода составляет 600 Гц, что близко к фурье-ширине импульса. На крыльях спектра видны признаки осцилляций Раби

увеличения скорости записи не была реализована оптическая накачка на определенный зеемановский подуровень, амплитуда резонанса составляла около 40 % от максимально возможной.

Другие переходы, наблюдаемые на рис. 5*а*, отстроены по частоте от «часового» перехода примерно на ±100 кГц. В схеме на рис. 3*а* они соответствуют переходам с изменением проекции полного момента на ±1. Их линейный зеемановский сдвиг в магнитном поле составляет ±0.7 МГц/Гс, поэтому сдвиг резонансов на ±100 кГц означает присутствие нескомпенсированного лабораторного магнитного поля величиной 140 мГс. Для обеспечения оптической накачки с высокой точностью оно было скомпенсировано компенсирующими катушками МОЛ до величины менее 10 мГс путем подбора тока в этих катушках, сдвигающих дополнительные резонансы ближе к «часовому» переходу. Компенсация магнитного поля также должна уменьшать температуру атомов в МОЛ.

После этого стало возможным проведение экспериментов по наблюдению высококонтрастных осцилляций Раби на «часовом» переходе в присутствии однородного магнитного поля величиной 4–5 Гс. Благодаря большому зеемановскому сдвигу других переходов в таком поле можно было настроить СВЧ-излучение в резонанс только с «часовым» переходом. «Часовой» переход в идеальных условиях (без паразитных внешних полей) представляет собой идеальную двухуровневую систему без релаксации населенностей и фаз. Вероятность СВЧ-перехода в ней описываются простой формулой, которую можно получить путем решения уравнения Шредингера:

$$\rho(t) \approx \frac{\Omega^2/2}{\Omega^2 + \delta^2}\left[1 - \cos\left(t\sqrt{\Omega^2 + \delta^2}\right)\right], \qquad (1)$$

где Ω — частота Раби магнитодипольного «часового» перехода, а δ — отстройка от точной частоты «часового» перехода с учетом возможного светового сдвига частоты под действием лазера дипольной ловушки, если измерение проводится во включенной ловушке. При точном резонансе ($\delta = 0$) населенность осциллирует между начальным и конечным состоянием на частоте Ω (осцилляции Раби). Формула (1) также дает спектр перехода при сканировании δ для фиксированного времени взаимодействия t_0.

В формуле (1) осцилляции Раби происходят бесконечно долго. Однако на практике всегда присутствуют паразитные процессы (флуктуации частоты и мощности СВЧ-генератора, шумы магнитного поля, переходы под действием фонового теплового излучения, флуктуации точной частоты резонанса из-за световых сдвигов под действием лазера дипольной ловушки), которые приводят к затуханию осцилляций Раби и выходу населенностей на некоторые стационарные значения. В этом случае временная эволюция населенностей двухуровневой систе-

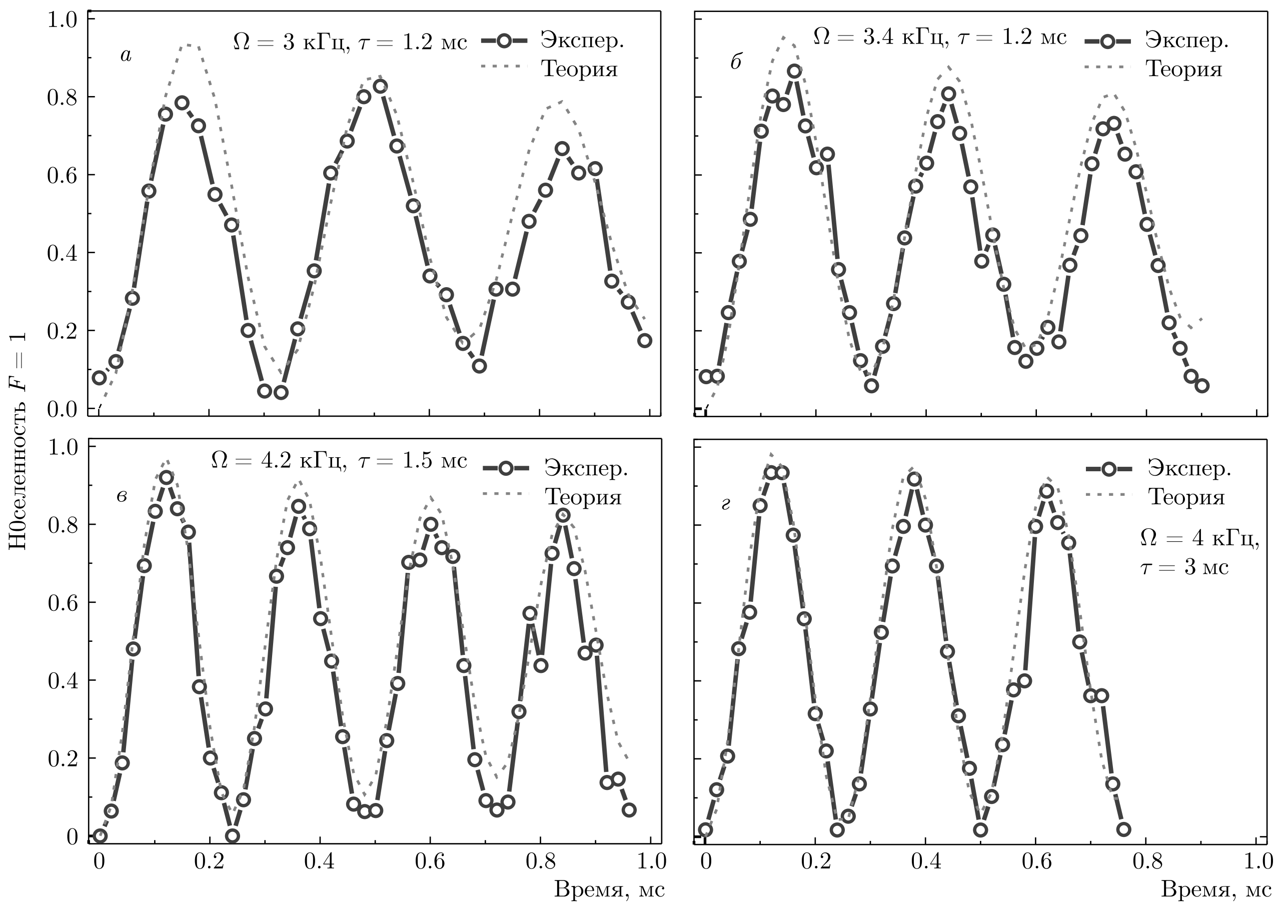


Рис. 6. Экспериментально полученные осцилляции Раби на «часовом» переходе $5S_{1/2}(F = 2, M_F = 0) \to \to 5S_{1/2}(F = 1, M_F = 0)$ (синие кружки) и их сравнение с теоретическим расчетом по формуле (2) (красные пунктирные кривые): $а$ — при мощности СВЧ-генератора 23 дБм и дипольной ловушке, модулированной на частоте 1 МГц; $б$ — при увеличении мощности до 24 дБм; $в$ — после подстройки поляризации СВЧ-излучения; $г$ — без модуляции дипольной ловушки

мы описывается более сложной формулой, которую мы получили в работе [25] на основе решения уравнений для матрицы плотности в присутствии релаксации населенностей и фаз со скоростью γ:

$$\rho(t) \approx \frac{\Omega^2}{2\Omega^2+\gamma^2+4\delta^2}\left[1-\exp\left(-\frac{2\Omega^2+\delta^2}{4\Omega^2+\delta^2}\gamma t\right)\right] + \\ + \frac{\Omega^2/2}{\Omega^2+\delta^2}\left[\exp\left(-\frac{2\Omega^2+\delta^2}{4\Omega^2+\delta^2}\gamma t\right) - \\ - \exp\left(-\frac{6\Omega^2+\delta^2}{4\Omega^2+\delta^2}\gamma t/2\right)\cos\left(t\sqrt{\Omega^2+\delta^2}\right)\right]. \quad (2)$$

Эта формула справедлива при $\Omega > 3\gamma$, когда частота Раби заметно превышает скорость релаксации. При $\gamma = 0$ она совпадает с формулой (1). Время когерентности (затухания) осцилляций Раби можно определить как $\tau = 1/\gamma$ и измерять его путем проведения сравнения между экспериментом и формулой (2).

На рис. 6 приведены записи осцилляций Раби, полученных на «часовом» переходе в различных условиях при первоначальной оптической накачке атомов в состояние $5S_{1/2}(F = 2, M_F = 0)$. Частота СВЧ-излучения настраивалась на центр перехода с учетом погрешности установки частоты генератора, квадратичного зеемановского сдвига в магнитном поле и светового сдвига под действием лазера дипольной ловушки. В первых записях (рис. 6$а$) при выходной мощности СВЧ-генератора 23 дБм наблюдались осцилляции Раби (синие кружки) с частотой 3 кГц и временем когерентности 1.2 мс. Время когерентности приближенно определялось из сравнения с теоретической кривой (красная штриховая линия на рис. 6$а$), полученной согласно формуле (2). Максимальная амплитуда и контраст первой осцилляции составляли $78 \pm 2\,\%$. Увеличение мощности до 24 дБм (рис. 6*б*) привело к увеличению частоты Раби до 3.4 кГц и амплитуды до $83 \pm 2\,\%$.

Поскольку увеличение мощности увеличило амплитуду осцилляций, представлялось целесообразным дальнейшее увеличение мощности. Однако мощность 24 дБм была ограничена предельным паспортным значением генератора на данной частоте. Поэтому дальнейшее увеличение амплитуды осцилляций было достигнуто путем подстройки поляризации СВЧ-излучения. Как было видно ранее на рис. 5*a*, поляризация была не точно выставлена вдоль магнитного поля, так как возбуждались СВЧ-переходы как без изменения, так и с изменением проекции магнитного момента. Несмотря на то, что ориентация СВЧ-рупора должна была задавать строго горизонтальную магнитную составляющую СВЧ-поля на входе в вакуумную камеру МОЛ, в центре камеры, где находится дипольная ловушка, поляризация оказывается повернутой на десятки градусов. По-видимому, это является результатом многократных переотражений СВЧ-волны от стенок камеры. Этот поворот был скомпенсирован путем вращения рупора вокруг продольной оси. Подбор ориентации рупора позволил увеличить частоту осцилляций Раби до 4.2 кГц и амплитуду до $92 \pm 2\,\%$ (рис. 6*в*), при этом время когерентности возросло до 1.5 мс.

Наконец, было высказано предположение, что контраст осцилляций Раби может быть ограничен вследствие модуляции лазера дипольной ловушки на частоте 1 МГц. Модуляция может приводить к частичной потере когерентности в течение лазерных импульсов, когда световой сдвиг «часового» перехода изменяется в процессе модуляции. Поэтому было выполнено дополнительное измерение осцилляций Раби при непрерывно включенной дипольной ловушке (рис. 6*г*). В этом режиме частота Раби снизилась до 4 кГц, но увеличилось время когерентности до 3 мс, что привело к увеличению амплитуды первой осцилляции до $94 \pm 2\,\%$. С учетом погрешности измерений такой контраст позволяет выполнять однокубитовые квантовые операции с точностью до 95 %.

Для рис. 6*в* и 6*г* были также исследованы спектры «часового» перехода $5S_{1/2}(F = 2, M_F = 0) \to$ $\to 5S_{1/2}(F = 1, M_F = 0)$ с высоким разрешением. На рис. 7 приводятся их экспериментальные записи (синие кружки) и теоретический расчет по формуле (1) (красные штриховые кривые) при времени взаимодействия $t_0 = 0.12$ мс, соответствующем первому максимуму осцилляций Раби. Формула (1) здесь применима благодаря короткому времени взаимодействия. Рисунок 7*a* соответствует спектру при включенной модуляции дипольной ловушки и частоте Раби 4.2 кГц, а рис. 7*б* — без модуляции дипольной ловушки и частоте Раби 4 кГц. Формы резонансов близки к теоретическим. Ширины резонансов составляют около 7 кГц и обусловлены в основном фурье-шириной СВЧ-импульса.

Обращает на себя внимание сдвиг центральной частоты резонанса около 8 кГц между двумя записями на рис. 7. Он вызван разницей в среднем световом сдвиге при модуляции ловушки и без модуляции, так что частота резонанса зависит от мощности лазера ловушки. Поэтому небольшое расхождение теории и эксперимента на вершинах резонансов предположительно связано с медленными дрейфами мощности дипольной ловушки в процессе записи, который занимает длительное время (около 1 ч). Наблюдаемая разница световых сдвигов соответствует расчетной при мощности излучения лазера дипольной ловушки 250 мВт на входе в вакуумную камеру МОЛ и радиусе пятна в фокусе ловушки 5 мкм по уровню интенсивности e^{-2}.

5. ОДНОКУБИТОВЫЕ КВАНТОВЫЕ ОПЕРАЦИИ НА СВЧ-ПЕРЕХОДЕ В ОДИНОЧНОМ АТОМЕ ^{87}Rb

Базовыми однокубитовыми квантовыми операциями являются вентиль Адамара H, который создает когерентную суперпозицию двух состояний кубита, и вентиль инверсии NOT, который инвертирует состояние кубита. В нашем эксперименте их выполнение осуществляется путем экспериментального наблюдения осцилляций населенностей Раби на СВЧ-переходе и построения таблиц истинности при вращении вектора состояний кубита на угол π для вентиля NOT и на угол $\pi/2$ для вентиля H при различных начальных состояниях (логические «0» и «1»). В качестве логического «0» выбирается начальное состояние СВЧ-перехода $5S_{1/2}(F = 2, M_F = 0)$, а в качестве логической «1» — конечное состояние $5S_{1/2}(F = 1, M_F = 0)$. Для приготовления начального состояния «1» сначала используется операция NOT, которая объединяется с последующим вращением кубита. Завершение каждой однокубитовой операции соответствует заданным площадям СВЧ-импульсов, показанным на рис. 8*a*.

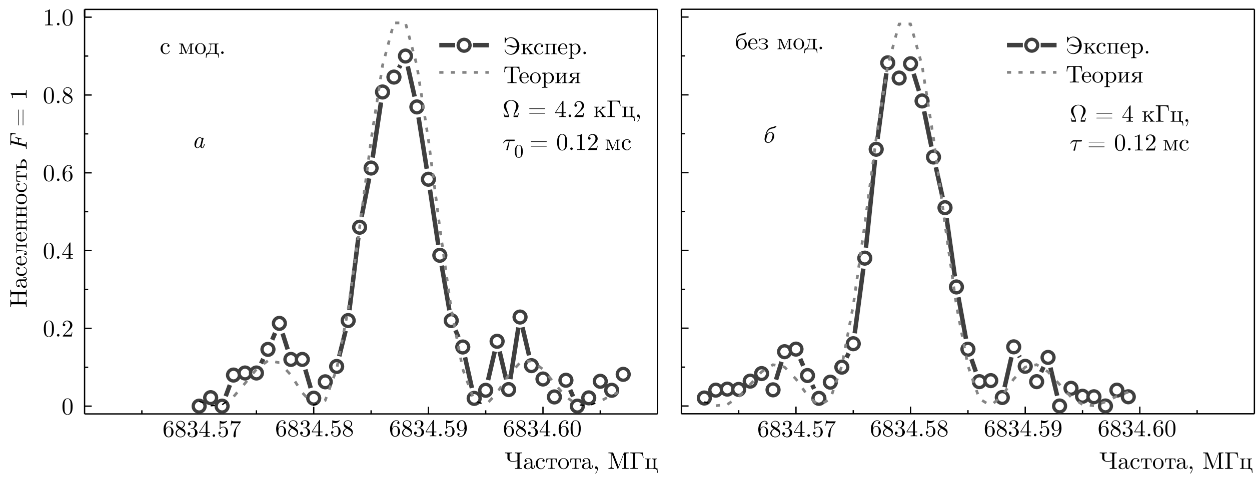


Рис. 7. Экспериментальные записи спектра «часового» перехода $5S_{1/2}(F=2, M_F=0) \to 5S_{1/2}(F=1, M_F=0)$ (синие кружки) и их сравнение с теоретическим расчетом по формуле (1) (красные пунктирные кривые) при времени взаимодействия $t_0 = 0.12$ мс и частоте Раби: *а* — 4.2 кГц при включенной модуляции дипольной ловушки; *б* — 4 кГц без модуляции дипольной ловушки

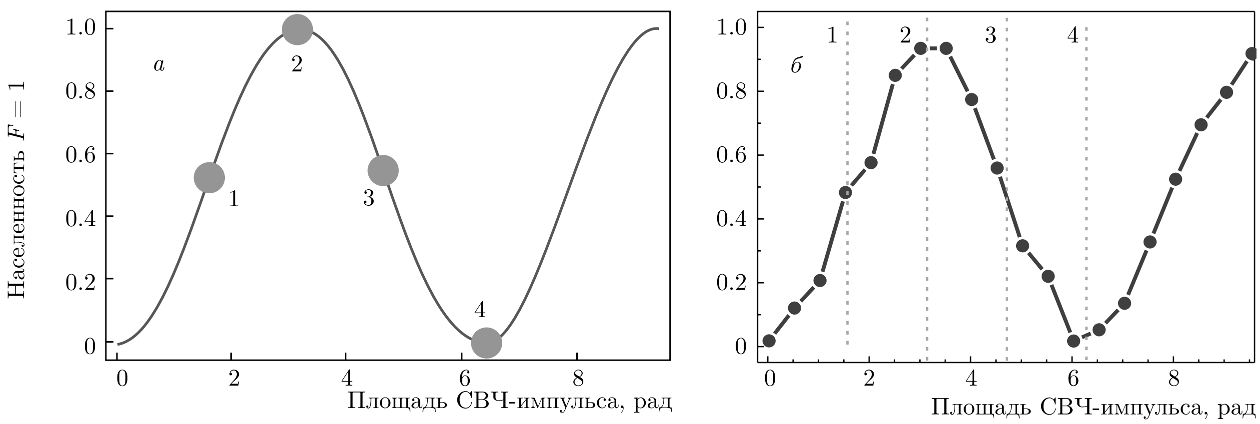


Рис. 8. *а*) Идеальные осцилляции Раби на «часовом» СВЧ-переходе $5S_{1/2}(F=2, M_F=0) \to 5S_{1/2}(F=1, M_F=0)$ между сверхтонкими подуровнями основного состояния атома ^{87}Rb для выполнения однокубитовых квантовых операций на их основе. Точками обозначены конечные фазы осцилляций Раби, использующиеся для различных однокубитовых операций. *б*) Экспериментальная запись осцилляций Раби, соответствующая рис. 6*г*. Вертикальные линии задают точки пересечения площадей импульсов $\pi/2$, π, $3\pi/2$, 2π с экспериментальными осцилляциями Раби для определения точности выполнения однокубитовых операций

На рис. 8*б* представлена экспериментальная запись осцилляций Раби из рис. 6*г*, приведенная к масштабам шкал образцового рис. 8*а*. Вертикальные линии задают точки пересечения площадей $\pi/2$, π, $3\pi/2$, 2π с экспериментальными осцилляциями для определения точности выполнения однокубитовых операций.

В случае начального состояния «0» вентилю Адамара соответствует поворот на угол $\pi/2$, при этом СВЧ-импульс завершается в момент 1 (импульс площадью $\pi/2$). После вращения на угол $\pi/2$ населенность в точке 1 на рис. 8*б* составляет 0.489 ± 0.02 вместо идеального значения 0.5 на рис. 8*а*. Таким образом, точность выполнения вентиля Адамара из начального состояния «0» равна $97.8 \pm 4\,\%$.

В случае начального состояния «0» вентилю NOT соответствует поворот на угол π, СВЧ-импульс завершается в момент 2 (импульс площадью π). На рис. 8*б* после вращения на угол π населенность в точке 2 составляет 0.935 ± 0.02 вместо идеального значения 1 на рис. 8*а*. Таким образом, точность выполнения вентиля NOT из начального состояния «0» равна $93.5 \pm 2\,\%$.

Таблица истинности для каждой из однокубитовых операций по результатам измерений с различными начальными состояниями кубита

Начальное состояние кубита	Результат выполнения операции H	Точность выполнения операции H	Результат выполнения операции NOT	Точность выполнения операции NOT
0	0.489 ± 0.02	$97.8 \pm 4\,\%$	0.935 ± 0.02	$93.5 \pm 2\,\%$
1	0.465 ± 0.02	$93 \pm 4\,\%$	0.035 ± 0.02	$96.5 \pm 2\,\%$

Для построения таблиц истинности, соответствующих начальному состоянию «1», предварительно выполняется приготовление этого состояния поворотом кубита на угол π. На рис. 8*а* такое приготовление соответствует точке 2. Тогда на экспериментальной записи рис. 8*б* точность приготовления состояния «1» равна $93.5 \pm 2\,\%$.

Для выполнения вентиля Адамара из состояния «1» происходит дополнительный поворот на угол $\pi/2$, что соответствует завершению СВЧ-импульса в момент 3. На рис. 8*б* после вращения из точки 2 на угол $\pi/2$ населенность в точке 3 составляет 0.465 ± 0.02 вместо идеального значения 0.5 на рис. 8*а*. Таким образом, точность выполнения вентиля Адамара из начального состояния «1» равна $93 \pm 4\,\%$.

Для выполнения вентиля NOT из состояния «1» происходит дополнительный поворот на угол π, что соответствует завершению СВЧ-импульса в момент 4. На рис. 8*б* после вращения из точки 2 на угол π населенность в точке 4 составляет 0.035 ± 0.02 вместо идеального значения 0 на рис. 8*а*. Тогда точность выполнения вентиля NOT из начального состояния «1» равна $96.5 \pm 2\,\%$.

По результатам этих измерений была составлена таблица истинности для каждой из однокубитовых операций (таблица). Из нее можно определить, что средняя точность выполнения однокубитовых квантовых операций с одиночным атомом Rb составила $95.2 \pm 3\,\%$. В работах других групп была продемонстрирована точность однокубитовой операции с нейтральными атомами на основе СВЧ-перехода выше 99 % [26], поэтому в настоящее время ведутся работы по дальнейшему улучшению точности путем варьирования различных параметров эксперимента.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Наши эксперименты с одиночным атомом ^{87}Rb в оптической дипольной ловушке диаметром менее 10 мкм, сформированной длиннофокусным объективом с малой числовой апертурой и расположенным снаружи магнитооптической ловушки, показали, что выполнение захвата, удержания и управления квантовым состоянием одиночного атома возможно с точностью, достаточной для выполнения однокубитовых квантовых операций. Более того, одиночный атом может регистрироваться sCMOS-видеокамерой вместо EMCCD-камер, которые обычно используются для этой цели. Такая sCMOS-камера значительно дешевле EMCCD-камер, и в то же время она обеспечивает малые шумы регистрации и считывания. Мы показали, что sCMOS-камера пригодна для регистрации одиночных атомов при временах экспозиции 50–200 мс. Это время в несколько раз больше, чем для EMCCD-камер, но оно достаточно коротко для выполнения квантовых операций с одиночным атомом.

В такой экспериментальной схеме нам удалось осуществить оптическую накачку, наблюдать «часовой» СВЧ-переход между двумя сверхтонкими подуровнями одиночного атома ^{87}Rb и продемонстрировать на нем осцилляции населенностей Раби с контрастом до 95 %. Это эквивалентно выполнению базовых однокубитовых квантовых операций (вентилей Адамара и NOT) из различных начальных состояний кубита с точностью до 95 %. При дальнейшем совершенствовании экспериментальной установки точность может быть увеличена свыше 99 %, а сами эксперименты могут выполняться с массивом оптических дипольных ловушек, представляющих собой квантовый регистр. Отметим, что эксперименты в этом направлении, но с асферическими линзами внутри вакуумной камеры, выполняются также в Московском государственном университете, где была продемонстрирована загрузка одиночных атомов Rb в массив ловушек [9] и реализованы однокубитовые операции с одиночным атомом.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-52-15010) (в части теории квантовой информатики), Российского научного фонда (грант № 18-12-00313) (в части экспериментальной реализации квантовых операций), Фонда перспективных исследований (в части создания экспериментальной установки) и Новосибирского государственного университета.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Saffman, T. G. Walker, and K. Mølmer, Rev. Mod. Phys. **82**, 2313 (2010).

2. И. И. Рябцев, И. И. Бетеров, Д. Б. Третьяков, В. М. Энтин, Е. А .Якшина, УФН **182**, 206 (2016) [I. I. Ryabtsev, I. I. Beterov, D. B. Tretyakov, V. M. Entin, and E. A. Yakshina, Phys. Usp. **59**, 196 (2016)].

3. M. Saffman, J. Phys. B **49**, 202001 (2016).

4. D. Barredo, S. de Léséleuc, V. Lienhard, T. Lahaye, and A. Browaeys, Science **354**, 1021 (2016).

5. T. M. Graham, M. Kwon, B. Grinkemeyer, Z. Marra, X. Jiang, M. T. Lichtman, Y. Sun, M. Ebert, and M. Saffman, Phys. Rev. Lett. **123**, 230501 (2019).

6. H. Levine, A. Keesling, G. Semeghini, A. Omran, T. T. Wang, S. Ebadi, H. Bernien, M. Greiner, V. Vuletić, H. Pichler, and M. D. Lukin, Phys. Rev. Lett. **123**, 170503 (2019).

7. W. Lee, M. Kim, H. Jo, and Y. Song, J. Ahn. Phys. Rev. A **99**, 043404(2019).

8. M. Schlosser, D. O. de Mello, D. Schäffner, T. Preuschoff, L. Kohfahl, and G. Birkl, J. Phys. B **53**, 144001 (2020).

9. S. R. Samoylenko, A. V. Lisitsin, D. Schepanovich, I. B. Bobrov, S. S. Straupe, and S. P. Kulik, Las. Phys. Lett. **17**(2), 025203 (2020).

10. T. F. Gallagher, *Rydberg Atoms*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1994).

11. N. Schlosser, G. Reymond, and P. Grangier, Phys. Rev. Lett. **89**, (023005) 2002.

12. E. A. Yakshina, D. B. Tretyakov, I. I. Beterov, V. M. Entin, C. Andreeva, A. Cinins, A. Markovski, Z. Iftikhar, A. Ekers, and I. I. Ryabtsev, Phys. Rev. A **94**, 043417 (2016).

13. M. J. Piotrowicz, M. Lichtman, K. Maller, G. Li, S. Zhang, L. Isenhower, and M. Saffman, Phys. Rev. A **88**, 013420 (2013).

14. M. Endres, H. Bernien, A. Keesling, H. Levine, E. R. Anschuetz, A. Krajenbrink, C. Senko, V. Vuletic, M. Greiner, and M. D. Lukin, Science **354**, 1024 (2016).

15. X. Li, F. Zhou, M. Ke, P. Xu, X.-D. He, J. Wang, and M.-S. Zhan, Appl. Opt. **57**(26), 7584 (2018).

16. V. A. Sautenkov, S. A. Saakyan, A. A. Bobrov, D. A. Kudrinskiy, E. V. Vilshanskaya, and B. B. Zelener, J. Russian Laser Research **40**, 230 (2019).

17. E. T. Davletov, V. V. Tsyganok, V. A. Khlebnikov, D. A. Pershin, D. V. Shaykin, and A. V. Akimov, Phys. Rev. A **102**, 011302(R) (2020).

18. Е. С. Федорова, Д. О. Трегубов, А. А. Головизин, Д. А. Мишин, Д. И. Проворченко, К. Ю. Хабарова, В. Н. Сорокин, Н. Н. Колачевский, КЭ **50**(3), 220 (2020) [E. S. Fedorova, D. O. Tregubov, A. A. Golovizin, D. A. Mishin, D. I. Provorchenko, K. Yu. Khabarova, V. N. Sorokin, and N. N. Kolachevsky, Quantum Electronics **50**(3), 220 (2020)].

19. В. А. Виноградов, К. А. Карпов, С. С. Лукашов, А. В. Турлапов, КЭ **50**(6), 520 (2020) [V. A. Vinogradov, K. A. Karpov, S. S. Lukashov, and A. V. Turlapov, Quantum Electronics **50**(6), 520 (2020)].

20. А. М. Машко, А. А. Мейстерсон, А. Е. Афанасьев, В. И. Балыкин, КЭ **50**(6), 530 (2020) [A. M. Mashko, A. A. Meysterson, A. E. Afanasiev, and V. I. Balykin, Quantum Electronics **50**(6), 530 (2020)].

21. И. И. Бетеров, Е. А. Якшина, Д. Б. Третьяков, В. М. Энтин, У. Сингх, Я. В. Кудлаев, К. Ю. Митянин, К. А. Панов, Н. В. Альянова, И. И. Рябцев, КЭ **50**(6), 543 (2020) [I. I. Beterov, E. A. Yakshina, D. B. Tretyakov, V. M. Entin, U. Singh, Ya. V. Kudlaev, K. Yu. Mityanin, K. A. Panov, N. V. Alyanova, and I. I. Ryabtsev, Quantum Electronics **50**(6), 543 (2020)].

22. J. D. Pritchard, J. A. Isaacs, and M. Saffman, Rev. Sci. Instr. **87**, 073107 (2016).

23. C. Weitenberg, M. Endres, J. F. Sherson, M. Cheneau, P. Schauß, T. Fukuhara, I. Bloch, and S. Kuhr, Nature **471**, 319 (2011).

24. T. Xia, M. Lichtman, K. Maller, A. W. Carr, M. J. Piotrowicz, L. Isenhower, and M. Saffman, Phys. Rev. Lett. **114**, 100503 (2015).

25. В. М. Энтин, Е. А. Якшина, Д. Б. Третьяков, И. И. Бетеров, И. И. Рябцев, ЖЭТФ **143**(5), 831 (2013) [V. M. Entin, E. A. Yakshina, D. B. Tretyakov, I. I. Beterov, and I. I. Ryabtsev, JETP **116**, 721 (2013)].

26. C. Sheng, X. He, P. Xu, R. Guo, K. Wang, Z. Xiong, M. Liu, J. Wang, and M. Zhan, Phys. Rev. Lett. **121**, 240501(2018).

ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 3, стр. 424–433

СОЛИТОНЫ В ХИРАЛЬНОЙ СРЕДЕ

А. А. Заболотский[*]

Институт автоматики и электрометрии Сибирского отделения Российской академии наук 630090, Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 18 ноября 2020 г.,
после переработки 18 ноября 2020 г.
Принята к публикации 20 ноября 2020 г.

Исследуется динамика поля в тонком волноводе, окруженном спирально расположенными двухуровневыми атомами. Взаимодействие индуцированных поляризаций атомов с полем, распространяющимся внутри волновода, описывается системой редуцированных уравнений Максвелла – Блоха в приближении однонаправленного распространения поля. Нелокальное диполь-дипольное взаимодействие поляризаций атомов в спирали описывается в приближении взаимодействия ближайших соседей в криволинейной среде. Методом, основанном на задаче Римана с нулями, найдены солитонные решения интегрируемой редукции системы уравнений, описывающие несимметричное распространение импульсов поля в волноводе в прямом и обратном направлениях. Показано, что в зависимости от знака хиральности или направления распространения импульс поля в волноводе может иметь форму либо острого пика, либо близкую прямоугольной. Решения, описывающие эволюцию импульсов поля на ненулевом пьедестале, показывают, что форма и амплитуда импульсов поля могут контролироваться параметрами внешней накачки.

DOI: 10.31857/S0044451021030044

1. ВВЕДЕНИЕ

Асимметричное распространение волн, вызванное нелинейностью, возникает в различных областях физики, включая нелинейную оптику. Электронный диод, основанный на эффекте Фарадея, является ключевым компонентом в оптических и микроволновых системах [1–3]. Так называемый полностью оптический диод был предсказан в [4–8], а затем реализован экспериментально в [9]. В качестве основы диода предлагалось использовать левосторонние метаматериалы [10], квазипериодические системы [11], связанные линейные и нелинейные резонаторы [12–14]. Асимметричное пропускание в структурах метаматериалов возникает, если распространение сопровождается преобразованием поляризации [6, 8]. В оптике простейший изолятор, использующий невзаимное пропускание циркулярно поляризованного света, состоит из пары поляризаторов и вращателя Фарадея и для него требуется статическое магнитное поле. Аналогичный подход используется и для микроволновых устройств [1].

Изучение нелинейных невзаимных эффектов представляет как теоретический, так и прикладной интерес, поскольку формирование ультрокоротких импульсов поля в несимметричных, хиральных и криволинейных средах может существенно отличаться от случаев однородных и симметричных сред. Аналитическую информацию об эволюции оптических и других импульсов в нелинейных средах можно получить, решая начально-краевые задачи для полностью интегрируемых уравнений [15–17]. Первые полностью интегрируемые уравнения Максвелла – Блоха, описывающие эволюцию электромагнитных волн в двухуровневой системе (ДУС), были выведены Лэмбом [18] в рамках приближения медленно меняющейся огибающей. Позже были найдены интегрируемые обобщения этих уравнений, описывающие эволюцию электромагнитных импульсов как с применением приближения медленной огибающей, так и вне его, см. обзоры [16, 17]. Различие нелинейных эффектов, определяющих эволюцию возбуждений в прямолинейных и изогнутых молекулярных цепочках, в рамках интегрируемых моделей показано в [19, 20].

Если расстояние между атомами намного меньше резонансной длины волны, то нелокальное диполь-дипольное взаимодействие (ДДВ) может ока-

[*] E-mail: zabolotskii@iae.nsk.su

зывать существенное влияние на формирование возбуждений в дипольных средах и на многие другие линейные и нелинейные процессы [21–29]. В приближении взаимодействия ближайших соседей взаимодействие диполей, расположенных на искривленных поверхностях, описывается лапласианом в криволинейных координатах [30]. В двумерных и трехмерных структурах, например, в магнитах и жидких кристаллах, эффекты, связанные с ДДВ и геометрическими факторами, играют решающую роль. Оптические хиральные среды могут быть сформированы из спирально расположенных атомов, см., например, [20].

В настоящей работе интегрируемая модель применяется для описания влияния хиральности и нелинейной обратной связи на распространение импульсов поля. В следующем разделе статьи представлена базовая система редуцированных уравнений Максвелла – Блоха (РУМБ), описывающая динамику ультракоротких импульсов поля в волноводе, окруженном спиралями с ДУС. В разд. 3 приведено ее представление нулевой кривизны. Свойства симметрии описаны в разд. 4. Метод, основанный на решении задачи Римана с нулями [15], описан в разд. 5. Солитонные решения представлены в разд. 6. Выводы даны в Заключении.

2. ВЫВОД УРАВНЕНИЙ МОДЕЛИ

Хиральная среда, изучаемая в данной работе, показана на рис. 1. Атомы или молекулы, моделированные ДУС, имплантированы в кривые, образующие спирали. Осциллирующие дипольные моменты переходов в атомах создают электромагнитное поле $\widetilde{\mathbf{E}}$, которое распространяется вдоль и против направления оси z в волноводе. Для цепочки атомов, расположенных на кривой $\boldsymbol{\gamma}(s)$, энергия взаимодействия поля $\widetilde{\mathbf{E}}(s)$ с поляризацией среды $\widetilde{\mathbf{P}}(s) = \sum_n g_d(s - s_n)\widetilde{\boldsymbol{\rho}}(s_n)$ пропорциональна $-\widetilde{\mathbf{E}} \cdot \widetilde{\mathbf{P}}_m$, где $s_n = an$, $n = \ldots, -2, -1, 0, 1, 2, \ldots,$ — координаты атомов на кривой, $\widetilde{\boldsymbol{\rho}}$ — индуцированная поляризация одного атома, g_d — коэффициент взаимодействия. Знак тильда над функциями означает, что они определены в точке на кривой $s \in \boldsymbol{\gamma}(s)$. Для расстояний, много меньших длины волны, поле диполя убывает как куб расстояния, поэтому для упрощения модели используем приближение взаимодействия только с ближайшими соседями, которое ранее успешно применялось к аналогичным молекулярным цепочкам, см., например, [21,24]. С учетом полей поляризаций только ближайших соседей нелокальная поляризация имеет вид

$$\begin{aligned}\widetilde{\mathbf{P}}(s_n) \approx g_d(0)\widetilde{\boldsymbol{\rho}}(\boldsymbol{\gamma}(s_n)) + \\ + g_d(s_n - s_{n-1})\widetilde{\boldsymbol{\rho}}(\boldsymbol{\gamma}(s_{n-1})) + \\ + g_d(s_n - s_{n+1})\widetilde{\boldsymbol{\rho}}(\boldsymbol{\gamma}(s_{n+1})).\end{aligned} \quad (1)$$

В декартовых координатах $\mathbf{e}_{x,y,z}$ спираль $\boldsymbol{\gamma}(s)$ имеет вид

$$\boldsymbol{\gamma}(s) = \mathcal{R}\left[\mathbf{e}_x \cos(\phi) + \mathbf{e}_y \sin(\phi)\right] + \mathbf{e}_z \mathcal{C}\phi\mathcal{P}. \quad (2)$$

Здесь $\phi = s/\mathcal{L}, \mathcal{L} = \sqrt{\mathcal{P}^2 + \mathcal{R}^2}$, $\mathcal{R}$ и $\mathcal{P}$ — соответственно радиус и шаг спирали, $\mathcal{C} = \pm 1$ — хиральность спирали. Для рассматриваемых здесь симметричных спиралей кривизна $\mathcal{C}_h = \mathcal{R}/\mathcal{L}^2$, а также кручение $\mathcal{T}_h = \mathcal{C}\mathcal{P}/\mathcal{L}^2$ — константы. Мы предполагаем, что $s_n - s_{n-1} \ll \mathcal{R}, \mathcal{P}$. Разность между проекциями спиральных положений атомов на продольную координату z имеет вид

$$z_n - z_{n-1} = (s_n - s_{n-1})\mathcal{C}\mathcal{P}/\mathcal{L} \equiv a\mathcal{C}\mathcal{P}/\mathcal{L}. \quad (3)$$

Тангенциальный $\mathbf{T} = \partial_s\boldsymbol{\gamma}(s)$, нормальный $\mathbf{N}$ и бинормальный $\mathbf{B}$ векторы образуют базис Френе – Серре [30]. Для простоты полагаем, что $\mathcal{C}_h \to 0$. В итоге движение возбуждения по спирали сводится к вращению нормального и бинормального векторов вокруг оси z. Чтобы учесть влияние полей наведенных диполей соседних атомов, перейдем к вращающейся системе координат $\widetilde{\boldsymbol{\rho}} = \hat{M}(\mathcal{C}_h \to 0)\mathbf{P}$, $\widetilde{\mathbf{E}} = \hat{M}(\mathcal{C}_h \to 0)\boldsymbol{\mathcal{E}}$, где $\mathbf{P} = \{P_x, P_y, P_z\}^T$, $\boldsymbol{\mathcal{E}} = \{\mathcal{E}_x, \mathcal{E}_y, \mathcal{E}_z\}^T$. Здесь и ниже функции без тильды определены на оси z. При смещении $s \to s \pm a$ вектор поляризации $\mathbf{P}_\perp = \{P_x, P_y\}^T$ вращается $\mathbf{P}_\perp(s) \to \hat{M}_\perp(s)^{-1}\hat{M}_\perp(s \pm a)\mathbf{P}_\perp(s \pm a) = \hat{M}_\perp(\pm a)\mathbf{P}_\perp(s \pm a)$. Это вращение описывается матрицей $\hat{M}_\perp(\pm a)$:

$$\hat{M}_\perp(s) = \begin{bmatrix} -\cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & -\cos\phi \end{bmatrix}. \quad (4)$$

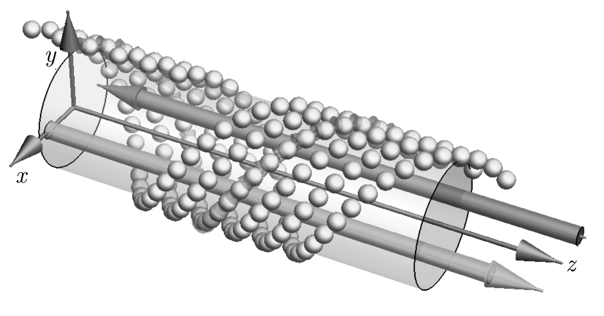


Рис. 1. Вид хиральной среды. Направление распространения импульсов параллельно оси z показано стрелками. Сферы обозначают атомы, расположенные на спиралях

В этом приближении находим из (1) с учетом проекции на ось z

$$\hat{M}_\perp(a)\mathbf{P}_\perp(s+a) + \hat{M}_\perp(-a)\mathbf{P}_\perp(s-a) = \\ = 2\hat{I}\mathbf{P}_\perp(s) - 2a^2\mathcal{T}_h \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \partial_z \mathbf{P}_\perp(z) + \\ + a^2\hat{I}\partial_s^2\mathbf{P}_\perp(s) + \mathcal{O}(a^3), \quad (5)$$

где $\hat{I}$ — единичная 2×2-матрица. Во втором члене в правой части уравнения (5) использована проекция на ось z с учетом (3).

Интегрируемость модели позволяет выявить определяющие нелинейные эффекты, проанализировать начальные условия и провести сравнение с результатами численного анализа исходной более общей модели. Чтобы найти полностью интегрируемую модель, мы предполагаем помимо стандартных условий, таких как отсутствие потерь и одномерность волновода, что второй производной по s в правой части уравнения (5) можно пренебречь. Это условие обсуждается в разд. 5. Уравнения Максвелла, описывающие эволюцию двухкомпонентного электрического поля в прямолинейном волноводе, распространяющегося в направлении оси z или против нее, см. рис. 1, с учетом поляризаций спирально расположенных атомов имеют вид

$$\left[\partial_z^2 - \frac{1}{c^2}\partial_t^2\right]\boldsymbol{\mathcal{E}}_\perp = \frac{4\pi N_a d_a}{c^2} \times \\ \times \partial_t^2 \left[(1+2g_0) + \gamma_c \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \partial_z\right]\mathbf{P}_\perp, \quad (6)$$

где $g_0 = g_d(\pm a)$, $g_d(0) = 1$, $\gamma_c = -g_0 2a^2\mathcal{CP}/\mathcal{L}$, c — фазовая скорость поля в среде и $\boldsymbol{\mathcal{E}}_\perp = \{\mathcal{E}_x(z,t), \mathcal{E}_y(z,t)\}^T$. Второй матричный член в правой части уравнений (6) обусловлен влиянием криволинейного расположения атомов вокруг волновода.

При условии $4\pi N_a d_a^2/\hbar\omega_a \le 1$, где N_a, d_a, ω_a — плотность ДУС, дипольный момент и частота перехода соответственно, применимо приближение однонаправленного распространения волновых пакетов [31]. Для оптических полей приближение выполнимо для $N_a \lesssim 10^{-18}$ см$^{-3}$. Формально условие можно представить в виде

$$\partial_z + \varepsilon\partial_{ct} \ll \partial_t, \partial_z, \quad (7)$$

где $\varepsilon = 1$ соответствует направлению распространения поля слева направо, а $\varepsilon = -1$ — противоположному направлению.

При условиях (7) уравнения (6) принимают вид

$$\frac{\partial E_x}{\partial \chi} = \frac{\partial P_x}{\partial \tau} + b\frac{\partial^2 P_y}{\partial \tau^2}, \quad (8)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial \chi} = \frac{\partial P_y}{\partial \tau} - b\frac{\partial^2 P_x}{\partial \tau^2}. \quad (9)$$

Здесь $E_{x,y} = d_0\mathcal{E}_{x,y}/(\hbar\omega)$, $\tau = t\omega$, $\epsilon = \varepsilon\mathcal{C} = \pm 1$ и

$$b = \frac{-\epsilon g_0 \omega}{(1+2g_0)\,\mathcal{L}c} = \epsilon f^2, \quad (10)$$

$$\frac{\partial}{\partial \chi} = \frac{-\hbar c^2}{4\pi\, N_a d_a^2 \omega_0\,(1+2g_0)}\left(\frac{\partial}{\partial z} - \epsilon\frac{\partial}{c\partial t}\right). \quad (11)$$

Для диполь-дипольного взаимодействия $g_0 < 0$ и, считая, что $1 + 2g_0 > 0$, полагаем $b = \epsilon f^2$, $f \in \mathbb{R}$. Знак ϵ определяется как хиральностью спирали, так и направлением распространения импульсов поля.

В безразмерных переменных уравнения, описывающие динамику ДУС во внешнем поле вращением вектора Блоха $\mathbf{S} = \{S_1, S_2, S_3\}$, [32] совместно с уравнениями (8), (9) представим в виде

$$\partial_\tau S = iS - iES_3, \quad (12)$$

$$\partial_\tau S_3 = \frac{i}{2}\left(ES^* - E^*S\right), \quad (13)$$

$$\partial_x E = \partial_\tau\left(S - i\epsilon f^2\partial_\tau S\right). \quad (14)$$

Здесь $E = E_x + iE_y$, $S = S_1 + iS_2$, $S_1 = P_x$, $S_2 = P_y$ и S_3 — нормированная разность населенностей уровней энергетического перехода ДУС.

3. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ НУЛЕВОЙ КРИВИЗНЫ

Система (12)–(14) является условием совместности следующих линейных систем:

$$\partial_t\Phi = \mathbf{L}\psi \equiv \frac{\epsilon}{f^2-\zeta^2}\begin{bmatrix} -i & \zeta U \\ -\epsilon\zeta U^* & i \end{bmatrix}\Phi, \quad (15)$$

$$\partial_z\Phi = \mathbf{A}\Phi \equiv \frac{\epsilon}{f^2-\zeta^2+2\epsilon}\begin{bmatrix} i\dfrac{f^2+\zeta^2}{f^2-\zeta^2}S_3 & \zeta\sqrt{c}S - \epsilon\,\delta(\zeta)f^2US_3 \\ -\epsilon\zeta\sqrt{c}S^* + \delta(\zeta)f^2U^*S_3 & -i\dfrac{f^2+\zeta^2}{f^2-\zeta^2}S_3 \end{bmatrix}\Phi, \quad (16)$$

где $U = E/\sqrt{c}$, $c = 1 + \epsilon f^2$ и

$$\delta(\zeta) = \zeta \frac{f^2 - \zeta^2 + 2\epsilon}{f^2 - \zeta^2}. \tag{17}$$

Существует бесконечное количество интегрируемых уравнений, отличающихся калибровочными преобразованиями представления нулевой кривизны. Система (15), (16) подобрана с целью удобства применения метода решения с использованием задачи Римана с нулями [15].

Для анализа аналитических свойств функций Йоста представим компоненты первого столбца функции Φ в виде

$$\phi_1 = \exp\left(-i\lambda\tau + \int\limits_{-\infty}^{\tau} \rho(\zeta, t)\, dt\right), \tag{18}$$

$$\phi_2 = \phi_0 \exp\left(-i\lambda\tau + \int\limits_{-\infty}^{\tau} \rho(\zeta, t)\, dt\right), \tag{19}$$

где $\lambda(\zeta) = \epsilon\left(f^2 - \zeta^2\right)^{-1}$ и ϕ_0 не зависит от ζ. Считаем, что λ лежит в верхней полуплоскости комплексной плоскости. Подставляя (18), (19) в систему (15), получаем

$$\zeta F \partial_\tau \left(\frac{\Gamma}{\zeta U}\right) = \lambda\left(2i\Gamma - \zeta^2|U|^2 - \Gamma^2\right), \tag{20}$$

где $\Gamma = \zeta U \phi_2/\phi_1$. Пусть разложение Γ по степеням $i\lambda$ имеет вид

$$\Gamma = \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_k\, (i\lambda)^{-k}. \tag{21}$$

Подставив (21) в уравнение (20), получаем рекурсию

$$2i\gamma_n - i^k f^2|U|^2\delta_{k0} + \sum_{n=0}^{k} \gamma_{k-n}\gamma_n = \\ = iU\partial_\tau\left(\frac{\gamma_{k-1}}{U}\right). \tag{22}$$

Отсюда находим интегральную плотность

$$\gamma_0 = i\left(1 \pm \sqrt{1 + \epsilon f^2|U|^2}\right). \tag{23}$$

Сравнивая с разложением ρ по степеням $i\lambda$

$$\rho = \sum_{n=1}^{\infty} \rho_k\, (i\lambda)^{-k}, \tag{24}$$

находим из уравнения (20)

$$\rho_n = -i\gamma_{n+1}. \tag{25}$$

Таким образом, асимптотика вектор-функции при $\lambda \to \infty$ ($\zeta \to \pm f$) имеет вид

$$\phi = \left(\begin{array}{c} 1 \\ \dfrac{i\rho_{-1}}{fU} \end{array}\right) e^{-i\lambda u(\tau) + \mathcal{O}(1)} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\lambda}\right), \tag{26}$$

где

$$u = \tau + \int\limits_{-\infty}^{\tau} \left(\sqrt{1 + \epsilon f^2|U|^2}\, dt - 1\right). \tag{27}$$

Из (26), (27) следует, что вместо τ удобно ввести новую переменную u. При этом спектральная проблема (15) принимает вид

$$\frac{\partial\Phi}{\partial u} = \frac{\epsilon}{f^2 - \zeta^2}\left[\begin{array}{cc} -iV_3 & \zeta V \\ -\epsilon\zeta V^* & iV_3 \end{array}\right]\Phi, \tag{28}$$

где $\mathbf{V} = \{V_1, V_2, V_3\}$, $V = V_1 + iV_2$ и

$$V_3 = \frac{1}{\sqrt{1 + \epsilon f^2|U^2|}}, \quad V = \frac{U}{\sqrt{1 + \epsilon f^2|U^2|}}. \tag{29}$$

4. СВОЙСТВА СИММЕТРИИ

Перечислим свойства симметрии линейных систем (16), (28) и соответствующих матричных функций Φ:

I)

$$L^*(\zeta^*) = M(\zeta)L(\zeta)M^{-1}(\zeta), \tag{30}$$

$$A^*(\zeta^*) = M(\zeta)A(\zeta)M^{-1}(\zeta), \tag{31}$$

$$\Phi^*(\zeta^*) = M(\zeta)\Phi(\zeta)M^{-1}(\zeta), \tag{32}$$

$$M(\zeta) = \left(\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{array}\right); \tag{33}$$

II)

$$\sigma_3^{-1} L(-\zeta)\sigma_3 = L(\zeta), \tag{34}$$

$$\sigma_3^{-1} A(-\zeta)\sigma_3 = A(\zeta), \tag{35}$$

$$\sigma_3^{-1} \Phi(-\zeta)\sigma_3 = \Phi(\zeta), \tag{36}$$

σ_i — матрицы Паули;

III)

$$M_H(\zeta)L^\dagger(\zeta^*)M_H^{-1}(\zeta) = -L(\zeta), \tag{37}$$

$$M_H(\zeta)A^\dagger(\zeta^*)M_H^{-1}(\zeta) = -A(\zeta), \tag{38}$$

$$M_H(\zeta) = \left(\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & \epsilon \end{array}\right). \tag{39}$$

Свойства симметрии I определяют вид функции $\Phi(\zeta_j) = \Phi_j$,

$$\Phi_j^{\pm} = \begin{pmatrix} \psi_{j1} & -\epsilon\psi_{j2}^* \\ \psi_{j2} & \psi_{j1}^* \end{pmatrix}. \tag{40}$$

5. МЕТОД РЕШЕНИЯ

Будем строить N-солитонное решение методом решения задачи Римана с нулями [15]. Считаем, что все полюсы простые. Функция Йоста $J_N(\zeta)$ — решение системы (16), (28) — строится «одеванием» исходного решения $J_0(\zeta)$, которое определяется начально-краевыми условиями:

$$J_N(\zeta) = G_N(\zeta) J_0(\zeta), \tag{41}$$

где $G_N(\zeta)$ — мероморфная функция с $2N$ полюсами со свойствами симметрии I и II, см. разд. 4:

$$J_N^*(\zeta^*) = M J_N(\zeta) M^{-1}, \tag{42}$$
$$J_N(-\zeta) = \sigma_3 J_N(\zeta)\sigma_3^{-1}, \tag{43}$$
$$G_N^*(\zeta^*) = M G_N(\zeta) M^{-1}, \tag{44}$$
$$G_N(-\zeta) = \sigma_3 G_N(\zeta)\sigma_3^{-1}. \tag{45}$$

Если ζ_n — простой полюс $G_N(\zeta)$, то из-за симметрии (34), (35) $-\zeta_n$ тоже простой полюс $G_N(\zeta)$, т. е.

$$G_N(\zeta) = C_N H_N(\zeta), \tag{46}$$
$$H_N(\zeta) = I + \sum_{n=1}^{N}\left[\frac{A_n}{\zeta-\zeta_n} + \frac{\tilde{A}_n}{\zeta+\zeta_n}\right]. \tag{47}$$

Здесь C_N — 2×2-матрица, не зависящая от ζ. Матрицы C_N, H_N обладают той же симметрией, что и G_N:

$$C_N = \sigma_3 C_N \sigma_3^{-1}, \quad H_N(-\zeta) = \sigma_3 H_N(\zeta)\sigma_3^{-1}, \tag{48}$$

где

$$\tilde{A}_n = -\sigma_3 A_n \sigma_3^{-1}. \tag{49}$$

Для определения C_N рассмотрим предел $\zeta\to\infty$ в системах (16) и (28):

$$\partial_{\tau,x} C_N H_N(\infty) = \partial_{\tau,x} C_N \to 0. \tag{50}$$

Из (48), (50) следует, что C_N — действительная постоянная диагональная матрица, которая может быть устранена калибровочным преобразованием.

Из (34), (35) и (16), (28) следует, что $J^\dagger(\zeta^*) M_H(\zeta)^{-1} J(\zeta) M_H \zeta)$ — постоянная матрица и, как следует из асимптотики $\zeta\to\infty$, единичная:

$$J_N(\zeta) M_H(\zeta) J^\dagger(\zeta^*) M_H(\zeta)^{-1} = 1. \tag{51}$$

Из условия отсутствия сингулярностей в (51) при $\zeta\to\zeta_k$ находим систему линейных уравнений:

$$A_k M_H \left\{ I + \sum_{n=1}^{N}\left[\frac{A_n^\dagger(\zeta_n^*)}{\zeta_k-\zeta_n^*} - \frac{\tilde{A}_n^\dagger(\zeta_n^*)}{\zeta_k+\zeta_n^*}\right]\right\} M_H^{-1} = 0. \tag{52}$$

Обозначим $x_n = x(\zeta_n), \beta_n = \beta(\zeta_n), \ldots$,etc, $n = 1, 2, \ldots, N$ и представим матрицы A_n в виде

$$A_n = \begin{pmatrix} x_n\beta_n & x_n\alpha_n \\ y_n\beta_n & y_n\alpha_n \end{pmatrix}. \tag{53}$$

Подстановка в (63) дает систему уравнений

$$\beta_k + \frac{2}{\zeta_k^2 - \zeta_n^{*2}} B_{kn} x_n^* = 0, \tag{54}$$
$$\epsilon\alpha_k + \frac{2}{\zeta_k^2 - \zeta_n^{*2}} A_{kn} y_n^* = 0, \tag{55}$$

где

$$B_{kn} = \left(\beta_k\beta_n^*\zeta_n^* + \epsilon\,\alpha_k\zeta_k\alpha_n^*\right), \tag{56}$$
$$A_{kn} = \left(\beta_k\zeta_k\beta_n^* + \epsilon\,\alpha_k\alpha_n^*\zeta_n^*\right). \tag{57}$$

Подставляя решения систем (54), (55), которые можно найти с помощью формул Крамера, в выражение (47), находим матричную функцию

$$H_N = I - \sum_{n=0}^{N}\sum_{k=0}^{N} \frac{\zeta_k^{*2} - \zeta_n^2}{f_0^2 - \zeta_n^2} \times \\ \times \begin{bmatrix} \zeta_n\beta_n (B_{nk}^*)^{-1}\beta_k^* & f_0\alpha_n (B_{nk}^*)^{-1}\beta_k^* \\ \epsilon f_0\beta_n (A_{nk}^*)^{-1}\alpha_k^* & \epsilon\zeta_n\alpha_n (A_{nk}^*)^{-1}\alpha_k^* \end{bmatrix}. \tag{58}$$

Для определения функций α_n, β_n перейдем к пределу $\zeta\to\zeta_n$ в линейных системах (16), (28):

$$\partial_x\left(C_N A_n J_0(\zeta_n)\right) = L C_N A_n J_0(\zeta_n), \tag{59}$$
$$\partial_t\left(C_N A_n J_0(\zeta_n)\right) = A C_N A_n J_0(\zeta_n). \tag{60}$$

Поскольку $\det A_n = 0$, находим, что

$$\{\beta_n, \alpha_n\} J_0(\lambda_n) = \{b_n, a_n\}, \tag{61}$$

где a_n, b_n — произвольные константы, задаваемые начально-краевыми условиями. Без потери общности достаточно найти

$$\rho_n = \frac{\beta_n}{\alpha_n} = \frac{J_{12}^{(0)} - J_{11}^{(0)} r_n}{\epsilon J_{12}^{(0)*} + J_{11}^{(0)*} r_n}, \tag{62}$$

где $r_n = b_n/a_n$ и $J_{ij}^{(0)}$ — элементы матрицы J_0.

Преобразование решения Йоста, относящегося к $N-1$-солитонному решению, в решение G_N, отвечающее N-солитонному решению, удовлетворяет системе уравнений

$$\partial_x G_N = L_N G_N - G_N L_{N-1}, \tag{63}$$

$$\partial_t G_N = A_N G_N - G_N A_{N-1}. \tag{64}$$

Повторяя это преобразование, получаем уравнения, связывающие G_N и G_0. Переходя к пределу $\zeta \to \pm f$ в уравнении (63), находим в итоге связь между N-солитонным ($2N$-полюсным) решением $\mathbf{V}_N$ и исходным решением $\mathbf{V}_0$:

$$(\mathbf{V}_N \cdot \boldsymbol{\sigma}) = C_N H_N(\pm f)\, (\mathbf{V}_0 \cdot \boldsymbol{\sigma})\, H_N^{-1}(\pm f) C_N^{-1}. \tag{65}$$

6. СОЛИТОННЫЕ РЕШЕНИЯ

Для начально-краевых условий $U(0,\tau) = 0$, $S(0,\chi) = 0$ с точностью до сдвигов переменных находим

$$J_0(\zeta, u, \chi) = e^{\sigma_3 \Theta}, \tag{66}$$

где

$$\Theta = \frac{-i\epsilon}{f^2 - \zeta^2}\left[u - \frac{f^2+\zeta^2}{f^2-\zeta^2+2\epsilon}\int\limits_{-\infty}^{\chi} S_3(0,s)\, ds\right]. \tag{67}$$

Найдем решения для $N = 1$. Используя (58), (65), находим для $\epsilon = 1$

$$V_3 = 1 - \frac{16 f^2 \eta^2 \xi^2}{[(f-\xi)^2+\eta^2]\,[(f+\xi)^2+\eta^2]\,[-\eta^2+\xi^2+(\eta^2+\xi^2)\operatorname{ch}(4\theta)]}, \tag{68}$$

$$V = \frac{2 f\xi e^{-2\theta-2i\psi}\left\{\eta e^{4\theta}(\eta - i\xi)\left[f^2+(\eta+i\xi)^2\right] - \eta(\eta+i\xi)\left[f^2+(\eta-i\xi)^2\right]\right\}}{[(f-\xi)^2+\eta^2]\,[(f+\xi)^2+\eta^2]\,[\xi\operatorname{ch}(2\theta z)+i\eta\operatorname{sh}(2\theta)]^2}; \tag{69}$$

и для $\epsilon = 1$

$$V_3 = 1 + \frac{16 f^2 \eta^2 \xi^2}{[(f-\xi)^2+\eta^2]\,[(f+\xi)^2+\eta^2]\,[(\eta^2+\xi^2)\operatorname{ch}(4\theta)+\eta^2-\xi^2]}, \tag{70}$$

$$V = \frac{16 f\eta\xi e^{4\theta-2i\psi}\left[\eta\operatorname{ch}(2\theta)\left(f^2+\eta^2+\xi^2\right) + i\xi\operatorname{sh}(2\theta)\left(-f^2+\eta^2+\xi^2\right)\right]}{[(f-\xi)^2+\eta^2]\,[(f+\xi)^2+\eta^2]\,[e^{4\theta}(\eta-i\xi)+\eta+i\xi]^2}. \tag{71}$$

Здесь $\theta = \operatorname{Im}\Theta$, $\psi = \operatorname{Re}\Theta$.

Зависимость E от τ представлена в неявном виде:

$$U(\tau) = \frac{V(u)}{V_3(u)}, \quad \tau = \tau_0 + \int\limits_{-\infty}^{u} V_3(\chi, u')\, du'. \tag{72}$$

На рис. 2 и 3 показаны формы импульсов для разных значений f.

Для исследования новых механизмов управления импульсами поля в невзаимных системах рассмотрим случай ненулевого пьедестала фонового решения $U_0 \neq 0$, $S(\chi) = 0, S_3(\chi) = \mathrm{const}$. Простейшее решение отвечает вращающейся поляризации поля в волноводе:

$$U_b(z) = U_0 e^{-2i\Theta_0 z/v}. \tag{73}$$

В рамках приближения однонаправленного распространения (7) $U_b(z) = U_b(v\tau)$, где v — фазовая скорость поля в волноводе. Решение линейных систем (16), (28) имеет вид

$$\{\phi_1, \phi_2\} = \left\{1, \sqrt{\epsilon}\right\} e^{\sigma_3(\theta + i\psi)}, \tag{74}$$

где $\theta = \operatorname{Im}\Theta_0$, $\vartheta = -\operatorname{Re}\Theta_0$,

$$\Theta_0 = \frac{\epsilon}{f^2-\zeta^2}\left[\left(G_0 + \sqrt{-\epsilon}\, U_0 \zeta\right) u - {} - S_3\left(\frac{f^2+\zeta^2}{f^2-\zeta^2+2\epsilon} - \sqrt{-\epsilon}\,\zeta U_0\right)\chi\right], \tag{75}$$

$U_0 = E_0/\sqrt{c}$.

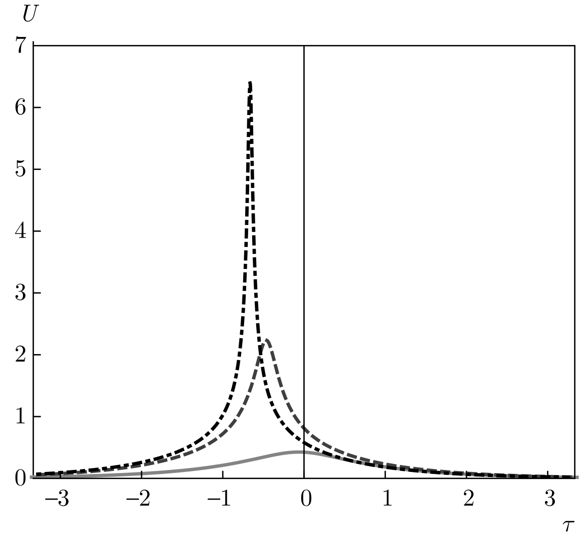


Рис. 2. Форма солитонов для $\epsilon = 1$, $\eta = 1$, $\xi = 1$ и нулевого пьедестала в безразмерных переменных. Значения $f = 0.2$, 0.55, 0.666 отвечают сплошной (красной), штриховой (синей) и штрихпунктирной (черной) линиям соответственно

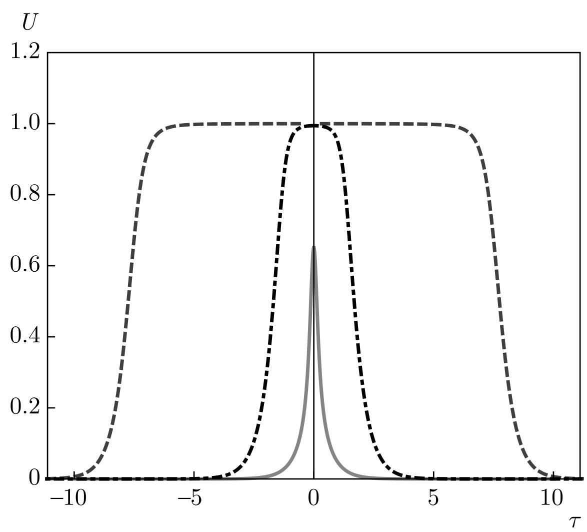


Рис. 3. Форма солитонов для $\epsilon = -1$, $\eta = 0.2$, $\xi = 1.5$ и нулевого пьедестала в безразмерных переменных. Значения $f = 0.2$, 0.666, 1 отвечают сплошной (красной), штриховой (синей) и штрихпунктирной (черной) линиям соответственно

Решение для $V_3 = Y_-/Z_1$, $V = X_-/Z_2$, $F = U_0 f$, $G_- = \sqrt{1+f^2U_0^2}$ и $\epsilon = -1$ имеет вид

$$\begin{aligned}
Y_- = 2e^{4\theta}\Big\{&8fF\eta\xi\left[\xi\sin(4\psi)\left(\eta^2+\xi^2-f^2\right)\operatorname{sh}(2\theta)\right. - \\
&- \left.\eta\cos(4\psi)\left(f^2+\eta^2+\xi^2\right)\operatorname{ch}(2\theta)\right] + \\
&+ G_-\Big[f^4(\eta-\xi)(\eta+\xi)+2f^2\left(\eta^4+6\eta^2\xi^2+\xi^4\right) + \\
&+ (\eta-\xi)(\eta+\xi)\left(\eta^2+\xi^2\right)^2\Big] + G_-\left(\eta^2+\xi^2\right)\times \\
&\times\Big[f^4+2f^2(\eta-\xi)(\eta+\xi)+\left(\eta^2+\xi^2\right)^2\Big]\operatorname{ch}(4\theta)\Big\}, \qquad (76)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z_1 = &\left((f-\xi)^2+\eta^2\right)\left((f+\xi)^2+\eta^2\right)\times \\
&\times\Big[\eta^2\left(e^{4\theta}+1\right)^2+\xi^2\left(e^{4\theta}-1\right)^2\Big]; \qquad (77)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
X_- = -e^{-2i\psi}\big\{&8f^2F\eta^2\xi^2e^{-4i\psi} + \\
&+ 4i\eta\xi\left(-f^2+\eta^2+\xi^2\right)\operatorname{sh}(2\theta)\times \\
&\times\left[-2fG_-\xi+Fe^{4i\psi}\left(f^2+\eta^2+\xi^2\right)\operatorname{ch}(2\theta)\right] + \\
&+ Fe^{4i\psi}\left[f^2(\eta+\xi)+(\eta-\xi)\left(\eta^2+\xi^2\right)\right]\times \\
&\times\left[f^2(\eta-\xi)+(\eta+\xi)\left(\eta^2+\xi^2\right)\right]\operatorname{ch}(4\theta) - \\
&- 8f\eta^2G_-\xi\left(f^2+\eta^2+\xi^2\right)\operatorname{ch}(2\theta) + \\
&+ Fe^{4i\psi}\left(\eta^2+\xi^2\right)\left((f-\xi)^2+\eta^2\right)\left((f+\xi)^2+\eta^2\right)\big\}, \qquad (78)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z_2 = 2&\Big[f^4+2f^2(\eta-\xi)(\eta+\xi)+\left(\eta^2+\xi^2\right)^2\Big]\times \\
&\times\left(\eta\operatorname{ch}(2\theta)-i\xi\operatorname{sh}(2\theta)\right)^2. \qquad (79)
\end{aligned}$$

Решение для $V_3 = X_+/Z_3$, $V = Y_+/Z_4$, $G_+ = \sqrt{1-f^2U_0^2}$, $\epsilon = 1$ записывается как

$$\begin{aligned}
Y_+ = G&\Big[f^4\left(\xi^2-\eta^2\right)-2f^2\left(\eta^4+6\eta^2\xi^2+\xi^4\right) - \\
&- \left(\eta^2-\xi^2\right)\left(\eta^2+\xi^2\right)^2\Big]+G\left(\eta^2+\xi^2\right)\operatorname{ch}(4\theta)\times \\
&\times\left((f-\xi)^2+\eta^2\right)\left((f+\xi)^2+\eta^2\right) + \\
&+ 8f\eta H\xi\left[\eta\operatorname{sh}(2\theta)\cos(4\psi)\left(f^2+\eta^2+\xi^2\right)\right. - \\
&- \left.\xi\operatorname{ch}(2\theta)\sin(4\psi)\left(-f^2+\eta^2+\xi^2\right)\right], \qquad (80)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Z_3 = 2&\Big[f^4+2f^2(\eta-\xi)(\eta+\xi)+\left(\eta^2+\xi^2\right)^2\Big]\times \\
&\times\left[\eta^2\operatorname{sh}^2(2\theta)+\xi^2\operatorname{ch}^2(2\theta)\right], \qquad (81)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
X_+ = e^{-2i\psi}\Big\{&-H\xi^2e^{4i\psi}\operatorname{ch}^2(2\theta)\left(f^4+\left(\eta^2+\xi^2\right)^2\right) - \\
&- 4f^2\eta^2H\xi^2e^{-4i\psi}-4f\eta^2G\xi\operatorname{sh}(2\theta)\left(f^2+\eta^2+\xi^2\right) - \\
&- 2i\eta\xi\operatorname{ch}(2\theta)\Big[2fG\xi\left(-f^2+\eta^2+\xi^2\right) + \\
&+ He^{4i\psi}\operatorname{sh}(2\theta)\left(f^4-\left(\eta^2+\xi^2\right)^2\right)\Big] + \\
&+ He^{4i\psi}\Big[\eta^2\operatorname{sh}^2(2\theta)\left(f^4+\left(\eta^2+\xi^2\right)^2\right) + \\
&+ f^2\left(-\eta^4+\xi^4+\left(\eta^2+\xi^2\right)^2\operatorname{ch}(4\theta z)\right)\Big]\Big\}, \qquad (82)
\end{aligned}$$

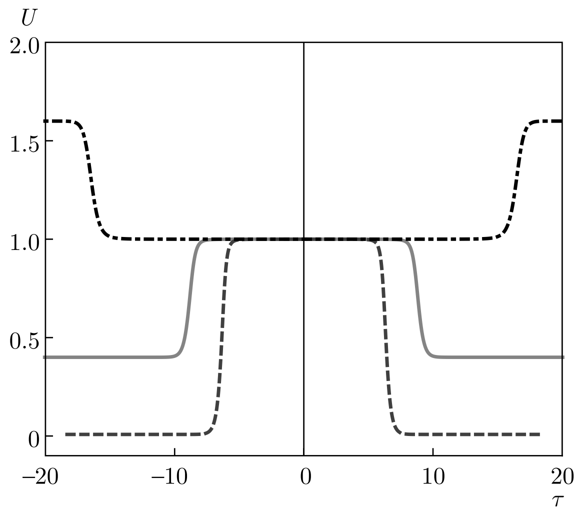


Рис. 4. Форма солитонов для $\epsilon = -1$, $\eta = 0.2$, $\xi = 1.5$, $f = 1.5$ и ненулевого пьедестала в безразмерных переменных. Графики для $U_0 f = 0.5$, 0, 2 показаны сплошной (красной), штриховой (синей) и штрихпунктирной (черной) линиями соответственно

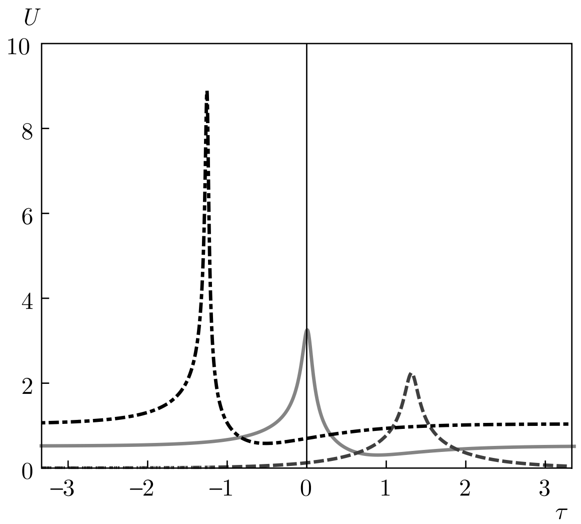


Рис. 5. Форма солитонов для $\epsilon = 1$, $\eta = 1$, $\xi = 1$, $f = 0.55$ и ненулевого пьедестала в безразмерных переменных. Графики для $U_0 f = 0.5$, 0, 1 показаны сплошной (красной), штриховой (синей) и штрихпунктирной (черной) линиями соответственно

$$Z_4 = f^4 + 2f^2(\eta^2 - \xi^2) + \left(\eta^2 + \xi^2\right)^2. \qquad (83)$$

Формы солитонов для различных значений амплитуды поля фона U_0 показаны на рис. 4 и 5. Обнаружено, что в случае $\epsilon = 1$ увеличение $|U_0|$ приводит к значительному росту амплитуды импульса. В случае $\epsilon = -1$ рост $|U_0|$ приводит к увеличению ширины как светлого, так и темного импульсов.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Интегрируемая система уравнений (12)–(14), описывающая невзаимное распространение электромагнитных импульсов в нелинейной среде, выведена с использованием приближения однонаправленного распространения. Это приближение позволяет использовать РУМБ для моделирования процессов, происходящих на расстояниях порядка длины волны. Пространственная анизотропия в исследуемой системе — следствие спирального положения ДУС вокруг волновода. Эффект невзаимного распространения возникает из-за локальной анизотропии и взаимодействия импульса поля с наведенной поляризацией ДУС. При выводе уравнений для сохранения полной интегрируемости члены дисперсии второго порядка в правых частях уравнений (5) ($\propto \partial_z^2 \mathbf{P}_\perp$) были отброшены. Эти члены возникают из-за ДДВ в приближении сильной связи. Ими можно пренебречь при условии, что $\partial_z \ll 2\mathcal{T}_h$ или $2\lambda_{light} \gg \mathcal{L}$, где λ_{light} — длина волны света, соответствующая энергии перехода ДУС. Последнее неравенство означает, что количество спиральных колец, расположенных на расстоянии длины волны, больше единицы. Таким образом, интегрируемая система РУМБ может быть использована для анализа экситонных возбуждений в спиральных молекулах. Эффекты, связанные с хиральностью длинных молекулярных систем, состоящих из молекул белка или ДНК, изучены недостаточно полно. В то же время их роль важна при описании спинтроники и близких явлений. Сложные молекулярные среды, такие как J-агрегаты красителей, могут образовывать длинные пучки из нитей, закрученных в виде спирали вокруг оси [28]. Приближения двухуровневых сред нередко используются для описания возбуждений в агрегатах на масштабах порядка длины волны. Эволюция экситонных импульсов в такой среде может также быть описана в рамках близкой модели.

Как показано в настоящей работе, хиральность среды может критическим образом влиять на форму и динамику импульсов поля. Анализ полученных решений показал, что формой ипульсов можно управлять, создавая фоновое поле U_0, т. е. основание, на фоне которого импульсы распространяются. Решения идеализированной модели хиральной нелинейной среды, изученные в настоящей работе, демонстрируют дополнительные возможности управления импульсами, которые дают искривленные и хиральные среды вместо прямолинейных.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке базового бюджета Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

ЛИТЕРАТУРА

1. B. E. A. Saleh and M. C. Teich, *Fundamentals of Photonics*, Wiley-Interscience (2007).

2. V. N. Konotop, J. Yang, and D. A. Zezyulin, Rev. Mod. Phys. **88**, 035002 (2016), https://doi.org/10.1103/RevModPhys.88.035002.

3. C. Caloz, A. Alú, S. Tretyakov, D. Sounas, K. Achouri, and Z.-L. Deck-Léger, Phys. Rev. Appl. **10**, 047001 (2018), DOI:https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.10.047001.

4. M. Scalora, J. P. Dowling, C. M. Bowden, and M. J. Bloemer, J. Appl. Phys. **76**, 2023 (1994), DOI: 10.1103/PhysRevLett.73.1368.

5. M. D. Tocci, M. J. Bloemer, M. Scalora, J. P. Dowling, and C. M. Bowden, Appl. Phys. Lett. **66**, 2324 (1995), https://doi.org/10.1063/1.113970.

6. V. A. Fedotov, P. L. Mladyonov, S. L. Prosvirnin, A.V. Rogacheva, Y. Chen, and N. I. Zheludev, Phys. Rev. Lett. **97**, 167401–4 (2006), DOI:https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.167401V.

7. I. V. Shadrivov, V. A. Fedotov, D. Powell, Y. S. Kivshar, and N. I. Zheludev, New J. Phys. **13**, 033025 (2011), DOI:10.1088/1367-2630/13/3/033025.

8. C. Menzel, C. Helgert, C. Rockstuhl, E.-B. Kley, A. Tunnermann, T. Pertsch, and F. Lederer, Phys. Rev. Lett. **104**, 253902–4 (2010), DOI:https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.253902.

9. K. Gallo, G. Assanto, K. R. Parameswaran, and M. M. Fejer, Appl. Phys. Lett. **79**, 314 (2001), https://doi.org/10.1063/1.1386407.

10. M. W. Feise, I. V. Shadrivov, and Y. S. Kivshar, Phys. Rev. E **71**, 037602 (2005), https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.193903.

11. F. Biancalana, J. Appl. Phys. **104**, 093113 (2008), https://doi.org/10.1063/1.3010299.

12. M. Krause, H. Renner, and E. Brinkmeyer, Electron. Lett. **44**, 691 (2008), DOI: 10.1049/el:20080791.

13. V. Grigoriev and F. Biancalana, Opt. Lett. **36**, 2131 (2011), https://doi.org/10.1364/OL.36.002131.

14. C. G. Poulton, R. Pant, A. Byrnes, S. Fan, M. J. Steel, and B. J. Eggleton, Opt. Express **20**, 21235 (2012), https://doi.org/10.1364/OE.20.021235.

15. S. P. Novikov, S. V. Manakov, L. P. Pitaevskii, and V. E. Zakharov, *Theory of Solitons*: *The Inverse Scattering Method*, Springer-Verlag, Berlin (1984).

16. A. I. Maimistov and A. M. Basharov, *Nonlinear Optical Waves*, Kluwer Acad. Publ., Dordrecht (1999), DOI:10.1007/978-94-017-2448-7.

17. A. A. Zabolotskii, Eur. Phys. J. Special Topics **173**, 193 (2009), https://doi.org/10.1140/epjst/e2009-01074-x.

18. G. L. Lamb, Jr., Rev. Mod. Phys. **43**, 99 (1971), DOI: https://doi.org/10.1103/RevModPhys.43.99.

19. A. A. Zabolotskii, Phys. Rev. A **80**, 063616 (2009), DOI:https://doi.org/10.1103/PhysRevA.80.063616.

20. А. А. Заболотский, Письма в ЖЭТФ **110**, 303 (2019).

21. J. M. Hyman, D. W. McLaughlin, and A. C. Scott, Physica D, Nonlin. Phenom. **3**, 23 (1981), https://doi.org/10.1016/0167-2789(81)90117-2.

22. M. C. Benedict, V. A. Malyshev, E. D. Trifonov, and A. I. Zaitsev, Phys. Rev. A **43**, 3845 (1991).

23. C. M. Bowden and J. P. Dowling, Phys. Rev. A **47**, 1247 (1993), DOI: 10.1103/physreva.47.1247.

24. Yu. B. Gaididei, K. Ø. Rasmussen, and P. L. Christiansen, Phys. Rev. E **52**, 2951 (1995), DOI:https://doi.org/10.1103/PhysRevE.52.2951.

25. А. А. Заболотский, ЖЭТФ **154**, 526 (2018), DOI: 10.1134/S1063776118090121.

26. S. V. Sazonov and N. V. Ustinov, Phys. Scripta **94**, 115206 (2019).

27. F. Wurthner, T. E. Kaiser, and Ch. R. Saha-Muller, Angew. Chem. Int. Ed. **50**, 3376 (2011), DOI: 10.1002/anie.201002307.

28. A. V. Sorokin, A. A. Zabolotskii, N. V. Pereverzev, S. L. Yefimova, Y. V. Malyukin, and A. I. Plekhanov, J. Phys. Chem. C **118**, 7599 (2014), dx.doi.org/10.1021/jp412798u.

29. A. V. Sorokin, A. A. Zabolotskii, N. V. Pereverzev, I. I. Bespalova S. L. Yefimova, Y. V. Malyukin, and A. I. Plekhanov, J. Phys. Chem. C **119**, 2743 (2015), DOI: 10.1021/jp5102626.

30. S. Sternberg, *Curvature in Mathematics and Physics*, Dover Publ., Mineola, New York (2012).

31. J. K. Eilbeck, J. Phys. A: Math. Gen. **5**, 1355 (1972), DOI: https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/5/9/008.

32. L. Allen and J. H. Eberly, *Optical Resonanses and Two-Level Atoms*, Wiley and Sons, New York (1975).

ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 3, стр. 434–447

О ПРОСТОМ ЭВРИСТИЧЕСКОМ ВЫВОДЕ ФОРМУЛЫ ШЕННОНА ДЛЯ КАНАЛА СВЯЗИ С НЕПРЕРЫВНЫМИ ПЕРЕМЕННЫМИ В КВАНТОВОМ СЛУЧАЕ

И. М. Арбеков [a], ***С. Н. Молотков*** [a,b,c*], ***И. В. Синильщиков*** [c]

[a] *Академия криптографии Российской Федерации*
121552, Москва, Россия

[b] *Институт физики твердого тела Российской академии наук*
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

[c] *Центр квантовых технологий, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова*
119899, Москва, Россия

Поступила в редакцию 22 декабря 2020 г.,
после переработки 22 декабря 2020 г.
Принята к публикации 23 декабря 2020 г.

Цель статьи — вывод на простом эвристическом и понятном на физическом интуитивном уровне формул пропускных способностей для классически-квантового канала связи с гауссовским шумом, которые являются аналогами классических пропускных способностей и которые возникают во многих задачах квантовой теории информации. Классическая пропускная способность классического канала связи с ограниченной частотной полосой и гауссовскими информационными состояниями при стремлении шума к нулю имеет расходимость. При последовательном квантовом рассмотрении расходимость устраняется, что является следствием фундаментального физического принципа тождественности частиц — бозонов в информационных состояниях.

DOI: 10.31857/S0044451021030056

1. ВВЕДЕНИЕ

Определение условий для безошибочной передачи информации при помощи классических сигналов через канал с шумом является фундаментальным результатом теории информации Шеннона [1–3]. В квантовой области существует также значительное количество разнообразных задач, связанных с передачей и обработкой информации [4–6]. Одной из таких задач является передача классической информации при помощи квантовых состояний. Верхняя граница безошибочной передачи классической информации при помощи квантовых состояний в асимптотическом пределе длинных последовательностей дается фундаментальной величиной (информацией) Холево [4–6]. Квантовая теория информации является достаточно обширной и разработанной теорией, которая использует специфический для данной области математический аппарат, для понимания и освоения которого требуется определенное время и усилия. В классической теории информации для многих результатов имеется качественная интерпретация, тогда как в квантовой области часть фундаментальных понятий и результатов не может быть в принципе интерпретирована в классических терминах. К ним можно отнести понятие запутанности и результаты, связанные с передачей информации при помощи запутанных состояний, поскольку само явление запутанности отсутствует в классической области. Тем не менее, при исследовании некоторых понятий, таких как пропускная способность классически-квантового канала связи или скорость безошибочной передачи классической информации при помощи квантовых состояний, можно провести аналогию с соответствующими классическими величинами, несмотря на то, что полное сведение к классическому случаю невозможно. Для осмысленной постановки и проведения экспериментальных исследований часто необходима простая и интуитивно понятная на физическом

* E-mail: sergei.molotkov@gmail.com

уровне интерпретация используемых теоретико-информационных конструкций, не перегруженная математическим аппаратом. Цель данной заметки — дать простой эвристический вывод квантового аналога формулы Шеннона для пропускной способности классического канала с непрерывной переменной. При выводе используются привычная в физике интерпретация вероятности как предела частоты событий при большом числе испытаний (измерений), а также стандартная борновская интерпретация матрицы плотности как ансамбля квантовых состояний. Речь пойдет о пропускной способности канала связи в единицу времени (бит/с) с непрерывными сигналами, имеющими конечную частотную полосу Ω (Гц) и наблюдаемыми на фоне белого гауссовского шума [1–3]:

$$C = \frac{1}{2}\Omega\log\left(1+\frac{S}{N_0\Omega}\right), \tag{1}$$

где

$$\frac{1}{T}\int\limits_{-T/2}^{T/2} x^2(t)\,dt$$

— ограничение на мощность (дисперсию) случайного сигнала $x(t)$, $N_0\Omega$ — мощность (дисперсия) белого шума в полосе $[0,\Omega]^{1)}$, $\log\equiv\log_2$.

Неформальный смысл (1) состоит в определении верхней границы числа битов информации в единицу времени, которые можно передать безошибочно при помощи сигналов с ограниченной полосой Ω и мощностью S через канал связи с гауссовским белым шумом, имеющим постоянную одностороннюю (для положительных частот) спектральную плотность N_0. Отношение сигнал/шум $S/N_0\Omega$ в том или ином контексте возникает во многих физических ситуациях. Для самодостаточности и связности изложения, а также для того, чтобы проследить аналогии с классическим случаем, приведем эвристический вывод формулы для пропускных способностей дискретного классического канала без памяти, а также непрерывного классического канала с гауссовским белым шумом. Этот вывод потребуется для получения формулы в квантовом случае. В определенном смысле вывод формулы для пропускной способности в квантовом случае может быть основан на выводе формулы для пропускной способности дискретного канала связи в классическом случае.

2. КЛАССИЧЕСКИЙ ДИСКРЕТНЫЙ КАНАЛ СВЯЗИ

Каждому физическому сигналу, передаваемому через канал связи, сопоставляется символ алфавита $x_i \in X = \{x_i\}_{i=1}^N$. При передаче информации каждый символ (сигнал) посылается в канал с вероятностью $P_X(x_i)$. Канал используется n раз, каждая посылка независима от предыдущих. На приемной стороне принимаются искаженные состояния — один из символов алфавита $y_i \in Y = \{y_i\}_{i=1}^N$. Размерности N и сами алфавиты (множества) на приемной и передающей сторонах не обязательно совпадают. Размерности считаем одинаковыми, чтобы не загромождать выкладки несущественными деталями.

Физические свойства канала с искажениями (шумом) формализуются заданием переходных вероятностей $P_{Y|X}(y|x)$ — послан символ x, принят символ y. Совместное распределение символов на входе и выходе канала,

$$P_{XY}(x,y) = P_X(x)P_{Y|X}(y|x) = \\ = P_Y(y)P_{X|Y}(x|y), \tag{2}$$

— это вероятность обнаружить пару (x,y), если одновременно имеется доступ ко входу и выходу.

Вероятность получить последовательность $Y_n = (y_{i_1},\dots,y_{i_n})$ при условии переданной последовательности (сообщения) $X_n = (x_{i_1},\dots,x_{i_n})$ равна

$$P(Y_n|X_n) = \prod_{j=1}^{n} P_{Y|X}(y_{i_j}|x_{i_j}). \tag{3}$$

Тем самым задается стационарный дискретный канал связи с искажениями (шумом) без памяти. Заметим, что вероятность сообщения $P(X_n)$ на передающей стороне, в соответствии с независимым выбором символов, имеет вид

$$P(X_n) = \prod_{j=1}^{n} P_X(x_{i_j}) = \\ = (P_X(x_1))^{n(x_1)}\dots(P_X(x_n))^{n(x_n)}, \tag{4}$$

где $(n(x_1),\dots,n(x_n))$ — частота появления символов в сообщении X_n, $0\le n(x_1)\le n,\dots,0\le n(x_n)\le n$ и $n(x_1)+\dots+n(x_n)=n$.

В асимптотическом пределе длинных последовательностей, при $n\to\infty$, частоты $n(x_i)$ появления

---

1) Отметим, что для ширины частотной полосы ω используется условие $|\omega|\le W$. Поскольку для физической устойчивой системы отрицательные частоты невозможны, используем для ширины полосы $0\le\omega\le\Omega$ (положение интервала на оси частот несущественно), поэтому ширина полосы в наших обозначения вдвое больше по сравнению, например, с шириной полосы в [3].

символов стремятся к своим математическим ожиданиям: $n(x_i) \approx nP_X(x_i)$.

Тогда можно сказать, что при больших n практически все последовательности (сообщения) имеют одинаковую вероятность:

$$P(X_n) = \prod_{j=1}^{n} P_X(x_{i_j}) = \\ = (P_X(x_1))^{nP_X(x_1)} \ldots (P_X(x_n))^{nP_X(x_n)} = \\ = 2^{-nH(X)}, \quad (5)$$

$$H(X) = -\sum_{i=1}^{N} P_X(x_i) \log(P_X(x_i)). \quad (6)$$

Число таких типичных последовательностей [2] равно $2^{nH(X)}$, $H(X)$ — энтропия Шеннона.

Аналогичным образом на приемной стороне вероятность типичной последовательности равна $P(Y_n) = 2^{-nH(Y)}$, их число равно

$$2^{nH(Y)}, \quad H(Y) = -\sum_{i=1}^{N} P_Y(y_i) \log(P_Y(y_i)). \quad (7)$$

Неформально (5) и (7) означают, что при использовании источника n раз на передающей и принимающей сторонах с вероятностью практически единица возникнет одна из типичных последовательностей (5).

Энтропии Шеннона $H(X)$, $H(Y)$ имеют смысл числа битов — бинарных разрядов, минимально необходимых для записи типичных последовательностей (5), (7).

Для анализа процесса передачи информации требуется знать, как каждая последовательность на передающей стороне переходит в последовательность на приемной стороне.

Пусть задана типичная последовательность $X_n = (x_{i_1}, \ldots, x_{i_n})$, где частоты появления символов равны

$$n(x_1) = nP_X(x_1), \ldots, n(x_n) = nP_X(x_n).$$

Там, где был символ, скажем, x_1, появление на выходе символов y_k $(k = 1, \ldots, N)$ происходит в соответствии с условными вероятностями

$$P_{Y|X}(y_1|x_1), P_{Y|X}(y_2|x_1), \ldots, P_{Y|X}(y_N|x_1). \quad (8)$$

Число входных символов x_1 (длина последовательности из символов x_1) равно $nP_X(x_1)$. Тогда при $nP_X(x_1) \to \infty$, в соответствии со сказанным выше, вероятность любой части выходной последовательности, порождаемой частью входной типичной последовательности, состоящей только из x_1, равна

$$(P_{Y|X}(y_1|x_1))^{nP_X(x_1)P_{Y|X}(y_1|x_1)} \ldots \\ \ldots (P_{Y|X}(y_N|x_1))^{nP_X(x_1)P_{Y|X}(y_N|x_1)} = \\ = \prod_{i=1}^{N} (P_{Y|X}(y_i|x_1))^{nP_X(x_1)P_{Y|X}(y_i|x_1)} = \\ = 2^{-P_X(x_1)H(Y|x_1)}, \quad (9)$$

где

$$H(Y|x_1) = -\sum_{i=1}^{N} P_{Y|X}(y_i|x_1) \log(P_{Y|X}(y_i|x_1))$$

— условная энтропия выхода при условии входа x_1.

Собирая все входные символы вместе, получаем, что любая последовательность на выходе, порождаемая отдельной типичной последовательностью на входе, имеет вероятность

$$\prod_{k=1}^{N} \prod_{i=1}^{N} (P_{Y|X}(y_i|x_k))^{nP_X(x_k)P_{Y|X}(y_i|x_k)} = \\ = 2^{-nH(Y|X)}, \quad (10)$$

где

$$H(Y|X) = \sum_{k=1}^{N} P_X(x_k) H(Y|x_k) = -\sum_{k=1}^{N} P_X(x_k) \times \\ \times \sum_{i=1}^{N} P_{Y|X}(y_i|x_k) \log(P_{Y|X}(y_i|x_k) \quad (11)$$

— средняя условная энтропия выхода.

Таким образом, каждая типичная последовательность на передающей стороне порождает множество последовательностей мощности $2^{nH(Y|X)}$.

Для того чтобы группы порождаемых последовательностей на выходе канала связи не перекрывались и, следовательно, не возникало ошибки на приемной стороне, передаваемых последовательностей должно быть не более

$$\frac{2^{nH(Y)}}{2^{nH(Y|X)}} = 2^{nI(X,Y)}, \\ I(X,Y) = H(Y) - H(Y|X) = H(X) - H(X|Y), \quad (12)$$

$I(X,Y)$ — взаимная информация между входом и выходом канала.

Переходные вероятности задаются физическими свойствами канала, поэтому единственной переменной величиной является распределение вероятностей $P_X(x)$ на входе канала связи и, следовательно, максимального значения взаимной информации $I(X,Y)$ можно добиться выбором распределения $P_X(x)$.

Тогда пропускная способность канала связи равна

$$C = \max_{P_X(x)} I(X,Y) \tag{13}$$

и имеет смысл числа битов информации на одну посылку, которые можно безошибочно передать через канал связи с шумом.

Таким образом, чтобы различить каждую передаваемую последовательность, их должно быть не более 2^{nC}.

Более точно, утверждение о кодировании в канале с шумом [1–3] говорит о существовании набора последовательностей размером $2^{n(C-\varepsilon)}$, ошибка различения которых при любом сколь угодно малом $\varepsilon > 0$ стремится к нулю. Соответственно число битов информации в пересчете на одну посылку, которое безошибочно можно передать через канал связи с шумом, не превосходит C. Данное утверждение есть теорема существования, поскольку не дает алгоритмически эффективного построения набора последовательностей — кодовых слов на передающей стороне, которые можно безошибочно различить на приемной стороне.

3. КЛАССИЧЕСКИЕ КАНАЛЫ С НЕПРЕРЫВНЫМИ ПЕРЕМЕННЫМИ

Дальнейшая цель — вывести формулы для пропускной способности канала с непрерывными переменными сначала в классическом случае, а затем и в квантовом, используя интуитивно понятные на физическом уровне результаты для дискретного классического канала связи.

Пусть имеется один классический канал с непрерывной случайной величиной (сигналом) x — сигналом на входе канала — с плотностью распределения вероятностей $f_X(x)$, а также с ограничением на второй момент

$$\mathbf{E}x^2 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 f_X(x)\,dx \le S \tag{14}$$

и дифференциальной энтропией

$$H_d(X) = \int_{-\infty}^{\infty} f_X(x)\log(f_X(x))\,dx. \tag{15}$$

Шум в канале представим в виде гауссовской случайной величины z, независимой от x, с нулевым средним и дисперсией σ^2_{noise}, плотностью вероятности

$$\varphi(z,\sigma^2_{noise}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2_{noise}}}\exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma^2_{noise}}\right), \tag{16}$$

и дифференциальной энтропией

$$H_d(Z) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(z,\sigma^2_{noise})\log(\varphi(z,\sigma^2_{noise}))\,dz = \\ = \frac{1}{2}\log(2\pi e\sigma^2_{noise}). \tag{17}$$

Отметим, что дифференциальная энтропия $H_d(Z)$ гауссовского распределения определяется только его дисперсией и не зависит от математического ожидания (сдвига) — «центра» распределения вероятностей.

Наблюдения на выходе канала связи — это сумма сигнала и шума $y = x + z$ с плотностью распределения вероятностей $f_Y(y)$ и дифференциальной энтропией

$$H_d(Y) = -\int_{-\infty}^{\infty} f_Y(y)\log(f_Y(y))\,dy. \tag{18}$$

Для использования результатов предыдущего раздела представим алфавит на входе и выходе канала связи как разбиение числовой прямой на совпадающие интервалы Δx_i, Δy_i одинаковой малой длины Δ.

Соответствующие вероятности $P_X(x_i)$, $P_Y(y_i)$ определим как

$$\begin{aligned} P_X(x_i) &= f_X(x_i)\cdot\Delta, \quad x_i \in (x_i, x_i+\Delta), \\ P_Y(y_i) &= f_Y(y_i)\cdot\Delta, \quad y_i \in (y_i, y_i+\Delta). \end{aligned} \tag{19}$$

После такого разбиения канал с непрерывным алфавитом на входе и выходе превращается в дискретный канал с распределением вероятности символов на входе и на выходе (19). После дискретизации можно напрямую воспользоваться результатами разд. 2 для дискретного канала связи.

Забегая вперед, отметим, что, как будет видно ниже, «мелкость» дискретизации не входит в ответ — формально сокращается, однако это не снимает вопроса о нижней границе дискретизации сигнала. В классическом случае нет ограничений на нижнюю границу дискретизации, что в итоге приводит к расходимости пропускной способности канала в классическом случае в пределе нулевого шума в канале. Этот вопрос последовательно разрешается только в квантовом случае (см. ниже).

Заметим, что при любом фиксированном x наблюдение $y = x + z$ имеет гауссовское распределение с дисперсией σ^2_{noise}. Тогда с учетом (19) и свойства независимости энтропии гауссовского распределения от сдвига, при малых Δ можно проследить цепочку приближенных равенств:

$$I(X,Y) = H(Y) - H(Y|X) = \\ = -\sum_{i=1}^{N} P_Y(y_i)\log(P_Y(y_i)) - \left(-\sum_{k=1}^{N} P_X(x_k) \times \right. \\ \left. \times \sum_{i=1}^{N} P_{Y|X}(y_i|x_k)\log(P_{Y|X}(y_i|x_k))\right) \approx \\ \approx \left(-\int_{-\infty}^{\infty} f_Y(y)\log(f_Y(y))\,dy - \log(\Delta)\right) - \\ - \left(\int_{-\infty}^{\infty} f_X(x)\left(-\int_{-\infty}^{\infty} f_{Y|X}(y|x)\log(f_{Y|X}(y|x))\,dy\right) dx - \right. \\ \left. - \log(\Delta)\right) = H_d(Y) - \frac{1}{2}\log(2\pi e\sigma^2_{noise}). \quad (20)$$

Пропускная способность представляется как

$$C = \max_{f_X(x)}\left(H_d(Y) - \frac{1}{2}\log(2\pi e\sigma^2_{noise})\right). \quad (21)$$

Ограничение (14), (16) на сигнал x дает ограничение на y вида

$$\mathbf{E}y^2 = \mathbf{E}(x+z)^2 \le S + \sigma^2_{noise}. \quad (22)$$

Максимум дифференциальной энтропии при ограничении (22) достигается на гауссовском распределении с дисперсией $\sigma^2 = S + \sigma^2_{noise}$ [1–3], поэтому

$$\max_{f_X(x)} H_d(Y) = \frac{1}{2}\log(2\pi e(S + \sigma^2_{noise})) \quad (23)$$

и, следовательно,

$$C = \frac{1}{2}\log(2\pi e(S+\sigma^2_{noise})) - \frac{1}{2}\log(2\pi e\sigma^2_{noise}) = \\ = \frac{1}{2}\log\left(1 + \frac{S}{\sigma^2_{noise}}\right). \quad (24)$$

При наличии L независимых каналов с ограничениями на входе $S_1, \ldots, S_L$ и дисперсиями шума $\sigma^2_{noise,1} \ldots \sigma^2_{noise,L}$ пропускная способность представляет собой сумму [1–3]:

$$C_L = \frac{1}{2}\sum_{m=1}^{L}\log\left(1 + \frac{S_m}{\sigma^2_{noise,m}}\right). \quad (25)$$

В частном случае нескольких независимых каналов с одинаковыми дисперсиями шума σ^2_{noise} и общим ограничением

$$\mathbf{E}x_2^1 + \ldots + \mathbf{E}x_L^2 \le S \quad (26)$$

пропускная способность достигается на «равномощных» входах и выходах:

$$C_L = \frac{L}{2}\log\left(1 + \frac{S}{\sigma^2_{noise}L}\right). \quad (27)$$

Как видно из (27), при стремлении шума к нулю, $\sigma^2_{noise} \to 0$, пропускная способность — скорость передачи информации стремится к бесконечности, это означает, что через канал без шума можно передать сколь угодно много информации в единицу времени, причем энергия сигнала ограничена (26), что является физическим абсурдом. Данный факт в скрытом виде есть следствие отсутствия нижней границы Δ — дискретизации сигнала в классической области.

4. КЛАССИЧЕСКИЕ НЕПРЕРЫВНЫЕ КАНАЛЫ

Следующий шаг, который нам потребуется, прежде чем перейти к рассмотрению классически-квантового канала с ограниченной частотной полосой и гауссовским шумом, — рассмотреть классический канал с ограниченной частотной полосой и гауссовским шумом. Эти результаты будут использованы ниже.

Рассмотрим каналы, в которых сигналы на входе $x(t)$ и выходе $y(t)$ являются случайными процессами или случайными функциями времени.

Мы дадим простой интуитивно понятный вывод формулы для пропускной способности (в единицу времени) канала связи. Пусть вход — приготовление сигнала на передающей стороне — имеет вид

$$y(t) = x(t) + n(t), \quad (28)$$

сигнал $x(t)$ задан (приготавливается) на интервале времени $[-T/2, T/2]$, имеет ограниченную частотную полосу Ω и наблюдается (измеряется на приемной стороне) на фоне белого гауссовского шума $n(t)$ с постоянной спектральной плотностью $N_0/2$.

Формула (28) имеет асимптотический характер при $\Omega T \to \infty$ в следующем смысле. Функции с ограниченным частотным спектром Ω не могут быть строго локализованы на конечном временном интервале T, однако, как будет видно ниже, существует набор функций с ограниченным частотным спектром, которые экспоненциально сильно по параметру ΩT локализованы в интервале T. То есть весь сигнал $x(t)$ сосредоточен в окне T, кроме «хвостов», которые выходят за интервал T лишь с вероятностью $\approx \exp(-\Omega T)$. Число ортогональных функций с ограниченным частотным спектром, экспоненциально локализованных в окне T, есть $N_\Omega \approx \Omega T$, данные функции используются как базисные, по которым разлагается сигнал $x(t)$. Неформально говоря, сказанное означает, что сигнал с ограниченным частотным спектром может быть сколь угодно точно приготовлен передатчиком во временном окне T.

Перейдем к более точным формулировкам. Следуя [3], мы используем представление любой заданной действительной или комплексной функции с помощью разложения в ряд по ортонормальным функциям. При этом случайная функция описывается с помощью совместного распределения коэффициентов такого разложения.

Любая (интегрируемая с квадратом) функция $x(t)$, заданная на интервале $[-T/2, T/2]$, может быть представлена в виде разложения по системе ортогональных функций $\{\overline{\varphi}_m(t)\}_{m=1}^{\infty}$:

$$x(t) = \sum_{m=1}^{\infty} x_m \overline{\varphi}_m(t), \quad x_m = \int\limits_{-T/2}^{T/2} x(t)\overline{\varphi}_m(t)\,dt. \quad (29)$$

Ограничение по частоте Ω можно представить как прохождение функции $x(t)$ через фильтр с частотной характеристикой

$$H(\omega) = \begin{cases} 1, & 0 \le \omega \le \Omega, \\ 0, & \omega \ge \Omega, \end{cases} \quad (30)$$

или импульсной переходной функцией

$$h(t) = \frac{\sin(2\pi\Omega t)}{\pi t}. \quad (31)$$

Тогда для любой функции с ограничением Ω имеет место представление

$$x(t) = \sum_{m=1}^{\infty} h(t-\tau)\overline{\varphi}_m(\tau)\,d\tau, \quad t \in \left[-\frac{T}{2}, \frac{T}{2}\right]. \quad (32)$$

Можно выбрать систему $\{\overline{\varphi}_m(t)\}_{m=1}^{\infty}$ исходных функций не произвольно, а как решения интегрального уравнения [7–9]

$$\int\limits_{-T/2}^{T/2} \mathcal{K}(\tau_1, \tau_2)\overline{\varphi}_m(\tau_2)\,d\tau_2 = \lambda_m \overline{\varphi}_m(\tau_1), \quad (33)$$

где

$$\mathcal{K}(\tau_1, \tau_2) = h^*(t, \tau_1)h^*(t, \tau_2)\,dt, \quad (34)$$

$$h^*(t, \tau) = \begin{cases} h(t-\tau), & |t| \le \dfrac{T}{2}, \quad |\tau| \le \dfrac{T}{2}, \\ 0 & \text{в других точках.} \end{cases} \quad (35)$$

Тогда

$$x(t) = \sum_{m=1}^{\infty} x_m \int\limits_{-T/2}^{T/2} h(t-\tau)\overline{\varphi}_m(\tau)\,d\tau = \\ = \sum_{m=1}^{\infty} x_m \sqrt{\lambda_m}\varphi_m(t), \quad t \in \left[-\frac{T}{2}, \frac{T}{2}\right]. \quad (36)$$

Здесь $\{\overline{\varphi}_m(t)\}$ — система волновых функций вытянутого сфероида [7–9], ортогональных на всей числовой прямой $(-\infty, \infty)$ и ортогональных на интервале $[-T/2, T/2]$. Данное свойство ортогональности позволит аккуратно осуществить предельный переход $T \to \infty$ при вычислении скорости в единицу времени безошибочной передачи информации.

Собственные числа $\lambda_1 > \lambda_2 > \ldots > 0$ отвечают за долю энергии — степени локализации функций $\theta_m(t)$ в интервале $[-T/2, T/2]$:

$$\int\limits_{-T/2}^{T/2} \overline{\varphi}_m^2(t)\,dt = \lambda_m. \quad (37)$$

Имеет место следующее свойство функций вытянутого сфероида [7–9]: при $\Omega T \to \infty$ и для любых сколь угодно малых значений $\varepsilon \approx \ln(\Omega T)/(\Omega T)$ собственные числа $\lambda_m \to 1$ для всех $m \le \Omega T(1-\varepsilon)$ и $\lambda_m \to 0$ для всех $m \ge \Omega T(1+\varepsilon)$. При этом стремление собственных чисел λ_m к единице при $m \le$ $\le \Omega T(1-\varepsilon)$ определяется параметром $\exp(-\Omega T)$.

Отсюда следует, что функция $x(t)$ с ограниченным по частоте спектром, представленная в (36), определяется, по существу, только первыми $N_\Omega =$ $= \Omega T$ коэффициентами $x_1, \ldots, x_{N_\Omega}$:

$$x(t) = \sum_{m=1}^{N_\Omega} = x_m \varphi_m(t), \quad (38)$$

функции $\varphi_m(t)$ ортонормированы на интервале $[-T/2, T/2]$. При этом $\varphi_m(t)$, $m = 1, \ldots, N_\Omega$ практически полностью локализованы на интервале $[-T/2, T/2]$.

Раскладывая по системе $\{\varphi_m(t)\}$ реализацию белого гауссовского шума, получаем коэффициенты — случайные величины:

$$n_m = \int\limits_{-T/2}^{T/2} n(t)\varphi_m(t)\,dt, \quad m = 1, \ldots, N_\Omega. \qquad (39)$$

Коэффициенты n_m при разных m статистически независимы друг от друга и от x_m, и

$$\mathbf{E}n_m^2 = N_0. \qquad (40)$$

Таким образом, канал связи с непрерывным временем

$$y(t) = x(t) + n(t) \qquad (41)$$

представляем в виде дискретного по времени канала

$$(y_1, \ldots, y_{N_\Omega}) = (x_1 + n_1, \ldots, x_{N_\Omega} + n_{N_\Omega}) \qquad (42)$$

с независимыми компонентами шума $(n_1, \ldots, n_{N_\Omega})$, имеющими гауссовское распределение. Предположим, что мощность на входе канала ограничена [1, 3]:

$$\frac{1}{T}\int\limits_{-T/2}^{T/2} \mathbf{E}x^2(t)\,dt \le S. \qquad (43)$$

С учетом ортогональности $\{\varphi_m(t)\}$ отсюда получаем соотношение

$$\sum_{m=1}^{N_\Omega} \mathbf{E}x_M^2 \le ST. \qquad (44)$$

Передача информации в многомодовом случае осуществляется аналогично передаче информации в случае одной моды. После дискретизации передатчик выбирает в соответствии с вероятностью, аналогичной (19), в каждой моде символ алфавита (уровень сигнала) на входе. Фактически такой выбор отвечает выбору амплитуды сигнала в каждой моде. На принимающей стороне приемник определяет выходной символ — уровень сигнала в каждой независимой моде. Именно ортогональность сигналов в каждой моде — ортогональность базисных функций, по которым разлагается сигнал, позволяет это сделать.

Далее, используя свойство энтропийной функции и соотношение (27) предыдущего раздела для пропускной способности независимых гауссовских каналов, окончательно получаем выражение для пропускной способности дискретного по времени канала:

$$C_L(T) = \max_{f_{Y_1,\ldots,Y_{N_\Omega}}(y_1,\ldots,y_{N_\Omega})} (H_d(Y_1, \ldots, Y_{N_\omega}) -$$
$$- H_d(Y_1, \ldots, Y_{N_\Omega}|X_1, \ldots, X_{N_\Omega})) =$$
$$= \sum_{m=1}^{N_\Omega} \left(\max_{f_Y(y)} H_d(Y) - \frac{1}{2}\log(2\pi e N_0) \right) =$$
$$= \frac{N_\Omega}{2}\log\left(1+\frac{ST}{N_\Omega N_0}\right) = \frac{1}{2}\Omega T \log\left(1+\frac{S}{N_0\Omega}\right). \qquad (45)$$

Для пропускной способности в единицу времени получаем

$$C = \lim_{T\to\infty}\frac{C_L(T)}{T} = \frac{1}{2}\Omega\log\left(1+\frac{S}{N_0\Omega}\right). \qquad (46)$$

Как видно из (46), расходимость пропускной способности при нулевом шуме в канале ($N_0 \to 0$) сохраняется и в многомодовом случае.

5. КВАНТОВЫЙ КАНАЛ, ОДНОМОДОВЫЙ СЛУЧАЙ

Перейдем к обсуждению квантового случая. Рассмотрим классически-квантовый канал. Целью является передача классической информации при помощи квантовых состояний. Данную задачу можно свести в определенном смысле к эффективному классическому каналу связи, чтобы можно было провести аналогию с соответствующими классическими величинами, несмотря на то, что полное сведе́ние к классическому случаю невозможно.

В классически-квантовом канале связи на передающей стороне символам классического алфавита — классической информации — сопоставляются квантовые состояния, которые передаются через квантовый канал с шумом. На приемной стороне посредством измерений квантовых состояний, искаженных шумом в канале связи, требуется получить классическую информацию, закодированную в квантовые состояния. Аналогом непрерывной классической переменной является когерентное состояние $|\zeta\rangle_j$, которое при большом среднем числе фотонов $|\zeta|^2 \gg 1$ переходит в классический сигнал. Индекс j отвечает за пространственную моду состояния.

Аналогично предыдущим разделам будем рассматривать пространственные моды с конечной частотной полосой, и в качестве базисных одночастичных функций выберем волновые функции вытянутого сфероида. Операторы рождения в различных модах коммутируют (базисные состояния ортогональны),

$$[a(\varphi_j), a^\dagger(\varphi_i)] = (\varphi_j, \varphi_i) = \delta_{ji},$$
$$(\varphi_j, \varphi_i) = \int\limits_\Omega \varphi_j(\omega)\varphi_i^*(\omega)\, d\omega = \delta_{ji}, \tag{47}$$

$$(\overline{\varphi}_j, \overline{\varphi}_i) = \int\limits_\Omega \overline{\varphi}_j(\omega)\overline{\varphi}_i^*(\omega)\, d\omega = \delta_{ji}, \quad \varphi_j = \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}}\overline{\varphi}_j,$$

где $\varphi_j(\omega)$ — j-я функция вытянутого сфероида, нормированная на единицу во временном окне $[-T/2, T/2]$, $\overline{\varphi}_j(\omega)$ — функция, нормированная на интервале $(-\infty, \infty)$, λ_j — собственное число (см. (37)).

Для связи с предыдущими разделами удобнее рассмотреть сначала случай одной моды j. Любое многочастичное квантовое состояние тождественных частиц бозонов [10] может быть представлено как

$$|\Phi\rangle_j = \begin{pmatrix} \Phi_{0j} \\ \Phi_{1j}(\omega_1, \omega_2) \\ \dots \\ \Phi_{nj}(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n) \\ \dots \end{pmatrix} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} \times$$
$$\times \int\limits_\Omega \dots \int\limits_\Omega d\omega_1 d\omega_2 \dots d\omega_n \Phi_{nj}(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n) \times$$
$$\times (a^\dagger(\varphi_j))^n |\mathrm{vac}\rangle_j, \tag{48}$$

где $\Phi_{nj}(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n)$ — амплитуды состояний с разными фоковскими числами фотонов в моде j. Одномодовое когерентное состояние, локализованное во временном окне T, имеет вид

$$|\zeta\rangle_j = \exp\left(-\frac{|\zeta|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\zeta^n}{\sqrt{n!}} (a^\dagger(\varphi_j))^n |\mathrm{vac}\rangle_j =$$
$$= \exp\left(-\frac{|\zeta|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\zeta^n}{\sqrt{n!}} |n(\varphi_j)\rangle, \tag{49}$$

где $|n(\varphi_j)\rangle$ — фоковское состояние с n фотонами в моде j. Аналогично классическому одномодовому случаю кодирование осуществляется в энергию сигнала — амплитуду $(x, x + dx)$, которая выбирается в соответствии с распределением вероятностей $P_X(x)\, dx$. В квантовом случае аналогом энергии является среднее число фотонов $|\alpha|^2$, которое при кодировании выбирается случайно в соответствии с распределением вероятностей $P(\alpha)\, d\alpha$, где $d\alpha = d\alpha_{Re} d\alpha_{Im}$ — вещественная и мнимая части параметра α. По этой причине число степеней свободы в когерентном состоянии в два раза больше, чем в классическом сигнале (см. ниже). Пусть на передающей стороне задана интенсивность когерентного состояния α. После прохождения через канал связи чистое когерентное состояние превращается в матрицу плотности, искаженную гауссовским шумом. Искаженную матрицу плотности можно представить в виде

$$\rho_j(\alpha) = \frac{1}{2\pi N_{noise}} \int d\zeta |\zeta\rangle_{jj}\langle\zeta| \times$$
$$\times \exp\left(-\frac{|\zeta - \alpha|^2}{2N_{noise}}\right), \tag{50}$$

здесь N_{noise} — дисперсия среднего числа фотонов в j-моде шума, имеет размерность числа фотонов, поскольку $|\zeta - \alpha|^2$ — среднее число фотонов. Распределение вероятностей числа фотонов $\mu = |\alpha|^2$ в квантовых сигнальных состояниях аналогично классическому случаю имеет гауссовский вид:

$$P(\alpha) = \frac{1}{2\pi M} \exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2M}\right), \tag{51}$$

где M — дисперсия среднего числа фотонов в информационных состояниях — аналог энергии в классическом случае (см. формулы (8), (19)). Формулу (51) нужно понимать как

$$P(\alpha_{Re}, \alpha_{Im}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi M}} \frac{1}{\sqrt{2\pi M}} \exp\left(-\frac{\alpha_{Re}^2 + \alpha_{Im}^2}{2M}\right),$$

где α_{Re}, α_{Im} — независимые классические гауссовские случайные величины с одной и той же дисперсией, $d\alpha = d\alpha_{Re} d\alpha_{Im}$.

Непрерывный диапазон изменений α разбивается на дискретные интервалы $(\alpha_k, \alpha_k + d\alpha)$, вероятность α из этого интервала равна $P(\alpha_k)\, d\alpha$, аналогично классическому случаю. После этого источник становится дискретным, число интервалов разбиения k есть N. Каждому классическому символу α_k, выбираемому с вероятностью $P(\alpha_k)\, d\alpha$, сопоставляется когерентное квантовое состояние, которое после прохождения через канал связи становится равным (50). Итак, сигнальные состояния — набор с разными энергиями $\rho_j(\alpha)$ — выбираются с вероятностями $P(\alpha)\, d\alpha$. На приемной стороне возникают последовательности $\rho_j(k) = \rho_j(\alpha_k) P(\alpha_k)\, d\alpha$. Последовательность посылок длины n в полной аналогии с дискретным классическим источником (4) имеет вид

$$(\rho_j(k_1))^{\otimes n_{k_1}} \otimes (\rho_j(k_2))^{\otimes n_{k_2}} \otimes \dots \otimes (\rho_j(k_n))^{\otimes n_{k_n}},$$
$$n_{k_1} + n_{k_2} + \dots + n_{k_n} = n, \tag{52}$$

где n_{k_1} — число вхождений символа α_{k_1}, n_{k_2} — число вхождений символа α_{k_2} и т. д. Все последовательности (52) получаются как результат разложения

$$(\rho_j(\alpha_1)P(\alpha_1)\,d\alpha + \rho_j(\alpha_2)P(\alpha_2)\,d\alpha + \\ + \ldots + \rho_j(\alpha_N)P(\alpha_N)\,d\alpha)^{\otimes n} = \\ = \left(\sum_k \rho_j(\alpha_k)P(\alpha_k)\,d\alpha\right)^{\otimes n} \to \overline{\rho}_j^{\otimes n}, \quad (53)$$

$$\overline{\rho}_j = \int \rho_j(\alpha)P(\alpha)\,d\alpha. \quad (54)$$

Диагонализуем матрицу плотности $\overline{\rho}_j$ в (53), (54), получаем

$$\overline{\rho}_j = \sum_{K=0}^{\infty} \Lambda_j(K)|K(\varphi_j)\rangle\langle K(\varphi_j)|, \\ \Lambda_j(K) = \frac{1}{N_{noise}+M+1}\left(\frac{N_{noise}+M}{N_{noise}+M+1}\right)^K, \quad (55)$$

где $\Lambda_j(K)$, $|K(\varphi_j)\rangle$ — собственные числа и векторы, которые нумеруем буквой K. После диагонализации задача становится эффективно «классической». Собственные векторы (состояния) матрицы плотности (53)–(55) являются ортогональными, достоверно различимыми — в этом смысле классическими. Поэтому состояния на передающей стороне выглядят как состояния классического источника, который генерирует символы классического алфавита (индекс K) с вероятностями $\Lambda_j(K)$, равными собственным числам матрицы плотности (53)–(55).

В асимптотическом пределе длинных последовательностей число вхождений каждого состояния $|K(\varphi_j)\rangle\langle K(\varphi_j)|$ определяется соответствующим собственным числом — вероятностью $\Lambda_j(K)$. Число вхождения дается математическим ожиданием аналогично классическому случаю (4), (5): $n\Lambda_j(K_i)$. На приемной стороне имеются последовательности квантовых состояний:

$$|K_1(\varphi_j)\rangle\langle K_1(\varphi_j)| \otimes |K_2(\varphi_j)\rangle \times \\ \times \langle K_2(\varphi_j)| \otimes \ldots \otimes |K_n(\varphi_j)\rangle\langle K_n(\varphi_j)|, \quad (56)$$

число таких типичных последовательностей и их вероятности равны

$$2^{nH(\overline{\rho}_j)}, \quad \prod_{K=0}^{\infty} \Lambda_j(K)^{n\Lambda_j(K)} = 2^{-nH(\overline{\rho}_j)}, \\ H(\overline{\rho}_j) = -\mathrm{Tr}\{\overline{\rho}_j \log(\overline{\rho}_j)\} = \quad (57) \\ = -\sum_{K=0}^{\infty} \Lambda_j(K)\log(\Lambda_j(K)).$$

Все типичные последовательности (57) равновероятны, квантовые состояния последовательностей ортогональны, т. е. достоверно различимы. Для их различения, чтобы выяснить, какая последовательность была передана с приемной стороны, нужно делать квантовомеханические измерения на приемной стороне. Такие измерения даются набором проекторов

$$I = \sum_{\ell=1}^{2^{nH(\overline{\rho}_j)}} \mathcal{P}_\ell + \mathcal{P}_{nontyp}, \quad (58)$$

где I — единичный оператор, проектор на все последовательности, $\mathcal{P}_\ell$ — проектор на типичную последовательность, сумма проекторов есть проектор на пространство типичных последовательностей, $\mathcal{P}_{nontyp}$ — проектор на пространство нетипичных последовательностей, вероятность «попасть» в это подпространство стремится к нулю в асимптотическом пределе. Измерение (58) проводится во временном окне T — проекторы «локализованы» в этом окне.

Важно отметить, что измерение является коллективным — отвечает проекциям не на индивидуальные состояния в каждой посылке, а проекциям сразу на состояния всей последовательности длины n.

При вычислении энтропии фон Неймана удобно воспользоваться соотношением

$$\frac{x}{(1-x)^2} = \sum_{k=1}^{\infty} k \cdot x^k,$$

получаем

$$H(\overline{\rho}_j) = (N_{noise}+M+1)\log(N_{noise}+M+1) - \\ - (N_{noise}+M)\log(N_{noise}+M). \quad (59)$$

Дадим физическую интерпретацию формул (57), (59). Неформально, все последовательности на приемной стороне занимают объем (57) в пространстве состояний, пространство натянуто на состояния типичных последовательностей (57).

Если целью было бы различить каждую типичную последовательность, то она достигнута: измерение (58) позволяет достоверно (в асимптотике) различить каждую типичную последовательность (57). Однако целью является не просто различить типичные последовательности, а установить, из какой типичной последовательности на передающей стороне возникла та или иная последовательность на приемной стороне. То есть цель — определить информационную последовательность $(\alpha_{k_1}, \alpha_{k_2}, \ldots, \alpha_{k_n})$ символов по результатам измерения на приемной сто-

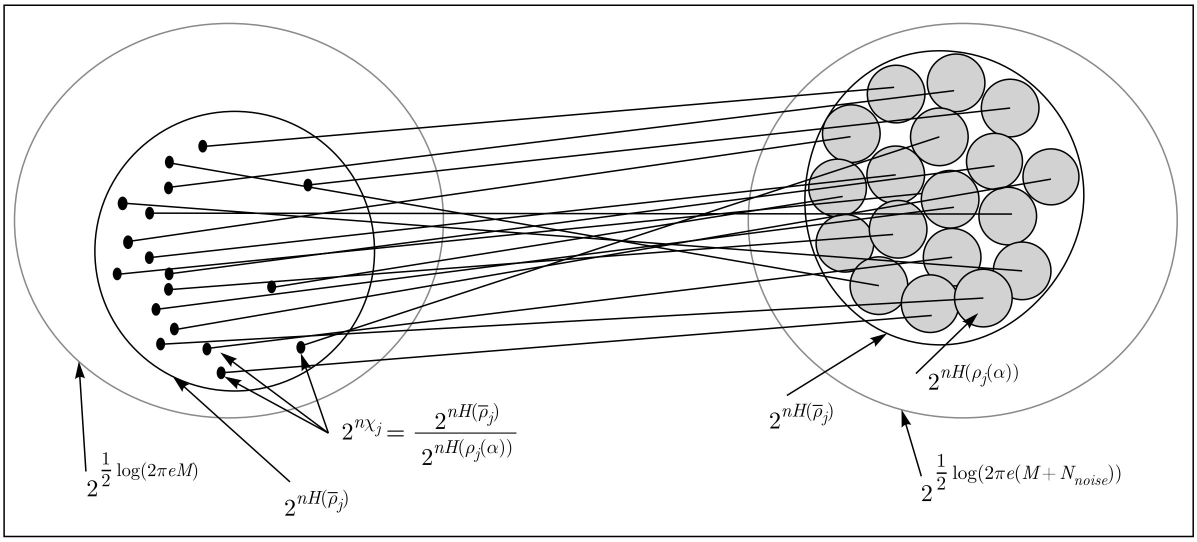


Рис. 1. Схематически показаны множества последовательностей на передающей и приемной сторонах. Число типичных классических последовательностей $2^{(1/2)\log(2\pi eS)}$, множество типичных классических последовательностей на приемной стороне $2^{(1/2)\log(2\pi e(S+\sigma^2_{noise}))}$. Каждая последовательность на приемной стороне «размазывается» в $2^{(1/2)\log(2\pi e\sigma^2_{noise})}$ последовательностей. В квантовом случае число различимых последовательностей на приемной стороне $2^{H(\overline{\rho}_j)}$, это множество также показано на передающей стороне. Каждая последовательность из данного множества переходит в множество на приемной стороне $2^{H(\rho(\alpha))}$. Множество последовательностей, передаваемых с приемной стороны — кодовые последовательности (показаны черными точками). Число последовательностей, которые могут быть безошибочно различимы на приемной стороне, есть $2^{n\chi_j}=2^{H(\overline{\rho}_j)}/2^{H(\rho(\alpha))}$

роне. Матрица плотности в каждой посылке «занимает» некоторый объем пространства состояний, каждая последовательность на передающей стороне переходит в некоторое количество последовательностей на приемной стороне, каждая последовательность на передающей стороне будет занимать некоторый объем пространства состояний на приемной стороне, аналогично классическому случаю. Шум в канале размазывает каждую последовательность в некоторый объем (см. рис. 1 и пояснения к нему).

Матрица плотности в каждой посылке «имеет объем», который не зависит от индекса k (это справедливо только для гауссовского распределения среднего числа фотонов в сигнале и шуме). Диагонализуя матрицу плотности в (50), получаем

$$\rho_j(\alpha_k)=\sum_{k=0}^{\infty}\lambda_j(k)|k(\varphi_j)\rangle\langle k(\varphi_j)|,$$
$$\lambda_j(k)=\frac{1}{N_{noise}+1}\left(\frac{N_{noise}}{N_{noise}+1}\right)^k, \quad (60)$$

где $\lambda_j(k)$, $|k(\varphi_j)\rangle$ — собственные числа и векторы $\rho_j(\alpha_k)$. Отметим, что собственные числа и векторы (60) не зависят от индекса разбиения k и определяются только шумом в канале. Неформально говоря, внутри типичных последовательностей имеют место внутренние типичные последовательности — каждая типичная последовательность на передающей стороне в среднем превращается в одинаковый набор внутренних типичных последовательностей, число которых и вероятность есть

$$2^{nH(\rho_j(\alpha))},\quad \prod_{k=0}^{\infty}\lambda_j(k)^{n\lambda_j(k)}=2^{-nH(\rho_j(\alpha))}, \quad (61)$$

для энтропии частичной матрицы плотности получаем

$$H(\rho_j(\alpha_k))=-\sum_{n=0}^{\infty}\lambda_j(n)\log(\lambda_j(n))=(N_{noise}+1)\times$$
$$\times\log(N_{noise}+1)-N_{noise}\log(N_{noise}). \quad (62)$$

Для того чтобы различить при помощи измерений (58) каждую передаваемую последовательность со стороны передатчика, число таких последовательностей на передающей стороне должно быть таково, чтобы образы от них на приемной стороне не перекрывались. При выборе числа последовательностей на передающей стороне в асимптотическом пределе равным

$$2^{n\chi_j}=\frac{2^{nH(\overline{\rho}_j)}}{2^{nH(\rho_j(\alpha))}},\quad \chi_j=H(\overline{\rho}_j)-H(\rho_j(\alpha)), \quad (63)$$

приемник сможет безошибочно различить данное число последовательностей. Естественно, набор этих последовательностей — кодовая таблица — оговаривается заранее. Приемник точно знает, что будет послана одна из последовательностей из кодовой таблицы, только заранее неизвестно, какая именно. Измерение позволяет отличить каждую последовательность из кодовой таблицы. Величина $C = \chi_j = H(\overline{\rho}_j) - H(\rho_j(\alpha))$ представляет собой фундаментальную величину Холево [4–6] — пропускную способность классически-квантового канала связи с гауссовским шумом. Данная величина дает верхнюю фундаментальную границу безошибочной передачи классической информации при помощи квантовых состояний, т. е. числа битов информации в пересчете на посылку.

Данная величина достижима на коллективных измерениях (58) (см. также [4–6]).

Обратим внимание, что «размазка» состояний на приемной стороне определяется только интенсивностью шума (в (62) входит только N_{noise} и не входит энергия/число фотонов M информационного сигнала, в полной аналогии с классическим случаем (см. формулу (17)).

6. КВАНТОВЫЙ КАНАЛ, МНОГОМОДОВЫЙ СЛУЧАЙ

В многомодовом случае имеется N_Ω параллельных независимых классически-квантовых каналов. Сигнальные состояния $\rho_j(\alpha)$ $(j = 1, 2, \ldots, N_\Omega)$ в независимых каналах выбираются с вероятностями $P(\alpha_k)\,d\alpha$ в каждой моде. Каждая мода j выбирается независимо. Последовательности в каждой посылке во всех модах могут быть представлены аналогично предыдущему случаю с одной модой, $\rho(k,j) = \rho_j(\alpha_k)P(\alpha_k)\,d\alpha$ (индекс k нумерует интервалы разбиения, число интервалов N). Все последовательности имеют вид

$$\rho(k_1,j_1)^{\otimes n(k_1,j_1)} \otimes \\ \otimes\, \rho(k_2,j_2)^{\otimes n(k_2,j_2)} \otimes \ldots \otimes \rho(k_n,j_n)^{\otimes n(k_n,j_n)}, \quad (64)$$

где $n(k_1,j_1)$ — число вхождений в последовательность состояний $\rho(k_1,j_1)$ с k_1, j_1 с энергией α_{k_1} в моде j_1 и т. д. Все последовательности длины n могут быть представлены как результат разложения:

$$\prod_{j=1}^{N_\Omega} (\rho_j(\alpha_1)P(\alpha_1)\,d\alpha + \\ + \rho_j(\alpha_2)P(\alpha_2)\,d\alpha + \ldots + \rho_j(\alpha_N)P(\alpha_N)\,d\alpha)^{\otimes n} = \\ = \prod_{j=1}^{N_\Omega} \left(\int \rho_j(\alpha)P(\alpha)\,d\alpha \right)^{\otimes n} = \prod_{j=1}^{N_\Omega} \overline{\rho}_j^{\otimes n}. \quad (65)$$

Число типичных последовательностей и их вероятности по всем каналам (модам) равны

$$2^{nN_\Omega H(\overline{\rho}_j)}, \quad \prod_{j=1}^{N_\Omega} \left(\prod_{K=0}^{\infty} \Lambda_j(K)^{n\Lambda_j(K)} \right) = \\ = 2^{-nN_\Omega H(\overline{\rho}_j)}. \quad (66)$$

Аналогично одномодовому случаю каждая типичная последовательность в каждом канале (моде) на передающей стороне в среднем превращается в одинаковый набор внутренних типичных последовательностей, число которых и вероятность есть

$$2^{N_\Omega nH(\rho_j(\alpha))}, \quad \prod_{j=1}^{N_\Omega} \left(\prod_{k=0}^{\infty} \lambda_j(k)^{n\lambda_j(k)} \right) = \\ = 2^{-N_\Omega nH(\rho_j(\alpha))}. \quad (67)$$

При выборе числа последовательностей на передающей стороне в асимптотическом пределе равным

$$2^{N_\Omega n\chi_j} = \frac{2^{N_\Omega nH(\overline{\rho}_j)}}{2^{nH(\rho_j(\alpha))}}, \\ \chi = \sum_{j=1}^{N_\Omega} \left(H(\overline{\rho}_j) - H(\rho_j(\alpha)) \right) = \\ = N_\Omega \left(H(\overline{\rho}_j) - H(\rho_j(\alpha)) \right), \quad (68)$$

приемник сможет безошибочно различить их все. Для скорости безошибочной передачи информации в многомодовом случае с учетом (67), (68) получаем

$$C_Q = \lim_{T\to\infty} \frac{\chi}{T} = \\ = \Omega\,([(N_{noise} + M + 1)\log(N_{noise} + M + 1) - \\ - (N_{noise} + M)\log(N_{noise} + M)] - \\ - [(N_{noise} + 1)\log(N_{noise} + 1) - \\ - N_{noise}\log(N_{noise})]). \quad (69)$$

Зависимости пропускных способностей в квантовом и классическом случаях от M приведены на рис. 2. Как видно из рис. 2, с ростом интенсивности шума и при одном и том же отношении M/N_{noise} пропускная способность в квантовом случае C_Q стремится

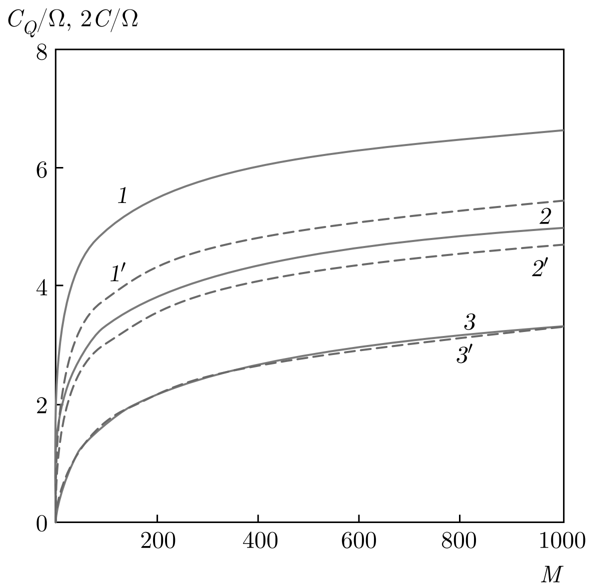


Рис. 2. Зависимости пропускных способностей в классическом случае (штриховые линии) и квантовом случае (сплошные линии) как функции среднего числа фотонов в моде M (энергии $S \to M$ в формуле (1)) при различных значениях интенсивности шума $N_{noise}(N_0) = 0.1$ (*1, 1′*), 1.0 (*2, 2′*), 10.0 (*3, 3′*)

к классическому значению $2C$ (множитель 2 возникает из удвоенного числа степеней свободы в квантовом случае — комплексности параметра α в когерентном состоянии). При большой интенсивности сигнала и шума пропускная способность в квантовом и классическом случаях практически совпадают (кривые *3, 3′* на рис. 2).

7. СРАВНЕНИЕ ПРОПУСКНОЙ СПОСОБНОСТИ В КЛАССИЧЕСКОМ И КВАНТОВОМ СЛУЧАЯХ

Как было отмечено выше, формула для пропускной способности Шеннона для частотно-ограниченного канала расходится при нулевом шуме в канале:

$$C = \frac{1}{2}\Omega \log\left(1 + \frac{S}{N_0\Omega}\right) \to \infty, \quad N_0 \to 0. \qquad (70)$$

Данный факт свидетельствует об ограниченности классического подхода.

Отметим, что подозрение о том, что формулу (70) нужно модифицировать, высказывались еще в классических работах по теории информации [3] R. G. Gallager, *Information Theory and Reliable Communication*, p. 390 (формула (8.3.23)): “Physically, of course, the problem can be easily resolved by observing that N_0 cannot be strictly zero. To put it another way, when an analysis of a mathematical model of a physical problem is indeterminate, it means that the model has been over-idealized and the model must be changed”.

В квантовом случае при большом числе фотонов пропускная способность частотно-ограниченного классически-квантового канала (69) имеет вид

$$C_Q = \Omega \log(1 + M) = \Omega \log\left(1 + \frac{m}{\Omega}\right), \quad N_{noise} = 0. \qquad (71)$$

Удобно ввести обозначение $M = m/\Omega$, где m имеет смысл числа фотонов в состоянии в единичной частотной полосе. Как видно из (71), при нулевом шуме расходимость отсутствует.

Формула (70) является чисто классической [3], при стремлении энергии шума к нулю ($N_{noise} \to 0$) скорость передачи информации расходится. Для того чтобы явно локализовать причину расходимости, рассмотрим пример.

Действительно, разобьем диапазон изменений непрерывной случайной величины (энергии сигнала) на интервалы Δ таким образом, чтобы вероятности попадания в каждый интервал были одинаковыми. Передача информации осуществляется выбором энергии сигнала в том или ином интервале. Припишем каждому интервалу его номер в лексикографическом порядке, начиная с 0. Бинарное представление номера (энергии сигнала) и будет передаваемой информацией — блоком 0 и 1. Очевидно, что при стремлении масштаба дискретизации к нулю, $\Delta \to 0$, за одну посылку и один акт измерения энергии сигнала приемником (канал идеальный) можно получить сколь угодно много информации — сколь угодно большой блок 0 и 1.

Для того чтобы устранить данное противоречие со здравым смыслом, часто произносятся слова, что процесс измерений сам вносит шум, поэтому интервал дискретизации нельзя выбирать меньше амплитуды шума. С логической точки зрения такой подход непоследователен, поскольку измеряется общее значение переменной, которое содержит вклад от всех процессов, включая шум, и процесс дискретизации не зависит от шума — является внешним.

Неформально говоря, количество передаваемой информации за одну посылку зависит от волевого решения по дискретизации.

Физически ясно, что любой физический сигнал нельзя дискретизировать до бесконечности в сторону уменьшения интервала Δ. На каком-то этапе неизбежно возникнут ограничения, диктуемые квантовой природой сигнала. Причем нижняя граница дискретизации диктуется квантовой механикой и не зависит от интенсивности сигнала. Нельзя дискретизировать сигнал до «масштабов, меньших отдельного фотона». Любой интенсивный сигнал содержит хоть и макроскопически большое, но все же конечное число фотонов.

Квантовая природа микромира должна ограничивать степень дискретизации, что неизбежно должно приводить к конечности энтропии сигнала, соответственно, накладывать фундаментальные ограничения на скорость передачи информации. Для того чтобы выяснить фундаментальные ограничения на скорость передачи информации, необходимо сразу рассматривать сигнал как квантовое состояние, которое может содержать любое число фотонов. Чтобы прояснить глубокую физическую причину, стоящую за устранением расходимости в классической формуле, рассмотрим вывод пропускной способности классически-квантового канала связи в идеальном случае — канала без шума, где интенсивность шума N_{noise} сразу равна нулю.

8. ПРОПУСКНАЯ СПОСОБНОСТЬ ИДЕАЛЬНОГО ЧАСТОТНО-ОГРАНИЧЕННОГО КЛАССИЧЕСКИ-КВАНТОВОГО КАНАЛА СВЯЗИ И ПРИНЦИП ТОЖДЕСТВЕННОСТИ ЧАСТИЦ

Как сейчас покажем, за отсутствием расходимости при нулевом шуме в формуле (71) стоит фундаментальный физический принцип тождественности частиц — бозонов. Вычисление пропускной способности для идеального канала связи сводится к подсчету скорости генерации энтропии источником информационных состояний. Формально отсутствие шума означает, что распределение сигнальных квантовых состояний в (50) сконцентрировано в окрестности числа фотонов M во всех состояниях, которые становятся равновероятными.

В этом случае задача вычисления скорости генерации энтропии сводится к подсчету числа квантовых состояний с M фотонами, локализованных в интервале времени $[-T/2, T/2]$.

Пусть квантовое состояние поля содержит M фотонов — бозе-частиц. Состояние имеет носитель в конечной частотной полосе Ω. В качестве одночастичных базисных состояний выберем волновые функции вытянутого сфероида $\varphi_n(\omega)$. Таких функций $N_\Omega = \Omega T$. Число многочастичных ортогональных векторов состояний с M фотонами, локализованных во временном окне T, равно числу способов размещения M фотонов по N_Ω одночастичным состояниям. Число размещений бозе-частиц по N_Ω состояниям равно

$$C^M_{N_\Omega-1+M} = \frac{(N_\Omega - 1 + M)!}{(N_\Omega - 1)!M!}. \qquad (72)$$

Вектор состояния, отвечающий размещению — разбиению числа $n_1 + n_2 + \ldots + n_{N_\Omega} = M$, имеет вид

$$\begin{gathered}
|\Phi_{n_1,n_2,\ldots,n_{N_\Omega}}\rangle = \int\limits_\Omega \ldots \int\limits_\Omega d\omega_1 d\omega_2 \ldots d\omega_{n_1} d\omega_{n_1+1} \times \\
\times d\omega_{n_1+2} \ldots d\omega_{n_2} \ldots d\omega_{n_{N_\Omega-1}+1} d\omega_{n_{N_\Omega-1}+2} \ldots d\omega_{n_{N_\Omega}} \times \\
\times \varphi_1(\omega_1)\varphi_1(\omega_2)\ldots\varphi_1(\omega_{n_1})\varphi_2(\omega_{n_1+1}) \times \\
\times \varphi_2(\omega_{n_1+2})\ldots\varphi_2(\omega_{n_2})\ldots\varphi_{N_\Omega}(\omega_{n_{N_\Omega-1}+1}) \times \\
\times \varphi_{N_\Omega}(\omega_{n_{N_\Omega-1}+2})\ldots\varphi_{N_\Omega}(\omega_{n_{N_\Omega}}) \times \\
\times |\omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_{n_1}, \omega_{n_1+1}, \omega_{n_1+2}, \ldots, \omega_{n_2}, \\
\ldots, \omega_{n_{N_\Omega-1}+1}, \omega_{n_{N_\Omega-1}+2}, \ldots, \omega_{n_{N_\Omega}}\rangle. \qquad (73)
\end{gathered}$$

Дальнейшая логика рассуждений следующая. При заданном числе фотонов в состоянии M имеется (72) ортогональных, а значит достоверно различимых, квантовых состояний на интервале $[-T/2, T/2]$, которые локализованы почти целиком в этом окне. Измерения во временном окне позволяют различить все ортогональные состояния. Максимальная энтропия источника достигается в том случае, когда источник генерирует равновероятно все $C^M_{N_\Omega-1+M}$ ортогональных различимых состояний. Состояния (73) ортогональны, поэтому достоверно различимы. Передатчик посылает состояния (73) равновероятно. Приемник использует измерения, сводящиеся к проекции на набор состояний (73). В каждом акте измерения во временном окне $[-T/2, T/2]$ возникает случайно один из $C^M_{N_\Omega-1+M}$ исходов.

Вероятность каждого состояния, генерируемого передатчиком, есть $1/C^M_{N_\Omega-1+M}$, соответственно, энтропия источника, генерируемая за время T, есть

$$H_T = \log\left(C^M_{N_\Omega-1+M}\right). \qquad (74)$$

Поскольку $N_\Omega \gg 1$, воспользовавшись формулой Стирлинга для значения факториала в главном приближении, получаем

$$\begin{gathered}
C^M_{N_\Omega-1+M} \approx \frac{(N_\Omega + M)^{N_\Omega}(N_\Omega + M)^M}{N_\Omega^{N_\Omega} M^M} = \\
= \left(1 + \frac{M}{N_\Omega}\right)^{N_\Omega}\left(1 + \frac{N_\Omega}{M}\right)^M, \qquad (75)
\end{gathered}$$

где M — число фотонов во временном окне $[0, T]$. Удобно для дальнейшего ввести обозначение $M = mT$, где m имеет смысл числа фотонов в единицу времени и имеет такую же размерность, как частота Ω [1/с], поэтому отношение m/Ω является безразмерным.

Используя (74), (75), находим, что энтропия, генерируемая источником в единицу времени (пропускная способность) равна

$$C_Q = \lim_{T\to\infty} \frac{H_T}{T} = \\ = \Omega\left[\log\left(1+\frac{m}{\Omega}\right) + \frac{m}{\Omega}\log\left(1+\frac{\Omega}{m}\right)\right]. \quad (76)$$

При малых числах фотонов (предельно квантовый сигнал), $m/\Omega \ll 1$, выражение для скорости генерации энтропии принимает вид

$$C_Q = m, \quad (77)$$

она пропорциональна числу фотонов в единичной частотной полосе. Скорость генерации энтропии фактически определяется частотной полосой сигнала. Формально ширина частотной полосы в формуле (78) сокращается, скорость генерации энтропии пропорциональна числу фотонов. При большом числе фотонов, $m/\Omega \gg 1$, (классический предел) второе слагаемое в правой части (76) остается конечным и стремится к

$$\frac{m}{\Omega}\log\left(1+\frac{\Omega}{m}\right) \to \frac{1}{\ln(2)}, \quad \frac{m}{\Omega} \to \infty. \quad (78)$$

Первое слагаемое в (76) логарифмически растет с увеличением числа фотонов (интенсивности сигнала):

$$C_Q = \Omega\log\left(1+\frac{m}{\Omega}\right), \quad (79)$$

что совпадает с пропускной способностью (71) канала с гауссовскими информационными состояниями после устремления к нулю интенсивности шума в канале.

9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение отметим, что при выводе пропускной способности канала с гауссовскими информационными состояниями и шумом предыдущим способом (разд. 5–7) за кадром остается фундаментальный факт — устранение расходимости, фактически невозможность дискретизировать сигнал до сколь угодно малых масштабов. Нижняя граница дискретизации ограничивается числом ортогональных различимых квантовых состояний при заданном числе фотонов M (в классическом случае интенсивностью), которые можно сформировать в данной частотной полосе. Число различных способов размещения M бозонов при использовании N_Ω одночастичных базисных состояний диктуется фундаментальным физическим принципом тождественности частиц — бозонов, формула (72). При квантовом рассмотрении проблема дискретизации сигнала отсутствует, при заданном количестве частиц M число состояний определяется числом способов размещения тождественных частиц по N_Ω уровням — набору одночастичных состояний.

Благодарности. Выражаем благодарность коллегам по Академии криптографии Российской Федерации за обсуждения и поддержку, а также К. А. Балыгину, А. Н. Климову, С. П. Кулику за многочисленные обсуждения и замечания.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 21-12-00005).

ЛИТЕРАТУРА

1. C. E. Shannon, Bell System Techn. J. **XXVII**, 379 (1948).
2. T. M. Cover and J. A. Thomas, *Elements of Information Theory*, Wiley (1991).
3. R. G. Gallager, *Information Theory and Reliable Communication*, John Willey&Sons, New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore (1968).
4. A. S. Holevo, Probl. Inf. Transm. **9**, 177 (1973).
5. А. С. Холево, УМН **53**, 193 (1998).
6. А. С. Холево, *Квантовые системы, каналы, информация*, МЦНМО, Москва (2010).
7. H. J. Landau and H. O. Pollak, Bell System Techn. J. **40**, 65 (1961).
8. D. Slepian and H. O. Pollak, Bell System Techn. J. **40**, 43 (1961).
9. W. H. J. Fuchs, J. Math. Analysis Applications **9**, 317 (1964).
10. Ф. А. Березин, *Метод вторичного квантования*, сер. Шедевры мировой физико-математической литературы, ИО НФМИ, Новокузнецк (2000), 230 с.

ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 3, стр. 448–456

ГРАВИТАЦИОННЫЙ КОЛЛАПС ЖИДКОГО ОБЪЕКТА С КРУЧЕНИЕМ С ОБРАЗОВАНИЕМ ВСЕЛЕННОЙ В ЧЕРНОЙ ДЫРЕ

Н. Поплавски*

Department of Mathematics and Physics, University of New Haven, 300 Boston Post Road, West Haven, CT 06516, USA

Поступила в редакцию 4 августа 2020 г.,
после переработки 28 сентября 2020 г.
Принята к публикации 21 ноября 2020 г.

(Перевод с английского)

GRAVITATIONAL COLLAPSE OF A FLUID WITH TORSION INTO A UNIVERSE IN A BLACK HOLE

N. Poplawski

Рассмотрен гравитационный коллапс в черную дыру для сферически-симметричной жидкой сферы со спином и кручением. Используются метрика Толмана и уравнения Эйнштейна – Картана с релятивистской спиновой жидкостью в качестве источника. Показано, что гравитационное отталкивание за счет кручения препятствует появлению сингулярности, а вместо нее возникает несингулярный отскок. Рождение квантовых частиц во время сжатия способствует преобладанию кручения над сдвигами. Рождение квантовых частиц во время расширения может привести к конечному времени инфляции и к образованию очень большого количества материи. Получающаяся в результате по другую сторону горизонта событий замкнутая вселенная может испытать несколько отскоков. Такая вселенная является осциллирующей, при этом каждый цикл оказывается больше предыдущего, до тех пор пока космологическая постоянная не возрастет настолько, что расширение станет неограниченным. Поэтому может оказаться, что наша вселенная родилась в черной дыре.

DOI: 10.31857/S0044451021030068

1. ВВЕДЕНИЕ

Тензор кручения представляет собой антисимметричную часть аффинной связности [1]. Общая теория относительности (ОТО) предполагает, что этот тензор обращается в нуль [2, 3]. Однако закон сохранения полного (орбитального и спинового) момента импульса дираковской частицы в искривленном пространстве-времени не должен противоречить уравнению Дирака, разрешающему спин-орбитальные взаимодействия. Для выполнения этого условия согласованности необходимо, чтобы на тензор кручения не накладывалось требование равенства нулю [4]. Наиболее простой и естественной теорией гравитации, обобщающей ОТО за счет кручения в пространстве-времени, является теория Эйнштейна – Картана (ЭК) [5–8]. В этой теории, развитой Шьямой и Кибблом, плотность лагранжиана для гравитационного поля пропорциональна скаляру Риччи, как и в ОТО. Кручение определяется с помощью полевых уравнений, полученных варьированием действия для гравитации и материи по тензору кручения [5–8]. Тензор кручения оказывается алгебраически пропорционален спиновому тензору фермионной материи, так что кручение оказывается нединамическим. Тогда уравнения ЭК можно пе-

* E-mail: NPoplawski@newhaven.edu

реписать как уравнения ОТО с симметричной связностью Леви–Чивита, где тензор энергии-импульса материи приобретает дополнительные члены, квадратичные по спиновому тензору. Поэтому в теории ЭК нет духов, которые могут проявляться в других теориях с кручением, в которых кручение является распространяющимся [9]. Мультипольное разложение закона сохранения для спинового тензора в теории ЭК приводит к представлению фермионной материи как спиновой жидкости (идеальной жидкости со спином) [10].

Кручение может порождать гравитационное отталкивание и препятствовать возникновению космологической сингулярности в однородной и изотропной вселенной, описываемой метрикой Фридмана–Леметра–Робертсона–Уокера (ФЛРУ) [2,3,5,11], когда спины фермионов сонаправлены, что было показано в работах [12–14]. Сингулярность может отсутствовать и для случайно ориентированных спинов, поскольку макроскопическое усреднение спиновых членов в тензоре энергии-импульса дает ненулевое значение, что было получено в работе [15]. Выражения для эффективных плотности энергии и давления спиновой жидкости имеют вид

$$\tilde{\epsilon} = \epsilon - \alpha n_f^2, \quad \tilde{p} = p - \alpha n_f^2, \tag{1}$$

где ϵ и p — термодинамические плотность энергии и давление, n_f — численная плотность фермионов, а $\alpha = \kappa(\hbar c)^2/32$ [15–18], $\kappa = 8\pi G/c^4$. При низких плотностях влиянием кручения можно пренебречь, и теория ЭК эффективно сводится к ОТО. При очень высоких плотностях, существенно больших, чем ядерная плотность, отрицательные поправки в выражениях (1), обусловленные взаимодействием спин–кручение, нарушают сильное энергетическое условие и действуют как отталкивающая гравитация, что может препятствовать возникновению космологической сингулярности [17–20]. Аналогично, коллапсирующая материя в черной дыре, которую можно представить с помощью метрики ФЛРУ, также должна препятствовать появлению сингулярности, вместо этого возникает несингулярный отскок, после которого должна возникнуть новая расширяющаяся замкнутая вселенная [17–20], полная энергия которой равна нулю [21].

Если в черной дыре по другую сторону горизонта событий возникает новорожденная вселенная, то она должна быть связана с породившей ее вселенной через мост Эйнштейн–Розена [22]. Возникновение и последующую динамику такой вселенной невозможно наблюдать снаружи черной дыры из-за бесконечной величины красного смещения на горизонте событий. Тогда, если наша вселенная является замкнутой [23], то она могла возникнуть как новорожденная вселенная при отскоке внутри родительской черной дыры, существующей в другой вселенной [17,19,22,24]. Рождение квантовых частиц после отскока может способствовать тому, что экспоненциальная инфляция должна закончиться в течение конечного периода времени [17], что подтверждается наблюдениями космического микроволнового фона с помощью телескопа «Планк» [25]. Несингулярный отскок также возможен, если спиновый тензор полностью антисимметричен [26].

Эффекты кручения в теории ЭК очень слабы и играют существенную роль в астрофизике только для черных дыр или для очень ранней вселенной. Например, кручением можно объяснить асимметрию количества материи и антиматерии во вселенной [27]. В квантовой теории поля с помощью кручения можно подвергнуть фермионы пространственному расширению [7] (вероятно, в будущем это можно будет исследовать) и исключить ультрафиолетовую расходимость из радиационных поправок, представленных петлевыми диаграммами Фейнмана [28].

В настоящей работе в рамках теории ЭК мы рассматриваем гравитационный коллапс сферы, состоящей из однородной спиновой жидкости, исходно находящейся в состоянии покоя. Такой коллапс исследовался в работе [29] в предположении, что интервал внутри коллапсирующей жидкости задается метрикой ФЛРУ. В этой работе, как и в работах [19,20], было показано, что можно избежать возникновения сингулярности в пространстве-времени с метрикой в присутствии спиновой жидкости. Однако там не были рассмотрены эффекты сдвига, действующие противоположно кручению [14], препятствующему возникновению сингулярности. Кроме того, в работе [29] не было исследовано, что происходит со спиновой жидкостью после отскока, когда формируется горизонт событий, а был рассмотрен только случай без горизонта, который реализуется, когда исходная масса жидкой сферы меньше некоторого порога (такое заключение было сделано ранее в работе [7]). Когда формируется горизонт событий, жидкость не может попасть обратно в область пространства снаружи горизонта, поскольку материя проходит через горизонт только в одном направлении [3]. Более того, она не может достичь статического состояния, потому что пространство-время внутри горизонта событий является нестационарным. Поэтому спиновая жидкость по другую сторону горизонта событий должна расширяться как новая, растущая вселенная [19].

Чтобы рассмотреть гравитационный коллапс сферы, состоящей из спиновой жидкости, в черную дыру, воспользуемся подходом, предложенным в работе [3] для детального анализа коллапса пылевидной сферы, который в свою очередь, основан на работах [30] и [31]. Этот формализм связывает исходный масштабный множитель вселенной внутри черной дыры с исходными радиусом и массой черной дыры. В отсутствие градиентов давления такой коллапс можно описывать в системе отсчета, являющейся одновременно синхронной и сопутствующей [3]. Будем использовать метрику Толмана [30, 31] и полевые уравнения ЭК с релятивистской спиновой жидкостью в качестве источника. Будем также использовать температуру для описания энергии, давления и плотности числа фермионов в релятивистской жидкости [17]. Мы покажем, что после формирования горизонта событий гравитационное отталкивание препятствует возникновению сингулярности, вместо нее возникает несингулярный отскок. Образующаяся в результате по другую сторону горизонта событий вселенная является замкнутой и может испытать бесконечное число отскоков и циклов. В отсутствие кручения должна возникать сингулярность, а метрика должна описываться внутренним решением Шварцшильда, при этом она эквивалентна метрике Кантовски–Закса, описывающей анизотропную вселенная с топологией $R \times S^2$ [32]. Благодаря кручению вселенная внутри черной дыры становится замкнутой с топологией S^3 (3-сфера).

Поскольку наличие сдвигов может помешать кручению избегнуть сингулярности [14], мы будем учитывать рождение квантовых частиц, которое происходит в изменяющихся гравитационных полях [33], и покажем, что при этом проявляются два эффекта. Во время сжатия рождение частиц и кручение, действуя совместно, изменяют на противоположное гравитационное притяжение, порожденное сдвигами, и препятствуют возникновению сингулярности. Во время расширения то же рождение частиц может привести к конечному времени инфляции и к образованию очень большого количества материи. Соответственно, при этом каждый цикл оказывается больше и длиннее предыдущего [17, 34]. Число отскоков и циклов конечно, поскольку вселенная в конце концов достигает размера, при котором космологическая постоянная (которую также можно объяснить кручением [35]) возрастет настолько, что расширение станет неограниченным.

2. ГРАВИТАЦИОННЫЙ КОЛЛАПС ОДНОРОДНОЙ СФЕРЫ

Для сферически-симметричного гравитационного поля в пространстве-времени, заполненном идеальной жидкостью, геометрия определяется метрикой Толмана [3, 30]:

$$ds^2 = e^{\nu(\tau,R)}c^2d\tau^2 - e^{\lambda(\tau,R)}dR^2 - \\ - e^{\mu(\tau,R)}(d\theta^2 + \sin^2\theta\, d\phi^2), \quad (2)$$

где ν, λ и μ — функции временной координаты τ и радиальной координаты R. Можно применить преобразование координат $\tau \to \tau'(\tau)$ и $R \to R'(R)$, которое не меняет вид метрики (2). Компоненты тензора Эйнштейна, соответствующие (2) и не обращающиеся в нуль, имеют вид [3, 30]

$$\begin{aligned}
G_0^0 &= -e^{-\lambda}\left(\mu'' + \frac{3\mu'^2}{4} - \frac{\mu'\lambda'}{2}\right) + \\
&\quad + \frac{e^{-\nu}}{2}\left(\dot\lambda\dot\mu + \frac{\dot\mu^2}{2}\right) + e^{-\mu}, \\
G_1^1 &= -\frac{e^{-\lambda}}{2}\left(\frac{\mu'^2}{2} + \mu'\nu'\right) + \\
&\quad + e^{-\nu}\left(\ddot\mu - \frac{\dot\mu\dot\nu}{2} + \frac{3\dot\mu^2}{4}\right) + e^{-\mu}, \\
G_2^2 &= G_3^3 = -\frac{e^{-\nu}}{4}(\dot\lambda\dot\nu + \dot\mu\dot\nu - \dot\lambda\dot\mu - 2\ddot\lambda - \\
&\quad - \dot\lambda^2 - 2\ddot\mu - \dot\mu^2) - \frac{e^{-\lambda}}{4} \times \\
&\times (2\nu'' + \nu'^2 + 2\mu'' + \mu'^2 - \mu'\lambda' - \nu'\lambda' + \mu'\nu'), \\
G_0^1 &= \frac{e^{-\lambda}}{2}(2\dot\mu' + \dot\mu\mu' - \dot\lambda\mu' - \dot\mu\nu'),
\end{aligned} \quad (3)$$

где точка обозначает дифференцирование по $c\tau$, а штрих — дифференцирование по R.

В сопутствующей системе отсчета пространственные компоненты 4-скорости u^μ обращаются в нуль. Тогда ненулевые компоненты тензора энергии-импульса для спиновой жидкости,

$$T_{\mu\nu} = (\tilde\epsilon + \tilde p)u_\mu u_\nu - \tilde p g_{\mu\nu},$$

имеют вид

$$T_0^0 = \tilde\epsilon,$$

$$T_1^1 = T_2^2 = T_3^3 = -\tilde p.$$

Полевые уравнения Эйнштейна

$$G_\nu^\mu = \kappa T_\nu^\mu$$

в такой системе отсчета принимают вид

$$G_0^0 = \kappa\tilde\epsilon, \quad G_1^1 = G_2^2 = G_3^3 = -\kappa\tilde p, \quad G_0^1 = 0. \quad (4)$$

Ковариантное сохранение тензора энергии-импульса дает

$$\dot{\lambda} + 2\dot{\mu} = -\frac{2\dot{\tilde{\epsilon}}}{\tilde{\epsilon}+\tilde{p}}, \quad \nu' = -\frac{2\tilde{p}'}{\tilde{\epsilon}+\tilde{p}}, \tag{5}$$

где постоянные интегрирования зависят от допустимых преобразований

$$\tau \to \tau'(\tau)$$

и

$$R \to R'(R).$$

Если давление однородно (отсутствуют градиенты давления), то $p' = 0$ и $p = p(\tau)$. В этом случае второе уравнение в (5) дает $\nu' = 0$. Поэтому $\nu = \nu(\tau)$ и преобразование $\tau \to \tau'(\tau)$ делает ν равным нулю, а $g_{00} = e^{\nu}$ равным единице. Система отсчета становится синхронной [3]. Если положить

$$r(\tau, R) = e^{\mu/2},$$

то (2) примет вид

$$ds^2 = c^2 d\tau^2 - e^{\lambda(\tau,R)} dR^2 - \\ - r^2(\tau,R)(d\theta^2 + \sin^2\theta\, d\phi^2). \tag{6}$$

Уравнения Эйнштейна (3) принимают вид

$$\begin{aligned} &\kappa\tilde{\epsilon} = -\frac{e^{-\lambda}}{r^2}(2rr''+r'^2-rr'\lambda')+\frac{1}{r^2}(r\dot{r}\dot{\lambda}+\dot{r}^2+1),\\ &-\kappa\tilde{p} = \frac{1}{r^2}(-e^{-\lambda}r'^2 + 2r\ddot{r} + \dot{r}^2 + 1),\\ &-2\kappa\tilde{p} = -\frac{e^{-\lambda}}{r}(2r''-r'\lambda')+\frac{\dot{r}\dot{\lambda}}{r}+\ddot{\lambda}+\frac{1}{2}\dot{\lambda}^2+\frac{2\ddot{r}}{r},\\ &2\dot{r}' - \dot{\lambda}r' = 0. \end{aligned} \tag{7}$$

Интегрируя последнее уравнение в (7), получаем

$$e^{\lambda} = \frac{r'^2}{1+f(R)}, \tag{8}$$

где f — функция R, удовлетворяющая условию $1 + f > 0$ [3]. Подстановка (8) во второе из уравнений (7) дает

$$2r\ddot{r} + \dot{r}^2 - f = -\kappa\tilde{p}r^2,$$

откуда

$$\dot{r}^2 = f(R) + \frac{F(R)}{r} - \frac{\kappa}{r}\int \tilde{p}r^2 dr, \tag{9}$$

где F — положительная функция R. Подстановка (8) в третье из уравнений (7) не приводит к новым соотношениям. Подставляя (8) в первое из уравнений (7) и используя (9), получаем

$$\kappa(\tilde{\epsilon}+\tilde{p}) = \frac{F'(R)}{r^2 r'}. \tag{10}$$

Комбинируя (9) и (10), получаем

$$\dot{r}^2 = f(R) + \frac{\kappa}{r}\int\limits_0^R \tilde{\epsilon}r^2 r' dR. \tag{11}$$

Каждая частица в коллапсирующей жидкой сфере представляется радиальной координатой R, изменяющейся от 0 (в центре сферы) до R_0 (на поверхности сферы). Если M — масса сферы, то радиус формирующейся из сферы черной дыры Шварцшильда, $r_g = 2GM/c^2$, равен [3]

$$r_g = \kappa\int\limits_0^{R_0} \tilde{\epsilon}r^2 r' dR. \tag{12}$$

Уравнения (11) и (12) дают

$$\dot{r}^2(\tau, R_0) = f(R_0) + \frac{r_g}{r(\tau, R_0)}. \tag{13}$$

Если $r_0 = r(0, R_0)$ — начальный радиус сферы и сфера исходно находилась в состоянии покоя, то

$$\dot{r}(0, R_0) = 0.$$

Тогда (13) определяет значение R_0:

$$f(R_0) = -\frac{r_g}{r_0}. \tag{14}$$

3. БЕССПИНОВАЯ ПЫЛЕВИДНАЯ СФЕРА

Прежде, чем обратиться к гравитационному коллапсу сферы, состоящей из спиновой жидкости, полезно рассмотреть бесспиновую пылевидную сферу, для которой давление обращается в нуль и поэтому $\tilde{p} = 0$. Подставляя (10) в (12), получаем

$$r_g = F(R_0) - F(0) = F(R_0), \tag{15}$$

откуда можно определить R_0. Если $f < 0$, то уравнение (9) имеет решение

$$\begin{aligned} r &= -\frac{F}{2f}(1+\cos\eta),\\ \tau - \tau_0(R) &= \frac{F}{2(-f)^{3/2}}(\eta + \sin\eta), \end{aligned} \tag{16}$$

где η — параметр, а $\tau_0(R)$ — функция R [3, 30]. Выбирая

$$f(R) = -\sin^2 R, \quad F(R) = a_0 \sin^3 R, \\ \tau_0(R) = \mathrm{const}, \tag{17}$$

получаем

$$r = \frac{a_0}{2}\sin R(1+\cos\eta), \quad \tau - \tau_0 = \frac{a_0}{2}(\eta + \sin\eta), \tag{18}$$

где a_0 — постоянная [3]. Изначально, при $\tau = \tau_0$ и $\eta = 0$, сфера находится в состоянии покоя, $\dot{r} = 0$. Очевидно, что через конечное время все частицы достигнут сингулярности при $r = 0$. Значения a_0 и R_0 можно определить из (14), (15) и (17):

$$\sin R_0 = \left(\frac{r_g}{r_0}\right)^{1/2}, \quad a_0 = \left(\frac{r_0^3}{r_g}\right)^{1/2}. \tag{19}$$

Горизонт событий для всей сферы формируется, когда

$$r(\tau, R_0) = r_g,$$

т. е. при

$$\cos(\eta/2) = \sin R_0.$$

Подставляя (17) и (18) в (8), получаем

$$e^{\lambda(\tau,R)} = a_0^2(1+\cos\eta)^2/4.$$

Если определить

$$a(\tau) = \frac{a_0}{2}(1+\cos\eta), \tag{20}$$

то квадрат инфинитезимального интервала внутри коллапсирующей пылевидной сферы (6) становится равен [3]

$$ds^2 = c^2 d\tau^2 - a^2(\tau)dR^2 - \\ - a^2(\tau)\sin^2 R(d\theta^2 + \sin^2\theta\, d\phi^2). \tag{21}$$

Начальное значение a равно a_0. Такая метрика является замкнутой метрикой ФЛРУ и описывает часть замкнутой вселенной при $0 \le R \le R_0$.

4. СФЕРА ИЗ СПИНОВОЙ ЖИДКОСТИ

Перейдем к основной части работы и рассмотрим гравитационный коллапс сферы, состоящей из спиновой жидкости, чтобы показать, как формируется несингулярная вселенная. Подставляя $r = e^{\mu/2}$ и (8) в первое из уравнений (5), получаем уравнение

$$\frac{d}{d\tau}(\tilde{\epsilon}r^2 r') + \tilde{p}\frac{d}{d\tau}(r^2 r') = 0, \tag{22}$$

которое имеет вид первого закона термодинамики для плотности энергии и давления (1) [17]. Если предположить, что спиновая жидкость состоит из ультрарелятивистской материи в состоянии кинетического равновесия, то

$$\epsilon = h_\star T^4,$$

$$p = \epsilon/3$$

и

$$n_f = h_{nf} T^3,$$

где T — температура жидкости,

$$h_\star = (\pi^2/30)(g_b + (7/8)g_f)k_B^4/(\hbar c)^3$$

и

$$h_{nf} = (\zeta(3)/\pi^2)(3/4)g_f k_B^3/(\hbar c)^3,$$

см. [17,18]. Для частиц в рамках Стандартной Модели $g_b = 29$ и $g_f = 90$. Поскольку $p' = 0$, температура не зависит от R, $T = T(\tau)$. Подставляя эти соотношения в (22), получаем

$$r^2 r' T^3 = g(R), \tag{23}$$

где g — функция R. Подставляя это уравнение в (11), получаем

$$\dot{r}^2 = f(R) + \frac{\kappa}{r}(h_\star T^4 - \alpha h_{nf}^2 T^6)\int_0^R r^2 r' dR. \tag{24}$$

Уравнения (23) и (24) определяют функцию $r(\tau, R)$, которая с учетом (8) дает $\lambda(\tau, R)$. Интегрирование уравнения (24) также дает начальное значение $\tau_0(R)$. Таким образом, метрика (6) зависит от трех произвольных функций: $f(R)$, $g(R)$ и $\tau_0(R)$.

Будем искать решение уравнений (23) и (24) в виде

$$f(R) = -\sin^2 R, \quad r(\tau, R) = a(\tau)\sin R, \tag{25}$$

где $a(\tau)$ — неотрицательная функция τ. Такой выбор аналогичен случаю пылевидной сферы: первое из уравнений (17), первое из уравнений (18) и уравнение (20). Тогда из уравнения (23) получаем

$$a^3 T^3 \sin^2 R \cos R = g(R), \tag{26}$$

где разделение переменных τ и R дает

$$g(R) = \mathrm{const}\cdot\sin^2 R\cos R, \quad a^3 T^3 = \mathrm{const}. \tag{27}$$

Отсюда находим

$$aT = a_0 T_0, \quad \frac{\dot{T}}{T} + \frac{H}{c} = 0, \tag{28}$$

где $a_0 = a(0)$, $T_0 = T(0)$, а $H = c\dot{a}/a$ — параметр Хаббла. Подставляя (25) в (24), получаем

$$\dot{a}^2 + 1 = \frac{\kappa}{3}(h_\star T^4 - \alpha h_{nf}^2 T^6)a^2. \qquad (29)$$

Используя (28), из (29) получаем

$$\dot{a}^2 = -1 + \frac{\kappa}{3}\left(\frac{h_\star T_0^4 a_0^4}{a^2} - \frac{\alpha h_{nf}^2 T_0^6 a_0^6}{a^4}\right). \qquad (30)$$

Подставляя (25) в (8), получаем

$$e^{\lambda(\tau,R)} = a^2.$$

Тогда квадрат инфинитезимального интервала внутри коллапсирующей сферы из спиновой жидкости (6) также определяется выражением (21).

Значения a_0 и R_0 можно определить из (14) и (25), что также дает выражения (19). Подставляя их и $\dot{a}(0) = 0$ в (29), где можно пренебречь вторым членом в правой части, получаем

$$Mc^2 = (4\pi/3) r_0^3 h_\star T_0^4.$$

Это соотношение указывает на эквивалентность массы и энергии жидкой сферы радиуса r_0 и с определенным значением T_0. Горизонт событий для полной сферы формируется, когда $r(\tau, R_0) = r_g$, что эквивалентно $a = (r_g r_0)^{1/2}$. Уравнение (30) имеет две точки поворота, $\dot{a} = 0$, при условии [18]

$$\frac{r_0^3}{r_g} > \frac{3\pi G\hbar^4 h_{nf}^4}{8h_\star^3} \propto l_{Planck}^2, \qquad (31)$$

которое выполнено для астрофизических систем, формирующих черные дыры.

5. ИЗБЕГАНИЕ СИНГУЛЯРНОСТИ

Уравнение (30) можно решить аналитически в терминах эллиптических интегралов второго рода [18], задавая функцию $a(\tau)$, тогда

$$r(\tau, R) = a(\tau)\sin R.$$

Значение a никогда не становится равным нулю, поскольку a убывает, при этом правая часть уравнения (30) становится отрицательной, что противоречит тому, что левая часть неотрицательна. Смена знака происходит при

$$a < (r_g r_0)^{1/2},$$

т. е. после формирования горизонта событий. Поэтому все частицы с $R > 0$ падают на горизонт событий, но никогда не достигают значения $r = 0$ (единственная частица в центре — это частица, которая исходно находилась в центре, при $R = 0$). Это препятствует возникновению сингулярности. Ненулевые значения a в выражении (21) задают конечные значения T и, соответственно, конечные значения ϵ, p и n_f.

Вселенная, образующаяся в результате по другую сторону горизонта событий, имеет замкнутую геометрию (постоянную положительную кривизну). Величина $a(\tau)$ является масштабным множителем для этой вселенной. Вселенная является осциллирующей: значения a осциллируют между двумя точками поворота. Значения R_0 не меняются. Точка поворота, в которой $\ddot{a} > 0$, соответствует отскоку, а точка поворота, в которой $\ddot{a} < 0$ — схлопыванию. Поэтому вселенная испытывает бесконечное число отскоков и схлопываний, и это происходит в каждом цикле.

Уравнение Райчаудхури для конгруенции геодезических без 4-ускорения и вращения имеет вид

$$d\theta/ds = -\theta^2/3 - 2\sigma^2 - R_{\mu\nu}u^\mu u^\nu,$$

где θ — скаляр расширения, σ^2 — сдвиговый скаляр, а $R_{\mu\nu}$ — тензор Риччи [8]. Для спиновой жидкости последнее слагаемое в этом уравнении равно $-\kappa(\tilde{\epsilon} + 3\tilde{p})/2$. Поэтому необходимым и достаточным условием избегания сингулярности в черной дыре является следующее:

$$-\kappa(\tilde{\epsilon} + 3\tilde{p})/2 > 2\sigma^2.$$

Для случая релятивистской спиновой жидкости, $p = \epsilon/3$, это условие эквивалентно следующему:

$$2\kappa\alpha n_f^2 > 2\sigma^2 + \kappa\epsilon. \qquad (32)$$

В отсутствие кручения левая часть неравенства (32) также отсутствует, поэтому оно не может быть удовлетворено, в результате образуется сингулярность. Поэтому наличие кручения является обязательным условием для предотвращения возникновения сингулярности. В отсутствие сдвигов это условие является также достаточным.

Случай наличия сдвигов противоположен случаю наличия кручения. Сдвиговый скаляр σ^2 растет с уменьшением a как $\propto a^{-6}$, т. е. по тому же степенному закону, что и n_f^2. Поэтому, если в начальный момент времени в неравенстве (32) слагаемое, соответствующее сдвигам, преобладало над слагаемым, соответствующим кручению, то оно будет преобладать и на более поздних временах во время сжатии, в результате возникнет сингулярность. Для предотвращения возникновения сингулярности при наличии сдвигов величина n_f^2 должна расти быстрее, чем

$\propto a^{-6}$. Поэтому в черной дыре во время сжатия должны рождаться фермионы.

6. РОЖДЕНИЕ ЧАСТИЦ

Во время сжатия или расширения вселенной темп рождения частиц [33] можно описать феноменологически:

$$\frac{1}{c\sqrt{-g}}\,\frac{d\,(\sqrt{-g}\,n_f)}{dt}=\frac{\beta H^4}{c^4},\qquad(33)$$

где $g=-a^6\sin^4 R\sin^2\theta$ — определитель метрического тензора в (21), а β — безразмерный темп рождения частиц [17]. При рождении частиц второе из уравнений (28) принимает вид

$$\frac{\dot T}{T}=\frac{H}{c}\left(\frac{\beta H^3}{3c^3h_{nf}T^3}-1\right).\qquad(34)$$

Число рожденных частиц $n_f(a)$ описывается степенным законом:

$$n_f\propto a^{-(3+\delta)},\qquad(35)$$

где δ зависит от τ. Подставляя это соотношение в (33), получаем

$$\delta\propto -a^\delta\dot a^3.\qquad(36)$$

Во время сжатия $\dot a<0$, поэтому $\delta>0$. Слагаемое

$$n_f^2\propto a^{-6-2\delta}$$

растет быстрее, чем

$$\sigma^2\propto a^{-6},$$

что препятствует возникновению сингулярности. Рождение частиц и кручение, действуя совместно, обращают знак эффектов сдвига, что приводит к несингулярному отскоку. Динамика формирования несингулярной, релятивистской вселенной в черной дыре описывается уравнениями (29) и (34) с начальными условиями

$$a(0)=(r_0^3/r_g)^{1/2}$$

и

$$\dot a(0)=0,$$

откуда мы получаем функции $a(\tau)$ и $T(\tau)$. Сдвиги должны входить в правую часть уравнения (29) как дополнительное положительное слагаемое, пропорциональное a^{-4}. Когда вселенная становится нерелятивистской, слагаемое $h_\star T^4$ в уравнении (29) становится положительным и пропорциональным a^{-1}. Космологическая постоянная входит в уравнение (29) в виде положительного слагаемого, пропорционального a^2.

Рождение частиц увеличивает максимальный размер масштабного множителя, который достигается при схлопывании. Поэтому каждый новый цикл больше и длительнее, чем предыдущий. Согласно (19), R_0 имеет вид

$$\sin^3 R_0=\frac{r_g}{a(0)},\qquad(37)$$

где $a(0)$ — исходный масштабный множитель, равный максимальному масштабному множителю в первом цикле. Поскольку максимальный масштабный множитель в следующем цикле больше, значение $\sin R_0$ убывает. По мере развития циклов значение R_0 приближается к π.

7. ИНФЛЯЦИЯ И КОНЕЦ ОСЦИЛЛЯЦИЙ

Во время сжатия H отрицательно, а температура T возрастает. Во время расширения, если β слишком велико, то правая часть уравнения (34) должна стать положительной. В этом случае температура должна увеличиваться с ростом a, что должно приводить к постоянной инфляции [17]. Поэтому имеется верхний предел скорости рождения частиц, а именно, максимум функции $(\beta H^3)/(3c^3h_{nf}T^3)$ должен быть меньше 1.

Если после отскока функция $(\beta H^3)/(3c^3h_{nf}T^3)$ в уравнении (34) возрастает до значения чуть меньше 1, то температура T должна оставаться практически постоянной. Соответственно, H также должна быть практически постоянной, а масштабный множитель a должен экспоненциально расти, что соответствует инфляции. Поскольку плотность энергии также должна быть практически постоянной, во вселенной должно образовываться очень большое количество материи и энтропии. Такое расширение должно закончиться, когда правая часть уравнения (34) станет меньше 1. Поэтому инфляция должна закончиться в течение конечного периода времени. После этого влияние кручения ослабевает и вселенная гладко входит в период расширения с преобладанием излучения, за которым следует период с преобладанием материи.

Если вселенная во время расширения не достигает критического размера, при котором космологическая постоянная становится значительной, то она снова коллапсирует до другого отскока и начинается новый цикл осцилляций [36]. Новый цикл оказывается больше и длительнее, чем предыдущий [17, 34].

После конечной последовательности циклов вселенная достигает критического размера, после которого невозможно следующее сжатие, и входит в период расширения с доминированием космологической постоянной, во время которого она расширяется неограниченно. Значение R_0 асимптотически стремится к π, что соответствует максимальному значению R в замкнутой изотропной вселенной в соответствии с выражением (21). Последний отскок, называемый большим отскоком, представляет собой большой взрыв.

8. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Если наша вселенная является замкнутой, то она могла возникнуть как новорожденная вселенная при отскоке внутри родительской черной дыры, существующей в другой вселенной. Эту гипотезу подтверждает проведенный в настоящей работе анализ гравитационного коллапса объекта, состоящего из спиновой жидкости, при наличии кручения и рождения частиц. Более реалистичный сценарий гравитационного коллапса должен рассматривать неоднородную и вращающуюся жидкую сферу. Если давление в сфере неоднородно, то система отсчета не может быть сопутствующей и синхронной [3, 37]. Поэтому ν и температура могут зависеть от R, и тогда уравнения, описывающие коллапс и последующую динамику вселенной, будут более сложными. Для случая вращающейся сферы возникают дополнительные сложности [38], и для формирующейся черной дыры Керра, помимо массы, нужно вводить еще один параметр, а именно, момент импульса [39]. Тем не менее, общий характер влияния кручения и рождения частиц на избегание сингулярности и возникновение отскока в черной дыре остается обоснованным.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке University Research Scholar Program, University of New Haven.

ЛИТЕРАТУРА

1. L. P. Eisenhart, *Non-Riemannian Geometry*, American Mathematical Society (1927); E. Schrödinger, *Space-time Structure*, Cambridge University Press (1954); J. A. Schouten, *Ricci-Calculus*, Springer-Verlag (1954).

2. V. A. Fock, *The Theory of Space, Time and Gravitation*, Macmillan (1964); P. A. M. Dirac, *General Theory of Relativity*, Wiley (1975).

3. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *The Classical Theory of Fields*, Pergamon (1975).

4. F. W. Hehl and J. D. McCrea, Found. Phys. **16**, 267 (1986); N. Popławski, arXiv:1304.0047.

5. E. A. Lord, *Tensors, Relativity and Cosmology*, McGraw-Hill (1976).

6. D. W. Sciama, Proc. Camb. Phil. Soc. **54**, 72 (1958); T. W. B. Kibble, J. Math. Phys. **2**, 212 (1961); D. W. Sciama, in *Recent Developments in General Relativity*, p. 415, Pergamon (1962); Rev. Mod. Phys. **36**, 463 (1964); Rev. Mod. Phys. **36**, 1103 (1964); F. W. Hehl and B. K. Datta, J. Math. Phys. **12**, 1334 (1971); F. W. Hehl, Gen. Relativ. Gravit. **4**, 333 (1973); Gen. Relativ. Gravit. **5**, 491 (1974); F. W. Hehl, P. von der Heyde, G. D. Kerlick, and J. M. Nester, Rev. Mod. Phys. **48**, 393 (1976); V. de Sabbata and M. Gasperini, *Introduction to Gravitation*, World Scientific (1985); V. de Sabbata and C. Sivaram, *Spin and Torsion in Gravitation*, World Scientific (1994).

7. N. J. Popławski, Phys. Lett. B **690**, 73 (2010); Phys. Lett. B **727**, 575 (2013).

8. N. J. Popławski, *Classical Physics*: *Spacetime and Fields*, arXiv:0911.0334.

9. D. E. Neville, Phys. Rev. D **21**, 867 (1980); I. L. Shapiro, Phys. Rep. **357**, 113 (2002).

10. K. Nomura, T. Shirafuji, and K. Hayashi, Prog. Theor. Phys. **86**, 1239 (1991).

11. A. Friedmann, Z. Phys. A **10**, 377 (1922); G. Lemaître, Ann. Soc. Sci. Bruxelles A **53**, 51 (1933); H. P. Robertson, Astrophys. J. **82**, 284 (1935); A. G. Walker, Proc. London Math. Soc. **42**, 90 (1937).

12. F. W. Hehl, Abh. Braunschw. Wiss. Ges. **18**, 98 (1966).

13. A. Trautman, Bull. Acad. Polon. Sci., Serie Sci. Math. Astr. Phys. **20**, 185 (1972); Symp. Math. **12**, 139 (1973); Nature Phys. Sci. **242**, 7 (1973).

14. W. Kopczyński, Phys. Lett. A **39**, 219 (1972); W. Kopczyński, Phys. Lett. A **43**, 63 (1973).

15. F. W. Hehl, P. von der Heyde, and G. D. Kerlick, Phys. Rev. D **10**, 1066 (1974).

16. I. S. Nurgaliev and W. N. Ponomariev, Phys. Lett. B **130**, 378 (1983).

17. N. Popławski, Astrophys. J. **832**, 96 (2016); Int. J. Mod. Phys. D **27**, 1847020 (2018).

18. G. Unger and N. Popławski, Astrophys. J. **870**, 78 (2019).

19. N. J. Popławski, Phys. Lett. B **694**, 181 (2010); Phys. Lett. B **701**, 672 (2011).

20. B. Kuchowicz, Gen. Relativ. Gravit. **9**, 511 (1978); M. Gasperini, Phys. Rev. Lett. **56**, 2873 (1986); Y. N. Obukhov and V. A. Korotky, Class. Quantum Grav. **4**, 1633 (1987); N. J. Popławski, Gen. Relativ. Gravit. **44**, 1007 (2012).

21. N. J. Popławski, Class. Quantum Grav. **31**, 065005 (2014); N. Popławski, Mod. Phys. Lett. A **33**, 1850236 (2018).

22. N. J. Popławski, Phys. Lett. B **687**, 110 (2010); N. Popławski, arXiv:1910.10819; arXiv:1912.02173.

23. W. Handley, arXiv:1908.09139; E. Di Valentino, A. Melchiorri, and J. Silk, Nature Astron. **4**, 196 (2020).

24. I. D. Novikov, J. Exp. Theor. Phys. Lett. **3**, 142 (1966); R. K. Pathria, Nature **240**, 298 (1972); V. P. Frolov, M. A. Markov, and V. F. Mukhanov, Phys. Lett. B **216**, 272 (1989); Phys. Rev. D **41**, 383 (1990); L. Smolin, Class. Quantum Grav. **9**, 173 (1992); S. Hawking, *Black Holes and Baby Universes and other Essays*, Bantam Dell (1993); W. M. Stuckey, Amer. J. Phys. **62**, 788 (1994); D. A. Easson and R. H. Brandenberger, J. High Energ. Phys. **06**, 024 (2001); J. Smoller and B. Temple, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **100**, 11216 (2003).

25. S. Desai and N. J. Popławski, Phys. Lett. B **755**, 183 (2016).

26. N. Popławski, Phys. Rev. D **85**, 107502 (2012); J. Magueijo, T. G. Zlosnik, and T. W. B. Kibble, Phys. Rev. D **87**, 063504 (2013); J. L. Cubero and N. J. Popławski, Class. Quantum Grav. **37**, 025011 (2020).

27. N. J. Popławski, Phys. Rev. D **83**, 084033 (2011).

28. N. Popławski, Found. Phys. **50**, 900 (2020).

29. M. Hashemi, S. Jalalzadeh, and A. H. Ziaie, Eur. Phys. J. C **75**, 53 (2015).

30. R. A. Tolman, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **20**, 169 (1934).

31. J. R. Oppenheimer and H. Snyder, Phys. Rev. **56**, 455 (1939).

32. R. Kantowski and R. K. Sachs, J. Math. Phys. **7**, 443 (1966); R. W. Brehme, Am. J. Phys. **45**, 423 (1977); N. Popławski, arXiv:2007.11556.

33. L. Parker, Phys. Rev. Lett. **21**, 562 (1968); Phys. Rev. **183**, 1057 (1969); Y. B. Zeldovich, J. Exp. Theor. Phys. Lett. **12**, 307 (1970); L. Parker, Phys. Rev. D **3**, 346 (1971); Phys. Rev. D **3**, 2546 (1971); Y. B. Zeldovich and A. A. Starobinskii, J. Exp. Theor. Phys. Lett. **26**, 252 (1977); V. A. Beilin, G. M. Vereshkov, Y. S. Grishkan, N. M. Ivanov, V. A. Nesterenko, and A. N. Poltavtsev, J. Exp. Theor. Phys. **51**, 1045 (1980).

34. J. D. Barrow and M. P. Dąbrowski, Mon. Not. Roy. Astron. Soc. **275**, 850 (1995); J. D. Barrow and C. Ganguly, Int. J. Mod. Phys. D **26**, 1743016 (2017).

35. N. Popławski, Gen. Relativ. Gravit. **46**, 1625 (2014).

36. H. Bondi, *Cosmology*, Cambridge University Press, (1960); J. D. North, *The Measure of the Universe*, Clarendon Press (1965).

37. E. M. Lifshitz and I. M. Khalatnikov, J. Exp. Theor. Phys. **12**, 108 (1961).

38. A. G. Doroshkevich, Y. B. Zel'dovich, and I. D. Novikov, J. Exp. Theor. Phys. **22**, 122 (1966).

39. R. P. Kerr, Phys. Rev. Lett. **11**, 237 (1963).

ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 3, стр. 457–472

УСТОЙЧИВОСТЬ И ДИНАМИКА РЕГУЛЯРНЫХ ГРАВАСТАРОВ С ТОНКОЙ ОБОЛОЧКОЙ

М. Шариф [*], *Ф. Джавед* [**]

Department of Mathematics, University of the Punjab
Lahore-54590, Pakistan

Поступила в редакцию 28 октября 2020 г.,
после переработки 25 ноября 2020 г.
Принята к публикации 25 ноября 2020 г.

(Перевод с английского)

STABILITY AND DYNAMICS

OF REGULAR THIN-SHELL GRAVASTARS

M. Sharif, F. Javed

Исследуются устойчивые и динамические конфигурации гравастаров с тонкой оболочкой на основе сшивания внешнего (черные дыры Хейворда и черные дыры Хейворда – анти-де Ситтера) и внутреннего (черные дыры де Ситтера) пространства-времени. На тонкой оболочке эти два пространства-времени связываются с помощью "cut and paste" техники Виссера. Плотность поверхностной энергии, материя и давление описываются уравнениями Ланцоша. Для исследования устойчивости гравастаров рассмотрены экранированные области, для этого использовалось радиальное возмущение для равновесного радиуса оболочки. Динамика на тонкой оболочке рассмотрена как для безмассовых, так и для массивных скалярных полей с использованием уравнений движения и уравнений Клейна – Гордона. В случае скалярного поля гравастары с тонкой оболочкой могут демонстрировать коллапс и расширение в зависимости от радиуса оболочки, скорости его изменения и эффективного потенциала. Оказалось, что устойчивые области оболочки гравастара уменьшаются, при этом динамические конфигурации (коллапс и расширение) увеличиваются с ростом космологической постоянной.

DOI: 10.31857/S004445102103007X

1. ВВЕДЕНИЕ

Черная дыра (ЧД) образуется в результате гравитационного коллапса массивной звезды под действием ее гравитационных сил. Такие области пространства-времени нельзя в полной мере наблюдать из-за существования горизонта событий и центральной сингулярности. В центральной сингулярности массовая плотность и кривизна пространства-времени становятся бесконечными, поэтому общая теория относительности не описывает геометрической структуры черных дыр. В работе [1] получено точное решение полевых уравнений, представляющее ЧД с регулярным центром, названное регулярной ЧД. В работе [2] концепция регулярных ЧД была расширена введением нелинейного электрического поля. Некоторые другие модели регулярных ЧД также были предложены в работах [3–6]. Для более полного исследования ЧД требуется альтернативая модель, в которой отсутствовали бы центральная сингулярность и горизонт событий и была бы получена устойчивая конфигурация для некоторого конкретного выбора распределения материи.

В 2001 г. Мазур и Моттола в работе [7] предположили, что фазовый переход предотвращает коллапс звезды, а также предложили концепцию звезды гравитационного вакуума (гравастара). Грава-

[*] E-mail: msharif.math@pu.edu.pk
[**] E-mail: faisalrandawa@hotmail.com

стары являются аналогами ЧД, однако они не имеют ни сингулярности, ни горизонта событий. Такие звездные объекты можно было бы использовать для описания той роли, которую темная энергия играет в ускорении расширения вселенной. Кроме того, это могло бы объяснить, почему некоторые галактики имеют низкую или высокую концентрацию темной материи. Модель гравастара можно описывать с помощью трех различных областей с соответствующими уравнениями состояния (УС), а именно, внешняя область ($r_2 < r$) с $p = 0 = \sigma$, внутренняя область ($0 \le r < r_1$) с $\sigma = -p > 0$ и промежуточная область ($r_1 < r < r_2$) с $p = \sigma$, где σ, p и $r_1 - r_2$ — плотность поверхностной энергии, давление и толщина оболочки, соответственно. Как можно видеть, внутренняя область соответствует геометрии де Ситтера (DS) с материей, имеющей постоянную положительную плотность энергии и отрицательное давление, что связано с вакуумым решением Шварцшильда через промежуточную область.

Промежуточная область, толщина которой определяется тонким слоем материальной поверхности, существенно влияет на динамическую конфигурацию. Эта область, также известная как тонкая оболочка, состоит из жестко распределенной материи. Существование материальной поверхности, образующей оболочку определенного радиуса, имеет большое значение для поддержания устойчивой конфигурации тонкой оболочки, при этом возникает сильное давление, достаточное для того, чтобы преодолеть влияние гравитационных сил. Компоненты тензора энергии-импульса можно получить, используя формализм, предложенный в работе [8]. Метод “cut and paste” Виссера предлагает общий формализм, позволяющий соединять внешнюю и внутреннюю геометрию на тонкой оболочке. Мазур и Моттола также использовали этот подход для построения гравастаров с тонкой оболочкой, сшивая внешнее пространство-время в виде ЧД Шварцшильда и внутреннее в виде многообразия DS. Этот подход очень полезен, если нужно избежать возникновения горизонта событий и сингулярности в геометрии гравастаров [9]. В работах [10–16] метод “cut and paste” использовался для объяснения кротовых нор с тонкой оболочкой, образованных из двух эквивалентных копий ЧД.

Новые результаты по исследованию гравастаров, полученные с использованием различных подходов, представлены в целом ряде работ. В работе [17] исследовалась динамическая устойчивость гравастаров с тонкой оболочкой с использованием метода “cut and paste” для внешней и внутренний геометрии. Было получено, что гравастары с тонкой оболочкой становятся устойчивыми при подходящем выборе УС для переходных слоев. В работе [18] были построены гравастары для случая ЧД DS или анти-DS (ADS) в качестве внутреннего пространства-времени и ЧД Шварцшильда–ADS или Райснера – Нордстрема (РН) в качестве внешнего. В этой работе также исследовались устойчивые решения для гравастаров с использованием УС. В работе [19] были введены два типа теоретических гравастаров для пространства-времени РН и исследовалась роль заряда в устойчивости конфигурации гравастаров. В работе [20] исследовались гравастары с тонкой оболочкой в присутствии электромагнитного поля и была определена их энтропия. В работе [21] рассматривался гравастар с использованием ЧД в мире на бране в качестве внешнего многообразия.

В работе [22] была построена динамическая модель прототипа гравастаров, заполненных фантомной энергией. В этой работе исследовались гравастары с тонкой оболочкой с внешним пространством-временем Вайдьи, заполненные идеальной жидкостью. Было получено, что при различных распределениях материи на тонкой оболочке такая структура может представлять собой ЧД, а также устойчивый или неустойчивый гравастар или частичный (“bounded excursion”) гравастар. В работе [23] в рамках подхода Чандрасекара исследовались гравастары с непрерывным давлением, а также было получено УС для статического случая. В работе [24] было предложено существование гравастара с тонкой оболочкой в размерности $(2 + 1)$ и исследована его энтропия, длина, а также различные энергетические условия. В работе [25] исследовалось влияние различных физических характеристик на точные решения для некоммутативных гравастаров и анализировались устойчивые конфигурации переходого слоя. В этой работе было показано, что тонкая оболочка является устойчивой вблизи ожидаемого горизонта событий. В работе [26] с использованием радиальных возмущений исследовалась устойчивость некоммутативных гравастаров с тонкой оболочкой и были получены области устойчивости. Недавно авторами настоящей работы были исследованы гравастары с тонкой оболочкой, получающиеся при сшивании внутреннего пространства-времени ЧД DS с внешним пространством-временем ЧД Бардина и Бардина–DS [27]. Оказалось, что области устойчивости увеличиваются при увеличении космологической постоянной и убывают при возрастании заряда во внешнем пространстве-времени.

Скалярное поле играет важную роль при исследованиях различных астрофизических явлений, динамики кластеров и вообще в теоретической физике. В работе [28] была введена концепция электромагнитно-гравитационной сущности, названной геоном. В этой работе было предложено частице-подобное решение на основе взаимодействия гравитационного и классического электромагнитного поля, удерживаемое в ограниченной области гравитационным притяжением энергии своего собственного поля. В работе [29] исследовались решения полевых уравнений для ЧД Шварцшильда в случае скалярного поля. В работе [30] исследовались геометрические характеристики комплексного массивного скалярного поля. В работе [31] рассматривалась динамика и устойчивость бозонных звезд и были получены устойчивые решения для различных значений скалярного поля. В работе [32] исследовалась сферическая геометрия в случае безмассового скалярного поля.

В работе [33], с использованием метода “cut and paste” для двух эквивалентных копий ЧД Шварцшильда, обсуждалась динамика тонких оболочек в случае безмассового и массивного скалярных полей. Было получено, что в безмассовом случае тонкая оболочка демонстрирует коллапс, расширение и седловые точки, в то время как в случае массивного скалярного поля оболочка демонстрирует только коллапс. В работе [34] рассматривались тонкие оболочки в случае безмассового и массивного скалярных полей для черных дыр РН и было показано, что коллапс оболочки имеет место только в случае массивного скалярного поля. В работе [35] обсуждались расширение и коллапс тонкой оболочки в случае скалярного поля для регулярных ЧД. Недавно авторы исследовали динамическую эволюцию тонкой оболочки в случае скалярного поля для различных вращающихся регулярных ЧД и ЧД BTZ (Bañados, Teitelboim, Zanelli). Кроме того, рассматривались тонкие оболочки для d-мерных ЧД в случае безмассового и массивного скалярых полей [36]. В работе [37] в случае скалярного поля рассматривалась динамика тонкой оболочки, сформированной внутренней и внешней копиями черных дыр в мире на бране.

В настоящей работе рассмотрены стабильные и динамические конфигурации гравастаров с тонкой оболочкой для многообразий Хейворда и Хейворда–ADS в качестве внешнего пространства-времени и многообразия DS в качестве внутреннего пространства-времени. Работа построена следующим образом. В разд. 2 предлагается общий метод исследования гравастаров с тонкой оболочкой. В разд. 3 рассматривается устойчивость тонкой оболочки при наличии радиального возмущения. В разд. 4 рассматривается динамическая эволюция тонкой оболочки в случае безмассового и массивного скалярных полей. В последнем разделе обобщаются полученные результаты.

2. ИССЛЕДОВАНИЕ ГРАВАСТАРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО ФОРМАЛИЗМА

В данном разделе представлен общий подход к исследованию гравастаров с использованием метода “cut and paste”. Пусть внешняя геометрия соответствует ЧД Хейворда–ADS, а внутренняя — многообразию DS. Используя формализм Израэля и уравнения Ланцоша, получим уравнения движения для случая тонкой оболочки. Соответствующий линейный элемент для внешней (Υ^+) и внутренней (Υ^-) геометрий имеет вид [5]

$$ds^2_\pm = -\Pi_\pm(r_\pm)dt^2_\pm + \Pi^{-1}_\pm(r_\pm)dr^2_\pm + \\ + r^2_\pm(d\theta^2_\pm + \sin^2\theta_\pm d\phi^2_\pm), \quad (1)$$

где $\Pi_-(r_-) = 1 - r^2_-/\alpha^2$, α — ненулевая постоянная. Явный вид внешней метрической функции определяет различные регулярные ЧД. Метрическая функция ЧД Хейворда–ADS равна [5]

$$\Pi_+(r_+) = 1 - \frac{2r^2_+ m}{r^3_+ + Q^3} - \frac{\Lambda r^2_+}{3},$$

где m — масса ЧД, а Λ — космологическая постоянная. Физический параметр Q связан с полным магнитным зарядом ЧД. В отсутствие Λ получаем ЧД Хейворда, метрическая функция которой равна [2]

$$\Pi_+(r_+) = 1 - \frac{2r^2_+ m}{r^3_+ + Q^3},$$

при этом, если и Q, и Λ становятся равными нулю, мы получаем метрическую функцию ЧД Шварцшильда.

Чтобы построить геометрию гравастаров с тонкой оболочкой, требуется сшить внешнее и внутреннее пространство-время на гиперповерхности

$$\partial\Upsilon = r = h = \eta,$$

используя метод “cut and paste”. Таким образом, мы получим новое многообразие

$$\Upsilon = \Upsilon^- \cup \Upsilon^+$$

с минимальной площадью поверхности $\partial\Upsilon$. Сшивание внешнего и внутреннего пространства-времени для минимальной площади поверхности соответствует случаю тонкой оболочки. Радиус оболочки ($h = h(\tau)$, где τ — собственное время) должен быть больше горизонта событий r_h, чтобы рассматриваемая структура не ушла за горизонт событий, а также чтобы не возникло сингулярности в пространстве-времени. Координаты $\partial\Upsilon$ можно определить как

$$\xi^i = (\tau, \theta, \phi),$$

тогда соответствующий линейный элемент имеет вид

$$ds^2 = -d\tau^2 + h(\tau)^2 d\theta^2 + h(\tau)^2 \sin^2\theta d\phi^2.$$

Векторы $n^\alpha_\pm$, нормальные к $\Upsilon^\pm$, определяются как

$$n^\mu_+ = \left(\frac{\dot h}{1 - \dfrac{2h^2 m}{h^3+Q^3} - \dfrac{\Lambda h^2}{3}}, \sqrt{1 - \frac{2h^2 m}{h^3+Q^3} - \frac{\Lambda h^2}{3} + \dot h^2}, 0, 0\right), \quad (2)$$

$$n^\mu_- = \left(\frac{\dot h}{1 - \dfrac{h^2}{\alpha^2}}, \sqrt{1 - \frac{h^2}{\alpha^2} + \dot h^2}, 0, 0\right), \quad (3)$$

где $\dot h = dh/d\tau$.

Материальная поверхность на оболочке данного радиуса обуславливает разрыв внешней кривизны $K^{i\pm}_j$. Математически компоненты внешней кривизны для обеих геометрий записываются следующим образом:

$$K^{\tau+}_\tau = \frac{\dfrac{2mh\left(h^3 - 2Q^3\right)}{\left(Q^3+h^3\right)^2} + \dfrac{16\pi\Lambda h}{3} + 2\ddot h}{\sqrt{1 - \dfrac{2h^2 m}{h^3+Q^3} - \dfrac{\Lambda h^2}{3} + \dot h^2}}, \quad (4)$$

$$K^{\theta+}_\theta = \frac{1}{h}\sqrt{1 - \frac{2h^2 m}{h^3+Q^3} - \frac{\Lambda h^2}{3} + \dot h^2}, \quad (5)$$

$$K^{\tau-}_\tau = \frac{-\dfrac{2h}{\alpha^2} + 2\ddot h}{\sqrt{1 - \dfrac{h^2}{\alpha^2} + \dot h^2}}, \quad (6)$$

$$K^{\theta-}_\theta = \frac{1}{h}\sqrt{1 - \frac{h^2}{\alpha^2} + \dot h^2}, \quad (7)$$

$$K^{\phi\pm}_\phi = \sin^2\theta K^{\theta\pm}_\theta. \quad (8)$$

Если

$$K^+_{ij} - K^-_{ij} \neq 0,$$

то на $\partial\Upsilon$ присутствует тонкий слой материи. Компоненты тензора энергии-импульса S^i_j такой материальной поверхности определяются уравнениями Ланцоша. Их можно выразить как

$$S^i_j = -\frac{1}{8\pi}\{[K^i_j] - \delta^i_j K\}, \quad (9)$$

где $[K^i_j] = K^{+i}_j - K^{-i}_j$ и $K = \mathrm{tr}[K_{ij}] = [K^i_j]$. Приведенное выше уравнение в терминах распределения идеальной жидкости принимает вид

$$S^i_j = v^i v_j\,(p+\sigma) + p\delta^i_j, \quad (10)$$

где v_i — компоненты скорости изменения радиуса тонкой оболочки, σ — плотность поверхностной энергии, а p — поверхностное давление. Радиус-вектор на гиперповерхности можно выразить как

$$x^i = (\tau, \theta, \phi),$$

а скорость — как

$$v^i = \frac{dx^i}{d\tau} = (1, 0, 0).$$

Пусть $r = h(\tau)$ — радиальная координата пространства-времени ЧД на гиперповерхности. Тогда радиус оболочки зависит от собственного времени τ и можно записать

$$\dot h = \frac{dh}{d\tau}.$$

Это — производная радиуса горловины по собственному времени, которая обычно определяет устойчивые и динамические конфигурации тонкой оболочки. Не имеется прямого соотношения, связывающего между собой v^i и $\dot h$. Здесь $\dot h$ — скорость изменения радиуса горловины по отношению к собственному времени, а v^i — скорость частицы, движущейся над гиперповерхностью.

Из уравнений(3) и (4) получаем выражения для σ и p:

$$\sigma = -\frac{1}{4\pi h}\left\{\sqrt{\dot h^2 + 1 - \frac{2h^2 m}{h^3+Q^3} - \frac{\Lambda h^2}{3}} - \sqrt{\dot h^2 + 1 - \frac{h^2}{\alpha^2}}\right\}, \quad (11)$$

$$p=\frac{1}{8\pi h}\times$$
$$\times\left\{\frac{2\dot h^2+2h\ddot h-\dfrac{2mh^2\left(4Q^3+h^3\right)}{\left(Q^3+h^3\right)^2}+\dfrac{32}{3}\pi\Lambda h^2+2}{\sqrt{\dot h^2+1-\dfrac{2h^2m}{h^3+Q^3}-\dfrac{\Lambda h^2}{3}}}-\right.$$
$$\left.-\frac{2\dot h^2+2h\ddot h+2-\dfrac{4h^2}{\alpha^2}}{\sqrt{\dot h^2+1-\dfrac{h^2}{\alpha^2}}}\right\}. \quad (12)$$

Уравнение движения, описывающее динамические и устойчивые конфигурации гравастаров с тонкой оболочкой, можно получить, перегруппировав уравнение (5). Его можно записать в виде

$$\dot h^2+\Omega(h)=0, \quad (13)$$

где $\Omega(h)$ — потенциальная функция рассматриваемой структуры:

$$\Omega(h)=-\frac{\chi(h)^2}{64\pi^2h^2\sigma^2}+\frac{1}{2}\lambda(h)-4\pi^2h^2\sigma^2, \quad (14)$$

для простоты мы ввели обозначения $\chi(h)$ и $\lambda(h)$:

$$\chi(h)=\Pi_-(h)-\Pi_+(h),\quad \lambda(h)=\Pi_-(h)+\Pi_+(h).$$

Теперь предположим, что $\dot h$ и $\ddot h$ обращаются в нуль для равновесного радиуса оболочки, h_0, тогда при $h=h_0$ движение оболочки в радиальном направлении прекращается. Соответствующие значения поверхностного напряжения при $h=h_0$ принимают вид

$$\sigma_0=-\frac{1}{4\pi h_0}\left\{\sqrt{1-\frac{2h_0^2m}{h_0^3+Q^3}-\frac{\Lambda h_0^2}{3}}-\sqrt{1-\frac{h_0^2}{\alpha^2}}\right\}, \quad (15)$$

$$p_0=\frac{1}{8\pi h_0}\left\{\frac{-\dfrac{2mh_0^2\left(4Q^3+h_0^3\right)}{\left(Q^3+h_0^3\right)^2}+\dfrac{32}{3}\pi\Lambda h_0^2+2}{\sqrt{1-\dfrac{2h_0^2m}{h_0^3+Q^3}-\dfrac{\Lambda h_0^2}{3}}}-\right.$$
$$\left.-\frac{2-\dfrac{4h_0^2}{\alpha^2}}{\sqrt{1-\dfrac{h_0^2}{\alpha^2}}}\right\}. \quad (16)$$

В следующем разделе мы рассмотрим влияние физических параметров на области устойчивости оболочки гравастара при линеаризованном радиальном возмущении. Кроме того, мы рассмотрим влияние скалярного поля на динамическую конфигурацию оболочки.

3. АНАЛИЗ УСТОЙЧИВОСТИ

В данном разделе мы рассмотрим устойчивые конфигурации гравастаров с тонкой оболочкой с возмущением вдоль радиального направления относительно равновесного радиуса оболочки $h=h_0$. Закон сохранения в терминах σ и p принимает вид

$$p\frac{d}{d\tau}(4\pi h^2)+\frac{d}{d\tau}(\mathcal{M})=0, \quad (17)$$

где $\mathcal{M}=4\pi h^2\sigma$ — распределение полной массы на тонкой оболочке. Приведенное выше уравнение можно переписать как

$$\sigma'=-\frac{2}{h}(p(\sigma)+\sigma). \quad (18)$$

Для исследования устойчивых конфигураций с возмущением вдоль радиального направления используем разложение $\Omega(h)$ в ряд Тейлора вблизи равновесного радиуса оболочки h_0:

$$\Omega(h)=\Omega(h_0)+\Omega'(h_0)(h-h_0)+$$
$$+\frac{1}{2}\Omega''(h_0)(h-h_0)^2+O[(h-h_0)^3].$$

Получаем

$$\Omega(h_0)=0=\Omega'(h_0),$$

тогда приведенное выше уравнение принимает вид

$$\Omega(h)=\frac{1}{2}(h-h_0)^2\Omega''(h_0). \quad (19)$$

Соответственно, вторая производная $\Omega(h)$ при $h==h_0$ равна

$$\Omega''(h_0)=\frac{2\mathcal{M}(h_0)\mathcal{M}'(h_0)}{h_0^3}-\frac{h_0^2\chi(h_0)\chi''(h_0)}{2\mathcal{M}(h_0)^2}+$$
$$+\frac{2h_0^2\chi(h_0)\mathcal{M}'(h_0)\chi'(h_0)}{\mathcal{M}(h_0)^3}-\frac{\mathcal{M}'(h_0)^2}{2h_0^2}-\frac{h_0^2\chi'(h_0)^2}{2\mathcal{M}(h_0)^2}-$$
$$-\frac{3h_0^2\chi(h_0)^2\mathcal{M}'(h_0)^2}{2\mathcal{M}(h_0)^4}-\frac{2h_0\chi(h_0)\chi'(h_0)}{\mathcal{M}(h_0)^2}+$$
$$+\frac{\lambda''(h_0)}{2}-\frac{3\mathcal{M}(h_0)^2}{2h_0^4}+\frac{h_0^2\chi(h_0)^2\mathcal{M}''(h_0)}{2\mathcal{M}(h_0)^3}-$$
$$-\frac{\mathcal{M}(h_0)\mathcal{M}''(h_0)}{2h_0^2}-\frac{\chi(h_0)^2}{2\mathcal{M}(h_0)^2}+$$
$$+\frac{2h_0\chi(h_0)^2\mathcal{M}'(h_0)}{\mathcal{M}(h_0)^3}. \quad (20)$$

Для исследования областей устойчивости рассматриваемой структуры мы использовали общее представление для поверхностного давления как

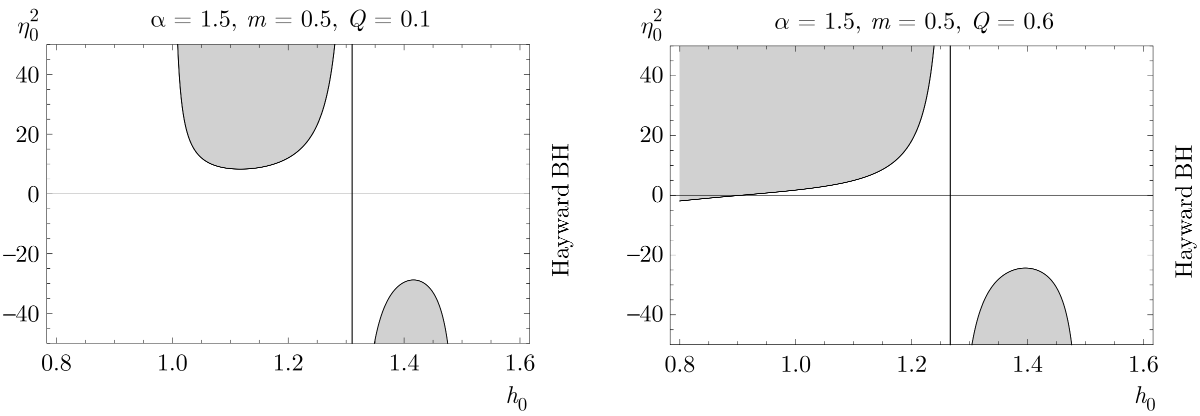


Рис. 1. Области устойчивости для гравастаров с тонкой оболочкой для ЧД Хейворда при различных значениях Q

функции плотности поверхностной энергии, это также было рассмотрено в работах [25–27]. Для исследования устойчивости гравастаров с тонкой оболочкой полезно также выбрать конкретный вид УС. Здесь мы рассмотрим зависимость поверхностного давления от плотности поверхностной энергии для оболочки гравастара только в общем виде, т. е. $p = p(\sigma)$. Параметр в уравнении состояния для равновесного радиуса оболочки можно выразить как

$$\eta_0^2 = dp/d\sigma|_{h=h_0}.$$

Соответственно, первая и вторая производные полной массы по h при $h = h_0$ имеют вид

$$\mathcal{M}'(h_0) = -8\pi h_0 p_0,$$

$$\mathcal{M}''(h_0) = -8\pi p_0 + 16\pi\eta_0^2(\sigma_0 + p_0).$$

Поскольку эти выражения зависят от параметра УС, вторая производная потенциальной функции по радиусу оболочки также зависит от η_0^2.

Будем исследовать устойчивость гравастаров с тонкой оболочкой, используя вторую производную эффективного потенциала при $h = h_0$. Известно, что если $\Omega''(h_0) < 0$, то тонкая оболочка обладает неустойчивой конфигурацией, если $\Omega''(h_0) > 0$ — устойчивой, а если $\Omega''(h_0) = 0$, то об устойчивости ничего сказать нельзя [38]. Поскольку мы исследуем области устойчивости с помощью второй производной $\Omega''(h_0)$, уравнение (16) можно записать как

$$\Omega''(h_0) > 0 \quad \Rightarrow \quad \Upsilon(h_0)\eta_0^2 - B(h_0) > 0. \qquad (21)$$

Здесь $B(h_0) = B_0$ и $\Upsilon(h_0) = \Upsilon_0$ обозначают выражения, в которые не входит параметр УС η_0^2. Чтобы охарактеризовать области устойчивости гравастаров с тонкой оболочкой, можно записать

(i) Если $\Upsilon_0 < 0$, то $\eta_0^2 < B_0/\Upsilon_0$.
(ii) Если $\Upsilon_0 > 0$, то $\eta_0^2 > B_0/\Upsilon_0$.
Здесь

$$\begin{aligned}\Upsilon_0 = {} & (4\sigma_0 p_0 + 4\sigma_0^2) \times \\ & \times \left(-256\pi^4 h_0 + (\Pi_-(h_0) - \Pi_+(h_0))^2)^4\sigma_0^4\right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}B_0 = {} & -\left(4p_0^2 + 6p_0\sigma_0 + 3\sigma_0^2\right) 256\pi^4 h_0^4\sigma_0^4 + \\ & + h_0\sigma_0 \left(h_0\sigma_0 \left(\Pi_-(h_0)'' \left(16\pi^2 h_0^2\sigma_0^2 \ - \right.\right.\right. \\ & - \Pi_-(h_0) + \Pi_+(h_0)) + \Pi_+(h_0)'' \times \\ & \times \left(\Pi_-(h_0) + 16\pi^2 h_0^2\sigma_0^2 - \Pi_+(h_0)\right)) + \\ & + 2\Pi_-(h_0)' \left(h_0\sigma_0\Pi_+(h_0)' - 2(\Pi_-(h_0) - \Pi_+(h_0)) \times \right. \\ & \times (2p_0 + \sigma_0)) - h_0\sigma_0 \left(\Pi_-(h_0)'\right)^2 - h_0\sigma_0 \left(\Pi_+(h_0)'\right)^2 + \\ & + 4\Pi_+(h_0)'(2p_0 + \sigma_0) \left(\Pi_-(h_0) \ - \ \Pi_+(h_0)\right)) - \\ & - \left(12p_0^2 + 10p_0\sigma_0 + \sigma_0^2\right)\Pi_-(h_0)^2 + 2\Pi_-(h_0) \times \\ & \times \left(12p_0^2 + \sigma_0^2 \ + \ 10p_0\sigma_0\right)\Pi_+(h_0) - \Pi_+(h_0)^2 \times \\ & \times \left(12p_0^2 + 10p_0\sigma_0 + \sigma_0^2\right).\end{aligned}$$

Для исследования областей устойчивости рассматриваемых структур проанализируем графики зависимостей B_0/Υ_0 и η_0^2. Области устойчивости для гравастаров с тонкой оболочкой при различных значениях физических параметров показаны на рис. 1 и 2 темным цветом, при этом светлые области соответствуют неустойчивым конфигурациям. Как видно на рис. 1 и 2, размер областей устойчивости для гравастаров с тонкой оболочкой в случае ЧД Хейворда увеличивается как с ростом заряда, так и с ростом массы ЧД. Изменение физических параметров внутреннего пространства-времени DS оказывает существенное влияние на области устойчивости гравастаров с тонкой оболочкой. Оказалось, что чем больше значение α, тем больше области устойчивости (см. рис. 3). При этом для гравастаров с тонкой

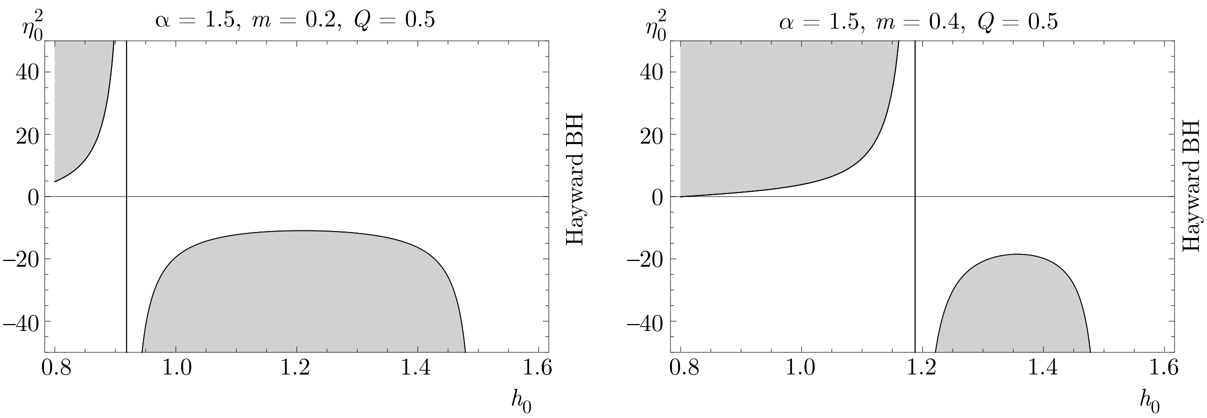


Рис. 2. Области устойчивости для гравастаров с тонкой оболочкой для ЧД Хейворда при различных значениях m

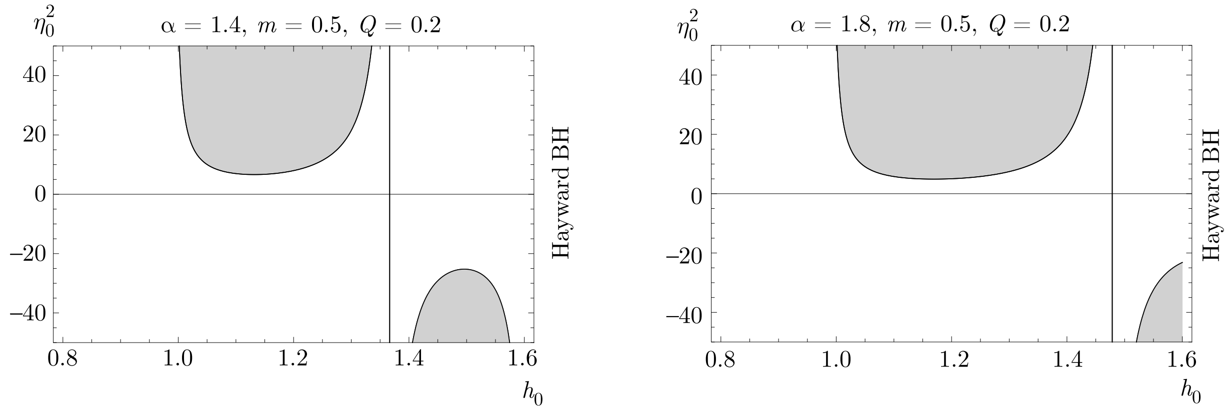


Рис. 3. Области устойчивости для гравастаров с тонкой оболочкой для ЧД Хейворда при различных значениях α

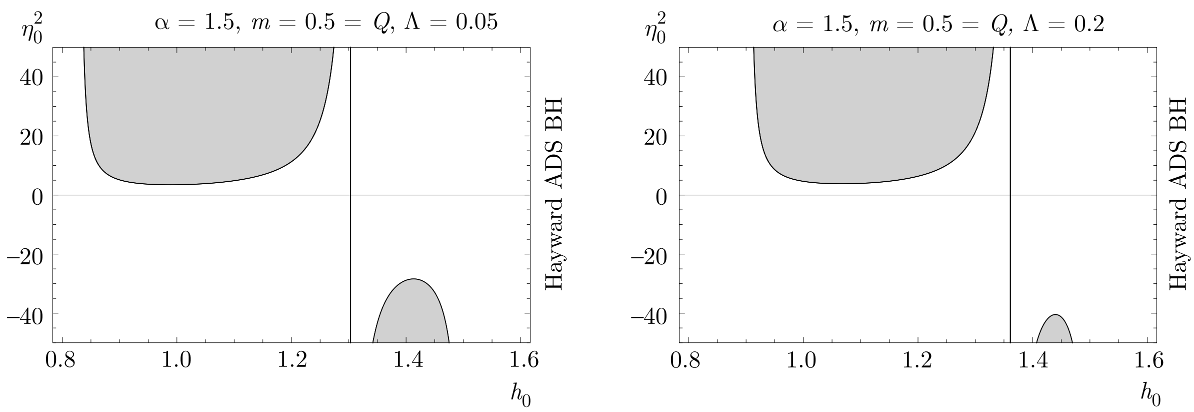


Рис. 4. Области устойчивости для гравастаров с тонкой оболочкой для ЧД Хейворда при различных значениях Λ

оболочкой для ЧД Хейворда–ADS при возрастании Λ области устойчивости уменьшаются (см. рис. 4). Можно сказать, что для гравастаров с тонкой оболочкой области устойчивости различны для различных случаев внешнего пространства-времени, области устойчивости для ЧД Шварцшильда больше областей устойчивости для ЧД Шварцшильд ADS, а области устойчивости для ЧД Хейворда больше областей устойчивости для ЧД Хейворда ADS (см. рис. 5).

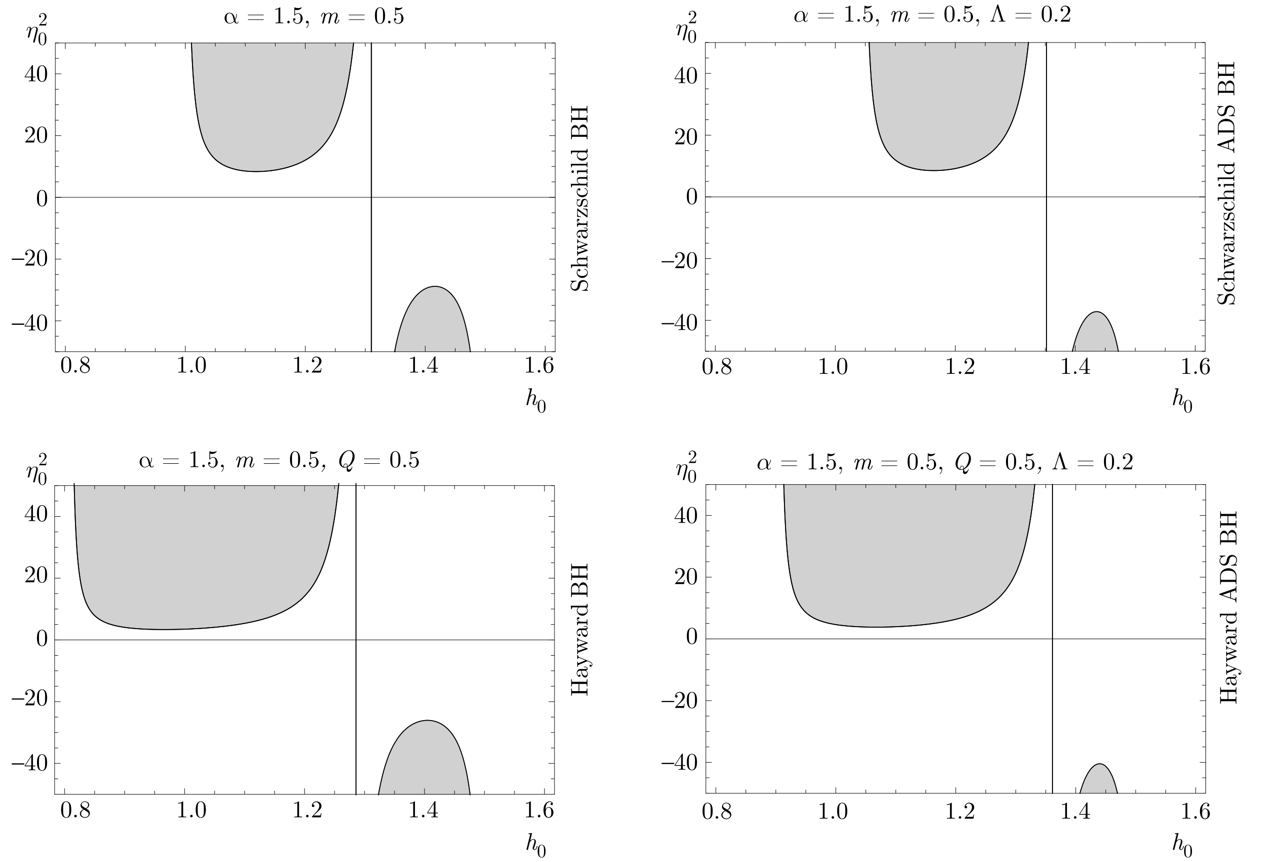


Рис. 5. Области устойчивости для гравастаров с тонкой оболочкой при различном выборе внешнего пространства-времени при $m = 0.5$

4. ДИНАМИКА ГРАВАСТАРОВ С ТОНКОЙ ОБОЛОЧКОЙ

В данном разделе мы исследуем эффективный потенциал и скорость изменения радиуса оболочки рассматриваемой структуры, которые обеспечивают динамику в виде коллапса, расширения и седловых точек. Ниже мы получим соответствующие выражения для скорости и эффективного потенциала для гравастаров с тонкой оболочкой для случаев ЧД Хейворда и ЧД Хейворда ADS в терминах массы оболочки.

A. Черная дыра Хейворда

Скорость изменения радиуса оболочки (уравнение движения) для гравастаров с тонкой оболочкой для случая ЧД Хейворда имеет вид

$$\dot{h} = \pm \left\{ \frac{\mathcal{M}^2}{4h^2} + \frac{h^6\left(\dfrac{6m}{h^3+Q^3} - \dfrac{3}{\alpha^2}\right)^2}{36\mathcal{M}^2} + \frac{h^2}{2}\left(\frac{2m}{h^3+Q^3} + \frac{1}{\alpha^2}\right) - 1 \right\}^{1/2}. \quad (22)$$

Соответствующая потенциальная функция материальной поверхности на тонкой оболочке имеет вид

$$\Omega_h(h) = 1 - \frac{\mathcal{M}^2}{4h^2} - \frac{h^6\left(\dfrac{6m}{h^3+Q^3} - \dfrac{3}{\alpha^2}\right)^2}{36\mathcal{M}^2} - \frac{h^2}{2}\left(\frac{2m}{h^3+Q^3} - \frac{1}{\alpha^2}\right). \quad (23)$$

B. Черная дыра Хейворда ADS

Скорость изменения радиуса оболочки (уравнение движения) для гравастаров с тонкой оболочкой для случая ЧД Хейворда–ADS имеет вид

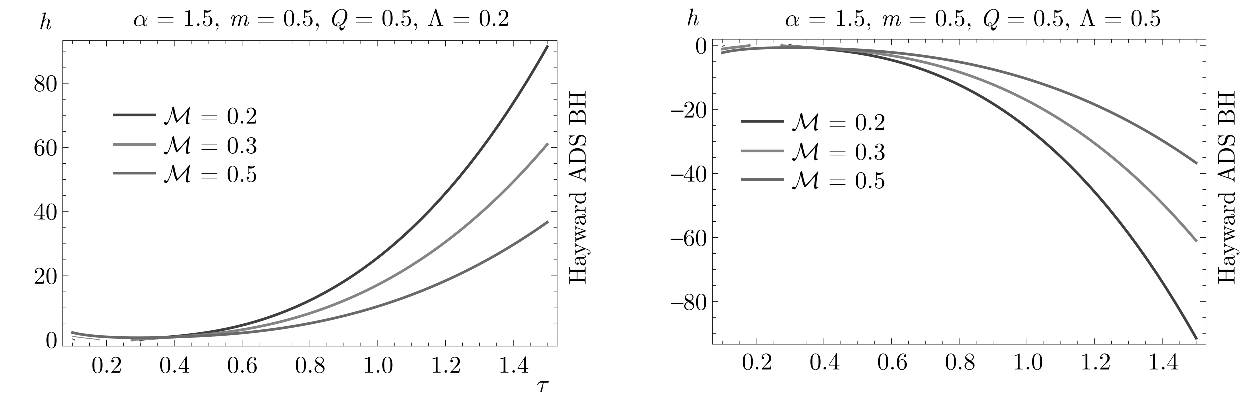


Рис. 6. Динамика гравастаров с тонкой оболочкой, а именно, расширение (левая панель) и коллапс (правая панель) при различном поведении скорости изменения радиуса оболочки для различных значений $\mathcal{M}$

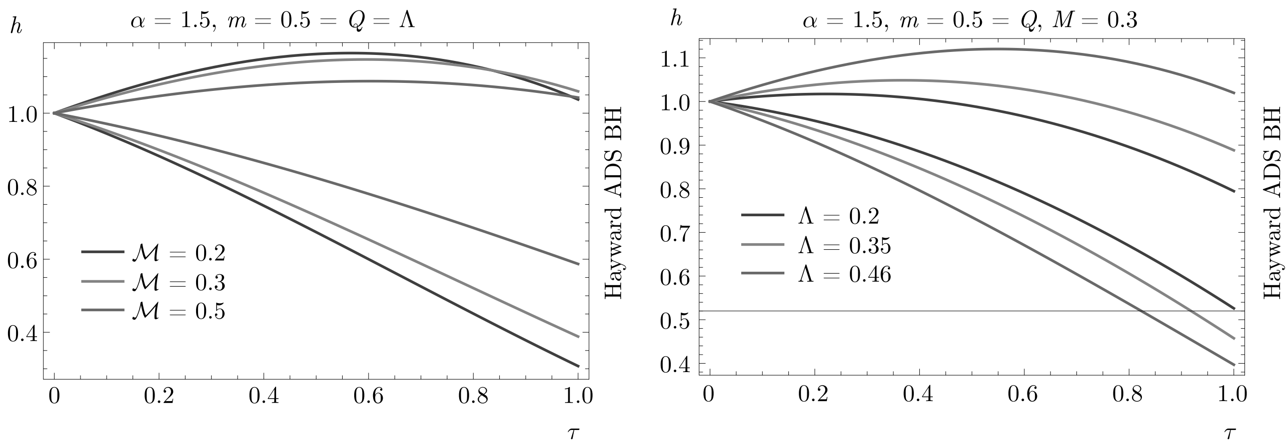


Рис. 7. Динамика гравастаров с тонкой оболочкой, а именно, зависимости радиуса оболочки h от τ при $h(0) = 1$ для различных значений $\mathcal{M}$ (левая панель) и Λ (правая панель)

$$\dot{h} = \pm \left\{ \frac{\mathcal{M}^2}{4h^2} + \frac{h^6 \left(\dfrac{6m}{h^3+Q^3} - \dfrac{3}{\alpha^2} + \Lambda \right)^2}{36\mathcal{M}^2} + \right.$$
$$\left. + \frac{h^2}{6} \left(\frac{6m}{h^3+Q^3} + \frac{3}{\alpha^2} + \Lambda \right) - 1 \right\}^{1/2}. \quad (24)$$

Соответствующая потенциальная функция материальной поверхности на тонкой оболочке имеет вид

$$\Omega_{hads}(h) = 1 - \frac{\mathcal{M}^2}{4h^2} - \frac{h^6 \left(\dfrac{6m}{h^3+Q^3} - \dfrac{3}{\alpha^2} + \Lambda \right)^2}{36\mathcal{M}^2} -$$
$$- \frac{h^2}{6} \left(\frac{6m}{h^3+Q^3} + \frac{3}{\alpha^2} + \Lambda \right). \quad (25)$$

Динамика гравастаров с тонкой оболочкой при различных значениях физических параметров, а именно, скорости изменения радиуса оболочки, радиуса оболочки и эффективного потенциала, показана на рис. 6, 7 и 8. Если скорость изменения радиуса оболочки возрастает, то оболочка гравастара демонстрирует расширение, в противном случае — коллапс (см. рис. 6). Левый рисунок соответствует расширению, а правый — коллапсу тонкой оболочки. На рисунке видно, что с ростом массы оболочки динамика замедляется. Оказалось, что при соответствующем собственном времени тонкая оболочка может одновременно демонстрировать как расширение, так и коллапс (см. рис. 7). На рисунке видно, что скорости как коллапса, так и расширения оболочки гравастаров больше для больших значений Λ.

Потенциальная функция демонстрирует осцилляции при изменении радиуса оболочки граваста-

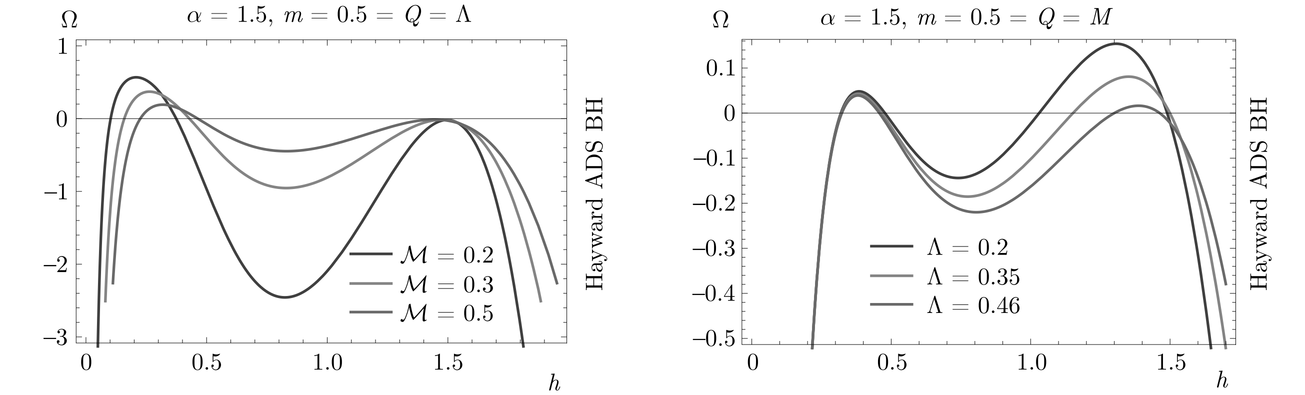


Рис. 8. Осцилляции потенциальной функции при изменении радиуса оболочки для различных значений $\mathcal{M}$ (левая панель) и Λ (правая панель)

ров при различных значениях физических параметров, см. рис. 8. Значения потенциальной функции осциллируют между двумя вещественными корнями, h_1, h_2, при $\Omega(h_1) = 0 = \Omega(h_2)$. Локальные минимумы или локальные максимумы потенциальной функции получены в открытом интервале (h_1, h_2). На рис. 8 показаны различные пары вещественных корней потенциальной функции с локальными минимумами и локальными максимумами. Если потенциальная функция имеет локальный минимум между своими вещественными корнями, то она демонстрирует устойчивое поведение, в противном случае — неустойчивое. Оболочка демонстрирует коллапс при $\Omega(h) \to -\infty$ при $h \to 0$ или $h \to \infty$, если $h > 1.5$. Оказалось, что скорость расширения и коллапса оболочки гравастаров зависит от космологической постоянной и массы оболочки. Приведенным зависимостям потенциальной функции соответствуют области устойчивых и неустойчивых осцилляций оболочки гравастаров. Для двух значений радиусов оболочки h_1, h_2, скорость ее изменения обращается в нуль, $\dot{h}(\tau) = 0$, что означает, что оболочка перестает двигаться и возвращается к прежнему состоянию. Как можно видеть, при $\Omega(h) > 0$ оболочка гравастара демонстрирует расширение, при $\Omega(h) > 0$ — коллапс, а $\Omega(h) = 0$ соответствует седловым точкам. Поверхностное давление оболочки максимально при минимальном значении радиуса оболочки и имеет минимальное значение при его максимальном значении. Это означает, что гравитационное притяжение заставляет оболочку сжиматься, что приводит к осцилляциям. Оказалось, что из-за осцилляций оболочка гравастара может иметь как устойчивые, так и неустойчивый конфигурации при разных значениях радиуса.

4.1. Гравастары с тонкой оболочкой в случае скалярного поля

Рассмотрим движение гравастаров с тонкой оболочкой в случае вещественного скалярного поля. Они полезны для понимания динамической конфигурации скалярных тел. Для этого рассмотрим преобразование, связывающее уравнения движения тонкой оболочки, состоящей из идеальной жидкости, в случае скалярного поля. Рассмотрим преобразование

$$u_a = \frac{\psi_{,a}}{\sqrt{\psi_{,b}\psi^{,b}}},$$

устанавливающее линейную зависимость между компонентами тензора энергии-импульса идеальной жидкости с производной скалярного поля ψ по собственному времени, а также скалярной потенциальной функцией $\Omega(\psi)$ [33–35]. С помощью этого преобразования в случае скалярного поля для гравастаров с тонкой оболочкой можно получить уравнения движения, которые описывают поведение оболочки как аналитически, так и численно. В случае скалярного поля соответствующий тензор энергии-импульса имеет вид [33]

$$S_{ij} = \nabla_i \psi \nabla_j \psi - \eta_{ij} \left(\frac{1}{2} (\nabla \psi)^2 - \Omega(\psi) \right).$$

Соответствующие компоненты можно выразить как [33, 34]

$$2\sigma = \psi_{,b}\psi^{,b} + 2\Omega(\psi), \quad 2p = \psi_{,b}\psi^{,b} - 2\Omega(\psi), \quad (26)$$

откуда получаем

$$\sigma = \frac{1}{2}\left(\dot{\psi}^2 + 2\Omega(\psi)\right), \quad p = \frac{1}{2}\left(\dot{\psi}^2 - 2\Omega(\psi)\right). \quad (27)$$

Тогда масса оболочки в случае скалярного поля равна

$$\mathcal{M} = 4\pi h^2\sigma = 2\pi h^2(\dot{\psi}^2 + 2\Omega(\psi)). \tag{28}$$

Используя уравнения (24) и (25), из (17) получаем

$$\ddot{\psi} + \frac{2\dot{h}}{h}\dot{\psi} + \frac{\partial\Omega}{\partial\psi} = 0. \tag{29}$$

Приведенное выше уравнение называется уравнением Клейна–Гордона (КГ). Для ЧД Хейворда и для ЧД Хейворда–ADS потенциальная функция гравастаров с тонкой оболочкой в случае скалярного поля соответственно принимает вид

$$\Omega_h(h) = 1 - \pi^2 h^2 \left(2\Omega(\psi) + \dot{\psi}^2\right)^2 + \\ + \frac{1}{6}h^2\left(-\frac{6m}{h^3+Q^3} - \frac{3}{\alpha^2}\right) - \\ - \frac{h^2}{144\pi^2}\left(\frac{6m}{h^3+Q^3} - \frac{3}{\alpha^2}\right)^2 \left(2\Omega(\psi) + \dot{\psi}^2\right)^{-2},$$

$$\Omega_{hads}(h) = 1 - \pi^2 h^2 \left(2\Omega(\psi) + \dot{\psi}^2\right)^2 + \\ + \frac{1}{6}h^2\left(-\frac{6m}{h^3+Q^3} - \frac{3}{\alpha^2} - \Lambda\right) - \\ - \frac{h^2}{144\pi^2}\left(\frac{6m}{h^3+Q^3} - \frac{3}{\alpha^2} + \Lambda\right)^2 \left(2\Omega(\psi) + \dot{\psi}^2\right)^{-2}.$$

Для исследования тонкой оболочки в случае скалярного поля нам необходимо соотношение между плотностью поверхностной энергии σ и давлением p. Однако нет такого УС, которое связывало бы потенциал скалярного поля и кинетические энергии. Поэтому мы будем использовать частный вид $\Omega(\psi)$ с определенным набором физических параметров, что позволяет получить выражения для эффективной массы и напряженности скалярного поля. Чтобы исследовать динамику гравастаров с тонкой оболочкой, рассмотрим два типа скалярного поля, а именно, безмассовое ($\Omega(\psi) = 0$) и массивное ($\Omega(\psi) = m^2\psi^2$) скалярные поля.

4.1.1. Безмассовое скалярное поле

В этом случае мы получаем прямое соотношение между компонентами тензора энергии-импульса, т. е. $p = \sigma$ при $\Omega(\psi) = 0$. Соответствующее уравнение КГ можно записать как

$$\ddot{\psi} + \frac{2\dot{h}}{h}\dot{\psi} = 0.$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$\dot{\psi} = \frac{\xi}{h^2},$$

где ξ — вещественная константа. Эффективные потенциалы для гравастаров с тонкой оболочкой в случае безмассового скалярного поля для пространства-времени ЧД Хейворда и ЧД Хейворда–ADS принимают вид

$$\Omega_h(h) = 1 - \frac{\pi^2\xi^4}{h^6} - \frac{h^{10}\left(\dfrac{6m}{h^3+Q^3} - \dfrac{3}{\alpha^2}\right)^2}{144\pi^2\xi^4} + \\ + \frac{1}{6}h^2\left(-\frac{6m}{h^3+Q^3} - \frac{3}{\alpha^2}\right),$$

$$\Omega_{hads}(h) = 1 - \frac{\pi^2\xi^4}{h^6} - \frac{h^{10}\left(\dfrac{6m}{h^3+Q^3} - \dfrac{3}{\alpha^2} + \Lambda\right)^2}{144\pi^2\xi^4} - \\ - \frac{h^2}{6}\left(\frac{6m}{h^3+Q^3} + \frac{3}{\alpha^2} + \Lambda\right).$$

Проанализируем расширение и коллапс гравастаров с тонкой оболочкой в случае безмассового скалярного поля с помощью графиков зависимостей радиуса оболочки и эффективного потенциала при различных конкретных значениях физических параметров. Видно, что зависимости радиуса тонкой оболочки указывают как на расширение, так и на коллапс (рис. 9), причем скорость динамических процессов больше для больших значений ξ. Анализируя поведение функции эффективного потенциала в случае безмассовой скалярной оболочки, можно сделать вывод, что при выборе в качестве внешнего многообразия пространства-времени ЧД Хейворда–ADS оболочка демонстрирует менее выраженную динамику, чем при выборе пространства-времени ЧД Хейворда (рис. 10). Зависимости эффективного потенциал указывают на то, что в случае безмассового скалярного поля тонкая оболочка демонстрирует только коллапс, причем скорость коллапса больше для больших значений ξ (рис. 11).

4.1.2. Массивное скалярное поле

Рассмотрим динамику гравастаров с тонкой оболочкой в случае массивного скалярного поля,

$$\Omega(\psi) = \mathcal{M}^2\psi^2.$$

В этом случае соответствующие потенциальная функция и производная по собственному времени в выражениях для σ и p имеют вид

$$2\Omega(\psi) = \sigma - p, \quad \dot{\psi}^2 = \sigma + p. \tag{30}$$

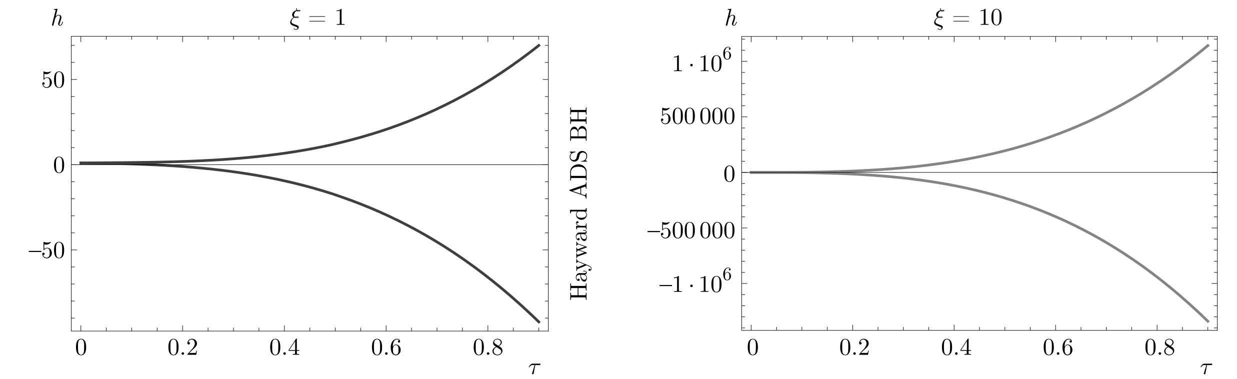


Рис. 9. Динамика гравастаров с тонкой оболочкой в случае безмассового скалярного поля, а именно, зависимости радиуса оболочки h от τ при $h(0) = 1$

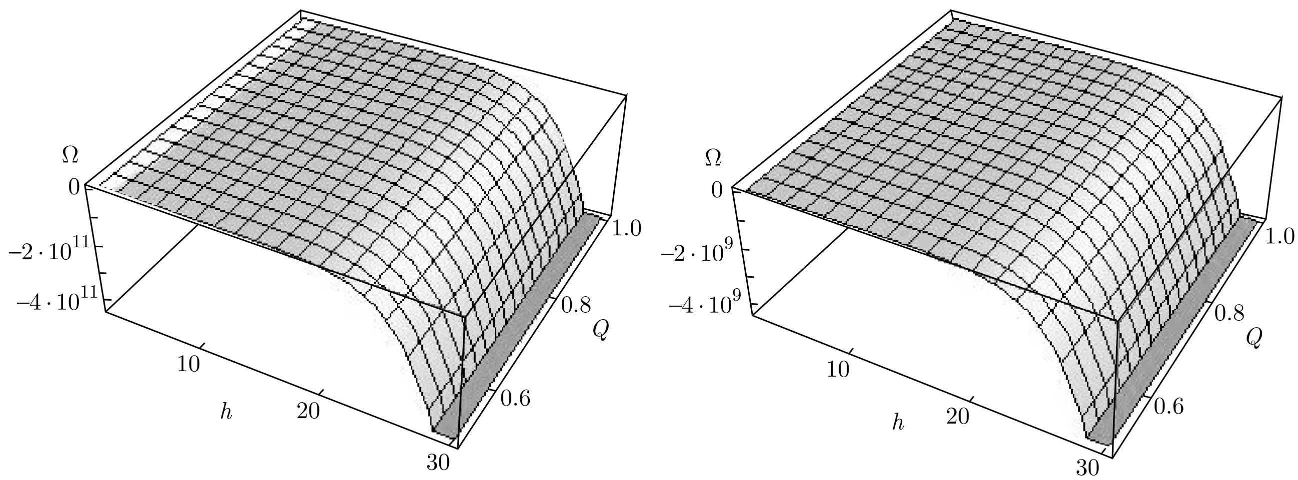


Рис. 10. Динамические конфигурации гравастаров с тонкой оболочкой, а именно, зависимости эффективного потенциала от h и Q для $\Lambda = 0$ (левая панель) и $\Lambda = 1.2$ (правая панель) при $\xi = 1$, $\alpha = 1.5$, $m = 0.5$

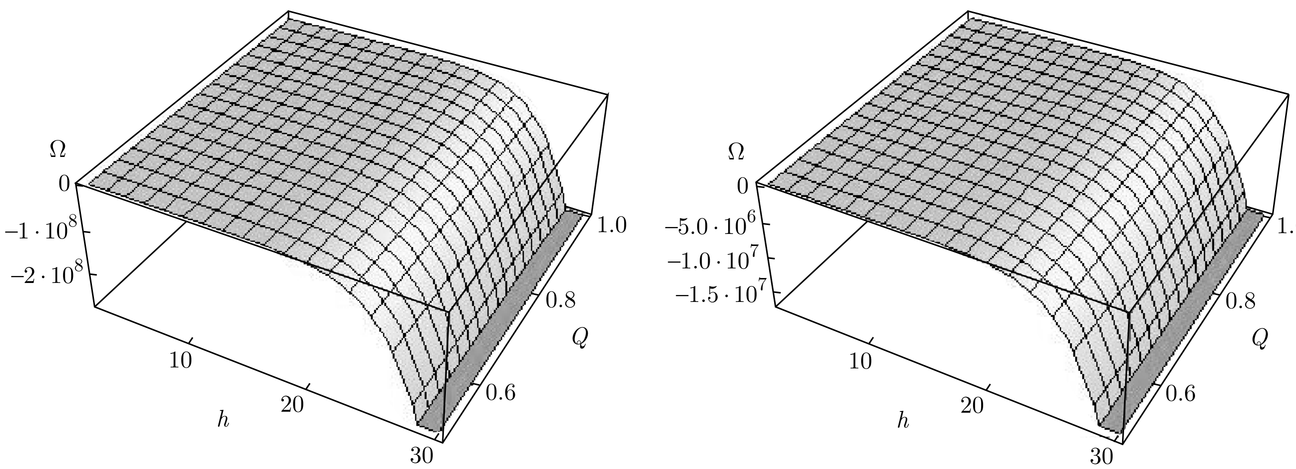


Рис. 11. Динамические конфигурации гравастаров с тонкой оболочкой, а именно, зависимости эффективного потенциала от h и Q для $\xi = 5$ (левая панель) и $\xi = 10$ (правая панель) при $\Lambda = 0.5 = m$, $\alpha = 1.5$

Будем считать, что поверхностное давление является явной функцией от h, т. е.

$$p = p_0 e^{-\zeta h},$$

где p_0 и ζ — вещественные постоянные. Подставив это выражение для поверхностного давления в уравнение (18), получим выражение для плотности поверхностной энергии:

$$\sigma = \frac{1}{\zeta^2 h^2}\left(2\left(1+\zeta h\right) p_0 e^{-\zeta h} + \zeta^2 \eta\right), \qquad (31)$$

где η — постоянная интегрирования. Подставляя выражения для σ и p в уравнение (30), получим

$$\dot{\psi}^2 = \frac{1}{h^2\zeta^2}\left(\eta\zeta^2 + p_0 e^{-\zeta h}\left(\zeta^2 h^2 + 2\left(1+\zeta h\right)\right)\right), \qquad (32)$$

$$\Omega(\psi) = \frac{1}{2h^2\zeta^2}\left(\eta\zeta^2 - p_0 e^{-\zeta h}\left(\zeta^2 h^2 - 2(1+\zeta h)\right)\right). \qquad (33)$$

Заметим, что приведенные выше выражения согласуются с уравнением КГ. Используя уравнения (32) и (33), для гравастаров с тонкой оболочкой в случае массивного скалярного поля можно получить

$$\Omega(h) = -\frac{h^2\chi(h)^2}{4\mathcal{M}^2} - \frac{\mathcal{M}^2}{4h^2} + \frac{\lambda(h)}{2}, \qquad (34)$$

где

$$\mathcal{M} = \frac{4\pi}{\zeta^2}\left(\eta\zeta^2 + 2p_0 e^{-\zeta h}\left(1+\zeta h\right)\right). \qquad (35)$$

Проанализируем динамику гравастарров с тонкой оболочкой в случае массивного скалярного поля с помощью графиков зависимостей радиуса оболочки и эффективного потенциала. На рисунках видно, что радиус оболочки может как возрастать (расширение), так и убывать (коллапс) с изменением собственного времени (см. рис. 12). На графиках зависимостей эффективного потенциала видно, что скорость коллапса уменьшается как с ростом η, так и с ростом ζ (см. рис. 13). На графиках зависимостей радиуса оболочки видно, что скорость коллапса увеличивается после перехода через горизонт событий, т. е. при $h = 1.48$ (левая панель на рис. 14) и $h = 4$ (правая панель на рис. 14).

5. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

В настоящей работе с использованием уравнений движения исследованы устойчивые и динамические конфигурации гравастаров с тонкой оболочкой. Геометрическая структура гравастаров получается сшиванием внешнего регулярного пространства-времени (ЧД Хейворда и ЧД Хейворда–ADS) с внутренним многообразием DS с использованием метода “ cut and paste”. Характеристики образованной материей поверхности получены с использованием формализм Израэля и уравнений Ланцоша. Получено, что оболочка гравастара может иметь как устойчивые и неустойчивые конфигурации, а также демонстрировать динамику. В работе получены следующие результаты.

Во-первых, проанализирована устойчивость рассматриваемых структур в рамках подхода, использующего регулярные ЧД с радиальным возмущением на оболочке с равновесным радиусом. Для исследования устойчивости тонкой оболочки рассмотрены экранированные области. Оказалось, что области устойчивости зависят от физических параметров, а именно, они увеличиваются с ростом Q, m и α и убывают с ростом Λ (см. рис. 1–4). Гравастары с тонкой оболочкой Хейворда являются более устойчивыми, чем гравастары с тонкой оболочкой Шварцшильда, Шварцшильда–ADS и Хейворда–ADS (см. рис. 5).

Во-вторых, исследована динамика рассматриваемых структур в случае вещественного скалярного поля, а именно, для безмассового и массивного скалярных полей. В зависимости от скорости оболочки и ее радиуса гравастары демонстрируют как коллапс, так и расширение. Скорость динамических процессов уменьшается с ростом массы оболочки. При изменении радиуса оболочки для конкретных значений физических параметров потенциальная функция демонстрирует осциллирующее поведение (см. рис. 6–8). С использованием уравнений КГ получены и проанализированы графически динамические уравнения для тонкой оболочки в случае безмассового и массивного скалярных полей. Для всех значений физических параметров относительно собственного времени радиус оболочки демонстрирует как коллапс, так и расширение. В то же время зависимости эффективного потенциала в обоих случаях указывают на то, что оболочка коллапсирует (см. рис. 9–14).

Исследованию устойчивости и динамики гравастаров с тонкой оболочкой в случае скалярного поля посвящено множество работ [33–37]. В настоящей работе рассмотрены расширение и коллапс гравастаров с тонкой оболочкой, заполненных безмассовыми и массивными скалярными полями. Получено, что тонкая оболочка, построенная из двух эквивалентых копий ЧД, демонстрирует как рас-

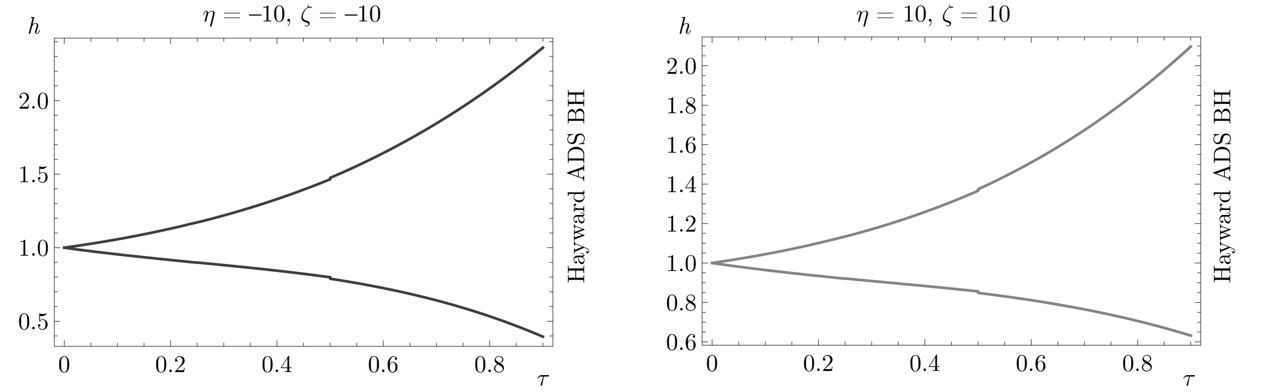


Рис. 12. Динамика гравастаров с тонкой оболочкой в случае массивного скалярного поля, а именно, зависимости радиуса оболочки h от τ при $h(0) = 1$

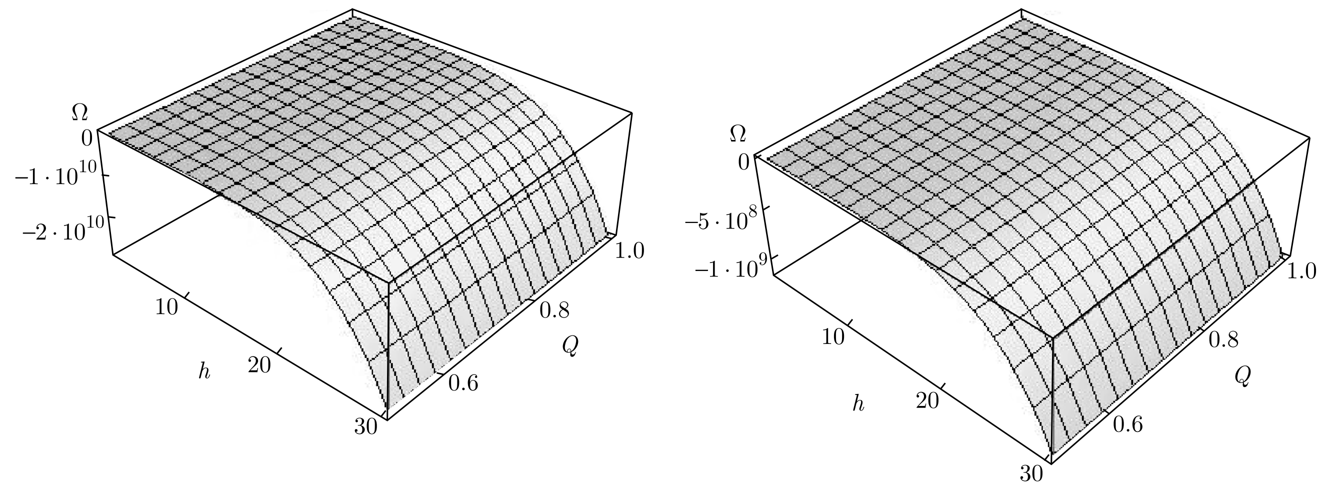


Рис. 13. Динамика гравастаров с тонкой оболочкой, а именно, зависимости эффективного потенциала от h и Q для $\eta = 1 = \zeta$ (левая панель) и $\eta = 5 = \zeta$ (правая панель) при $\Lambda = 0.5 = m$, $\alpha = 1.5$

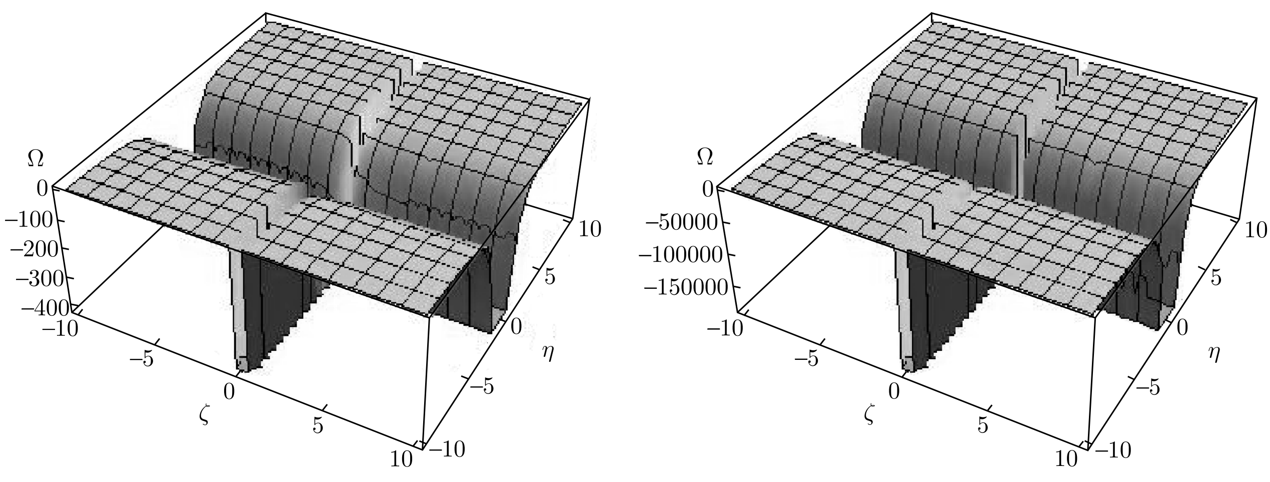


Рис. 14. Динамика гравастаров с тонкой оболочкой, а именно, зависимости эффективного потенциала от ξ и η для $\Lambda = 0.05$ (левая панель) и $\Lambda = 1.5$ (правая панель) при $Q = 0.5 = m$, $\alpha = 1.5$

ширение, так и коллапс для обоих случаев скалярного поля. Для гравастаров с тонкой оболочкой отмечено, что эффективный потенциал рассматриваемой структуры, полученной сшиванием внутреннего пространства-времени ЧД DS и внешнего пространства-времени ЧД Хейворда–ADS, для всех значений физических параметров демонстрирует только коллапс. Поэтому в зависимости от выбора пространства-времени ЧД рассматриваемые структуры ведут себя по-разному. Эти результаты могут оказаться полезными для будущих исследований динамики гравастаров с тонкой оболочкой при различном выборе внутренней и внешней геометрий.

Следует отметить, что гравастары должны быть устойчивыми вблизи ожидаемого горизонта событий [25–27]. Наличие безмассового и массивного скалярных полей на тонкой оболочке для случая эквивалентных копий черных дыр обуславливает как расширение, так и коллапс для различных значений физических параметров. [33–37]. В настоящей работе на основании зависимостей эффективного потенциала мы получили только коллапсирующее поведение оболочки для всех значений физических параметров как для безмассового, так и для массивного поля. Скорость коллапса уменьшается при увеличении космологической постоянной. Поэтому теоретическая модель гравастара могла бы быть полезной для лучшего понимания устойчивых и динамических конфигураций астрономических компактных объектов.

Финансирование. Один из авторов (Ф. Дж.) благодарит Высшую Комиссию по образованию Исламабада за финансовую поддержку (6748/Punjab/NRPU/RD/HEC/2016).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. M. Bardeen, Proc. GR5, Tiflis, USSR (1968), p. 174.

2. E. Ayón-Beato and A. Garcı́a, Phys. Rev. Lett **80**, 5056 (1998); Gen. Rel. Grav. **629**, 31 (1999); Phys. Lett. B **25**, 464 (1999); Phys. Lett. B **149**, 493 (2000).

3. S. A. Hayward, Phys. Rev. Lett. **96**, 031103 (2006).

4. M. Wen-Juan, C. Rong-Gen, and S. Ru-Keng, Comm. Theor. Phys. **46**, 453 (2006).

5. Z. Y. Fan and X. Wang, Phys. Rev. D **94**, 124027 (2016); Z. Y. Fan, Eur. Phys. J. C **77**, 266 (2017).

6. S. Fernando, Int. J. Mod. Phys. D **26**, 07 (2017).

7. P. Mazur and E. Mottola, arXiv:gr-qc/0109035; Proc. Nat. Acad. Sci. **101**, 9545 (2004).

8. W. Israel, Nuovo Cimento B **44**, 1 (1966).

9. M. Visser, S. Kar, and N. Dadhich, Phys. Rev. Lett. **90**, 201102 (2003).

10. S. H. Mazharimousavi, M. Halilsoy, and Z. Amirabi, Phys. Rev. D **81**, 104002 (2010).

11. F. Rahaman, S. Ray, A. K. Jafry, and K. Chakraborty, Phys. Rev. D **82**, 104055 (2010).

12. M. Sharif and M. Azam, Eur. Phys. J. C **73**, 2407 (2013).

13. M. Sharif and F. Javed, Gen. Relativ. Gravit. **48**, 158 (2016).

14. S. D. Forghani, S. Habib Mazharimousavi, and M. Halilsoy, Eur. Phys. J. C **78**, 469(2018).

15. M. Sharif and F. Javed, Astrophys. Space Sci. **364**, 179 (2019); Chin. J. Phys. **61**, 262 (2019); Int. J. Mod. Phys. D **29**, 2050007(2020); Int. J. Mod. Phys. A **35**, 2040015 (2020); https://doi.org/10.1142/S0217732320503095.

16. M. Sharif, S. Mumtaz, and F. Javed, Int. J. Mod. Phys. A **35**, 2050030 (2020).

17. M. Visser and D. L. Wiltshire, Class. Quantum Grav. **21**, 1135 (2004).

18. B. M. N. Carter, Class. Quantum Grav. **22**, 4551 (2005).

19. D. Horvat, S. Ilijic, and A. Marunovic, Class. Quantum Grav. **26**, 025003 (2009).

20. Usmani et al., Phys. Lett. B **701**, 388 (2011).

21. A. Banerjee, A. Rahaman, S. Islam, and M. Govender, Eur. Phys. J. C **76**, 34 (2016).

22. P. Rocha, R. Chan, da M. F. A. Silva, and A. Wang, J. Cosmol. Astropart. Phys. **2008**, 010 (2008); R. Chan, da M. F. A. Silva, P. Rocha, and A. Wang, J. Cosmol. Astropart. Phys. **2009**, 10 (2009); ibid. **2011**, 13 (2011).

23. D. Horvat, S. Ilijic, and A. Marunovic, Class. Quantum Grav. **28**, 195008 (2011).

24. F. Rahaman, A.A. Usmani, S. Ray, and S. Islam, Phys. Lett. B **707**, 319 (2012); ibid. **717**, 1 (2012).

25. F. S. N. Lobo and R. Garattini, J. High Energy Phys. **1312**, 065 (2013).

26. A. Övgün, A. Banerjee, and K. Jusufi, Eur. Phys. J. C **77**, 566 (2017).

27. M. Sharif and F. Javed, Ann. Phys. **415**, 168124 (2020).

28. J. A. Wheeler, Phys. Rev. **97**, 511 (1955); D. R. Brill, and J. A. Wheeler, Phys. Rev. **105**, 1662 (1957).

29. Q. Bergmann and R. Leipnik, Phys. Rev. **107**, 1157 (1957).

30. D. J. Kaup, Phys. Rev. **172**, 1331 (1968).

31. E. Seidel and W. Suen, Phys. Rev. D **42**, 384 (1990).

32. M. W. Choptuik,Phys. Rev. Lett. **70**6 9 (1993); C. R. Evans and J. S. Coleman, Phys. Rev. Lett. **72**, 1782 (1994); D. Christodoulou, Ann. Math. **140**, 607 (1994); E. Malec, Class. Quantum Grav. **13**, 1849 (1995); C. Gundlach, Phys. Rev. Lett. **75**, 3214 (1995); P. R. Bardy, Class. Quantum Grav. **11**, 1255 (1996).

33. D. Núñez, H. Quevedo, and M. Salgado, Phys. Rev. D **58**, 083506 (1998).

34. M. Sharif and G. Abbas, Gen. Relativ. Gravit. **44**, 2353 (2012).

35. M. Sharif and S. Iftikhar, Astrophys. Space Sci. **356**, 89 (2015).

36. M. Sharif and F. Javed, Int. J. Mod. Phys. D **28**, 1950046 (2019); Ann. Phys. **407**, 198 (2019); Mod. Phys. Lett. A **35**, 1950350 (2019); Ann. Phys. **416**, 168146 (2020).

37. G. Abbas and M. R. Shahzad, Int. J. Mod. Phys. A **35**, 2050028 (2020).

38. F. Rahaman, A. Banerjee, and I. Radinschi, Int. J. Theor. Phys. **52**, 2943 (2013).

ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 3, стр. 473–478

АКУСТИЧЕСКАЯ ЭМИССИЯ ПРИ ИНИЦИАЦИИ ПОЛОСЫ СДВИГА В МЕТАЛЛИЧЕСКОМ СТЕКЛЕ КАК МЕТОД ВЕРИФИКАЦИИ СУЩЕСТВОВАНИЯ МАСШТАБНОЙ ИНВАРИАНТНОСТИ

И. С. Ясников [a*], ***А. Ю. Виноградов*** [b]

[a] *Тольяттинский государственный университет*
445020, Тольятти, Россия

[b] *Norwegian University of Science and Technology*
7491, Trondheim, Norway

Поступила в редакцию 22 ноября 2020 г.,
после переработки 22 ноября 2020 г.
Принята к публикации 17 декабря 2020 г.

Методом акустической эмиссии найдена функция распределения плотности вероятности длин полос сдвига в металлическом стекле и показана ее независимость от стехиометрического состава стекла и условий эксперимента. Ее степенной вид приводит к независимому подтверждению наблюдаемого квадратичного скейлинга в зависимости скорости сдвиговых процессов в металлическом стекле от времени.

DOI: 10.31857/S0044451021030081

1. ВВЕДЕНИЕ

Масштабная инвариантность (или скейлинг), свидетельствующая об общности физических явлений на разных масштабных уровнях, вызывает несомненный интерес в различных областях естествознания [1–4]. При масштабной инвариантности рассматриваемое явление проявляет свойство автомодельности, т. е., изменяясь в пространстве и времени, явление воспроизводит само себя в изменяющихся пространственных или временных масштабах. С математической точки зрения это влечет за собой существование степенного соотношения между основными характеристиками рассматриваемого явления [4]. Самовоспроизведение физических явлений при масштабной инвариантности позволяет моделировать и изучать их в лабораторных условиях на малых масштабах и расширять полученные результаты на подобные крупномасштабные явления. В частности, в монографии [5] с точки зрения механики сплошных сред было обосновано, что фронт полосы сдвига при формировании разлома земной коры представляет собой макроскопическую сейсмодислокацию с соответствующим дальнодействующим полем напряжений. В свою очередь, в работе [6], аналогичные выводы были сделаны для фронта полосы сдвига в металлическом стекле. Несмотря на разномасштабность рассматриваемых явлений, вполне естественно выдвинуть гипотезу об их масштабной инвариантности и, изучая кинематику полос сдвига в металлических стеклах, расширять полученные результаты на описание сдвиговых процессов в земной коре.

Самоорганизованная критичность в поведении металлических стекол, аналогичная таковой в гранулярных средах и тектонических процессах, отмечалась в ряде работ на основании исследований сбросов напряжения, сопровождающих процесс распространения полос сдвига (сброса) [7–9]. Однако этот процесс состоит из двух частей – быстрого формирования фронта полосы и последующего относительно медленного сдвига одной части образца относительно другой по полосе [10, 11].

В частности, в работах [12–14] в экспериментах по изучению кинетики зарождения и дальнейшего эволюционного роста полосы сдвига в металлическом стекле в реальном времени (*in-situ*) было выявлено, что зависимость скорости фронта полосы сдвига от времени имеет асимметричный импульс-

* E-mail: yasnikov@phystech.edu

ный характер и условно состоит из двух этапов: (*i*) быстрое, за время τ_i (менее 30 мкс), нарастание скорости фронта от нуля до некоторого максимального значения V_{max} (не менее 5 м/с), а затем (*ii*) медленное (около 300 мкс) затухание. При этом было обнаружено, что скорости сдвиговых процессов в металлическом стекле на этапе условного торможения от максимальной скорости до ее финализации имеют степенной характер распределения средней (или мгновенной в пределах погрешности измерения времени) в виде

$$\langle V(\xi)\rangle \propto \frac{1}{\xi^{\alpha}}$$

(ξ — время в момент измерения), где $\alpha \sim 2$, что и подтвердилось многочисленными экспериментальными данными [13, 14].

Выявленная в работе [13] степенная зависимость скорости полосы сдвига (и, соответственно, длины без учета постоянного слагаемого) свидетельствует о масштабной инвариантности процесса распространения полосы сдвига на этапе условного торможения. Следствия и пролонгации трактовок выявленной инвариантности также подробно обсуждались в работе [14]. Кроме того, было предложено аналитическое описание наблюдаемого скейлинга, которое хоть и носит оценочный характер, но обладает универсальностью приложения к любым сдвиговым процессам в механике сплошных сред, поскольку в качестве управляющего параметра использует лишь показатель степени в функции плотности вероятности степенного распределения по длинам полос сдвига. Данный факт может быть использован, в частности, при оценке скорости и времени сдвиговых процессов в земной коре, что играет существенную роль при оценке динамики возможных землетрясений.

Получая в работе [14] вид функции распределения по длинам полосы сдвига на этапе распространения от максимальной скорости до ее финализации, мы использовали факт пропорциональности между длиной полосы сдвига и локальным сбросом нагрузки [15, 16], и, в этом смысле, функция распределения по длинам полос сдвига должна повторять функцию распределения по сбросам нагрузки с точностью до постоянного нормировочного множителя. Такой подход хотя и правомерен, но является косвенным. Поскольку временная эволюция длины полосы сдвига происходит непрерывным образом, функция распределения по длинам полос сдвига не должна менять свой вид как на первом (нарастание скорости), так и на втором этапе (уменьшение скорости до финализации полосы сдвига). Однако получение аналогичного распределения по длинам полосы сдвига на первом этапе, а именно быстрое (менее 30 мкс) нарастание скорости фронта полосы сдвига от нуля до некоторого максимального значения (не менее 5 м/с), осталось вне зоны нашего внимания, поскольку данный быстропротекающий процесс требует совершенно иного экспериментального подхода.

В качестве такого подхода при регистрации нарастания скорости фронта полосы сдвига от нуля до некоторого максимального значения авторами данной работы предлагается метод акустической эмиссии, основанный на регистрации упругих колебаний (акустических волн), которые будут генерироваться при инициации полосы сдвига [17–20].

Метод акустической эмиссии прекрасно зарекомендовал себя как мощный диагностический инструмент для интерпретации особенностей эволюции дислокационной структуры материала при деформации, в том числе и металлического стекла. Прогнозирующая способность этого инструмента в отношении появления особенностей пластического течения и наступления критического состояния является весьма перспективной как для лабораторных исследований, так и для практического применения в мониторинговых и диагностических системах в промышленности. В данной работе, на основе амплитудного распределения сигналов акустической эмиссии, предлагается метод восстановления распределения по длинам полос сдвига и показывается наличие скейлинговых эффектов в формировании и распространении полос сдвига в металлических стеклах.

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В качестве объектов исследований были выбраны несколько стеклообразующих сплавов на основе Zr, Ni и Pd, а именно $Zr_{60}Cu_{30}Al_{10}$, $Zr_{52.5}Ti_5Cu_{17.9}Ni_{14.6}Al_{10}$, $Zr_{64.13}Cu_{5.75}Ni_{10.12}Al_{10}$, $Ni_{40}Cu_{10}Ti_{33}Zr_{17}$, $Pd_{40}Cu_{30}Ni_{10}P_{20}$, которые были изготовлены методом литья под давлением в медную форму как описано в работе [21]. Образцы $3\times3\times6$ мм^3 испытывались на сжатие с одновременной регистрацией сигнала акустической эмиссии. Детали методики можно найти в работе [21]. Сплавы $Zr_{64.13}Cu_{5.75}Ni_{10.12}Al_{10}$ испытывались со скоростями 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-5} с$^{-1}$, остальные — со скоростью 10^{-3} с$^{-1}$. Запись сигнала акустической эмиссии велась непрерывно с 18 бит разрешением и частотой дискретизации 2 МГц. Использовался

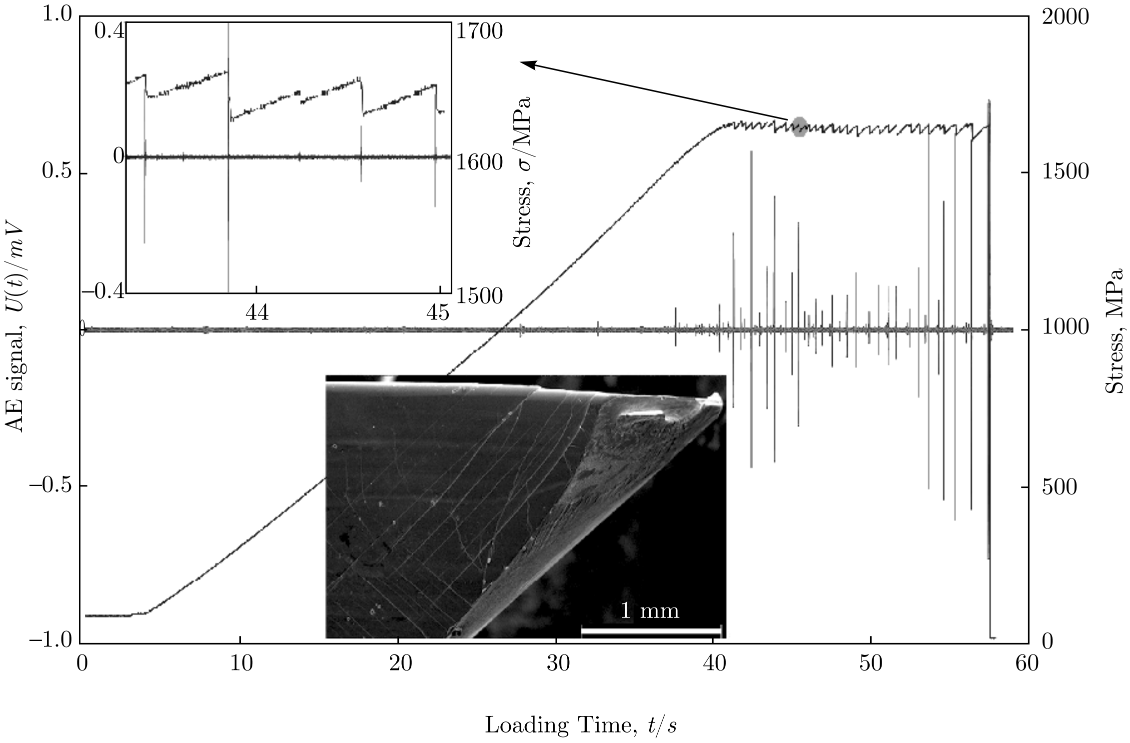


Рис. 1. Экспериментальные механического напряжения (черный цвет) и амплитуды сигналов акустической эмиссии (зеленый цвет) в зависимости от времени, полученные при нагружении сжатием образца объемного металлического стекла $Zr_{60}Cu_{30}Al_{10}$ при скорости нагружения $1 \cdot 10^{-3}$ с$^{-1}$ [21]. На вставке показан фрагмент потока сигнала акустической эмиссии, иллюстрирующий синхронное появление импульсов акустической эмиссии и скачков напряжения из-за образования и распространения макроскопических полос сдвига, которые также показаны на микроскопическом изображении

широкополосный датчик AE900S-WB. Сигнал был усилен на 60 дБ и записан при помощи системы PCI-2 (Physical Acoustic Corp., США).

В результате проведения механических испытаний вышеуказанных образцов были получены экспериментальные зависимости механического напряжения и амплитуды сигналов акустической эмиссии в зависимости от времени. В качестве примера на рис. 1 представлены данные зависимости, которые были получены при нагружении сжатием образца объемного металлического стекла $Zr_{60}Cu_{30}Al_{10}$ при скорости нагружения $1 \cdot 10^{-3}$ с$^{-1}$ [21]. На вставке рис. 1 показан фрагмент потока сигнала акустической эмиссии, иллюстрирующий синхронное появление импульсов акустической эмиссии и скачков напряжения из-за образования и распространения макроскопических полос сдвига, которые также показаны на микроскопическом изображении, полученном на сканирующем электронном микроскопе.

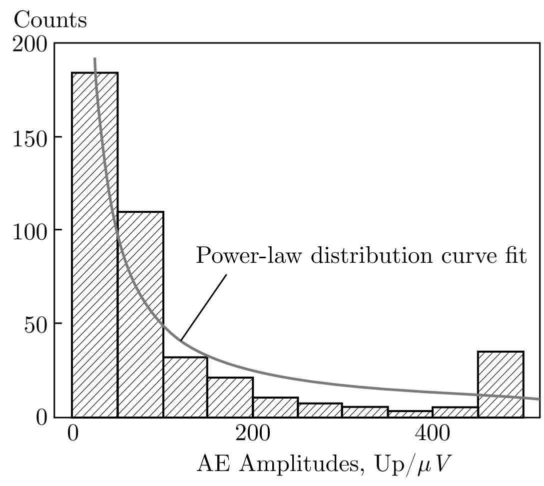


Рис. 2. Типичное амплитудное распределение сигналов акустической эмиссии и его приближение степенной функцией распределения, полученное при нагружении образца металлического стекла $Zr_{64.13}Cu_{5.75}Ni_{10.12}Al_{10}$

Типичное амплитудное распределение сигналов акустической эмиссии и его приближение степенной функцией распределения, полученное при нагружении образца металлического стекла $Zr_{64.13}Cu_{5.75}Ni_{10.12}Al_{10}$ представлено на рис. 2.

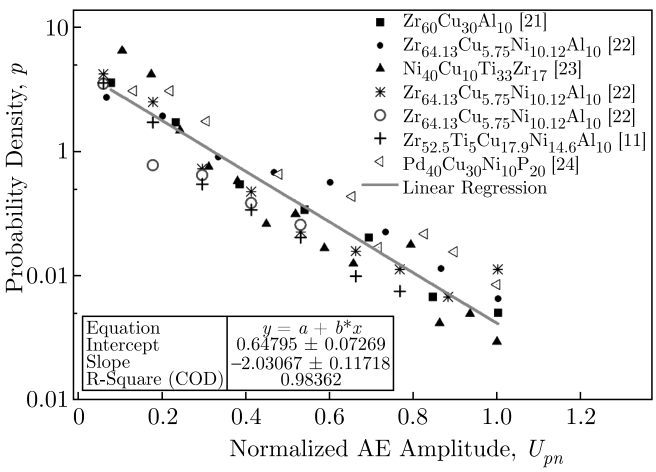


Рис. 3. Нормализованная по амплитуде функция распределения плотности вероятности амплитуд сигнала акустической эмиссии в исследованных сплавах

Проведенный далее анализ показал, что нормализованная по амплитуде функция распределения вероятности амплитуд сигнала акустической эмиссии в исследованных сплавах (рис. 3) представляет собой степенную функцию и в логарифмических координатах все экспериментальные данные хорошо ложатся на единую прямую независимо от стехиометрического состава металлического стекла и скорости нагружения при механических испытаниях.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Таким образом, из рис. 3 непосредственно следует, что амплитуда сигналов акустической эмиссии при инициации полос сдвига является случайной величиной с плотностью распределения вероятности подчиняющейся степенному закону:

$$\varphi(U_{AE}) \propto \frac{1}{U_{AE}^N}, \quad \text{где} \quad N = 2.03 \pm 0.12. \tag{1}$$

Мгновенная мощность акустической эмиссии при инициации полосы сдвига оценивается как мгновенная релаксация упругой энергии:

$$P_{AE} \approx \frac{d}{dt}\left(\frac{kL^2}{2}\right) \approx kL\dot{L} \approx kLV, \tag{2}$$

где L и V — текущая длина и скорость фронта полосы сдвига. Максимальная мощность сигнала акустической эмиссии на этапе инициации полосы сдвига соответствует моменту достижения максимальной скорости и соответствующей ей длине:

$$P_{AE}^{max} \approx kLV_{max}. \tag{3}$$

С другой стороны, мощность сигнала акустической эмиссии за время инициации τ_i определяется среднеквадратичной амплитудой сигнала следующим соотношением:

$$P_{AE}^{max} = \frac{1}{\tau_i}\int\limits_0^{\tau_i} U_{AE}^2(t)dt \approx U_{AE}^2. \tag{4}$$

С учетом равноускоренного зарождения полосы сдвига, имеем

$$L = L(V_{max}) = \frac{1}{2}V_{max}\tau_i. \tag{5}$$

Учитывая (5), формулу (3) можно преобразовать к виду

$$P_{AE}^{max} \approx kLV_{max} \approx kL^2. \tag{6}$$

А с учетом (4) получаем

$$U_{AE}^2 \approx kL^2 \quad \text{или} \quad U_{AE} \approx kL. \tag{7}$$

Поскольку плотность распределения вероятности инварианта к нормировке по аргументу:

$$\int \varphi(U_{AE})dU_{AE} = \int \varphi(L)\,dL \tag{8}$$

отсюда легко получить, что для двух пропорциональных друг другу аргументов вид функции плотности распределения вероятности совпадает. Непосредственно из формулы (1) сразу следует

$$\varphi(L) \approx \frac{1}{L^n}, \quad \text{где} \quad n = 2.03 \pm 0.12. \tag{9}$$

В работе [14] была получена формула для скейлинга средней скорости полосы сдвига на этапе ее торможения в виде

$$\langle V(\xi)\rangle \propto \frac{1}{\xi^\alpha}, \tag{10}$$

где

$$\alpha = \frac{n}{n-1}.$$

С учетом (9) немедленно получаем

$$\langle V(\xi)\rangle \propto \frac{1}{\xi^{\frac{n}{n-1}}} \approx \frac{1}{\xi^2}. \tag{11}$$

Таким образом, нами получен степенной характер распределения средней (или мгновенной в пределах погрешности измерения времени) скорости сдвиговых процессов в металлическом стекле на этапе условного торможения от максимальной скорости до ее финализации в виде

$$\langle V(\xi)\rangle \propto \frac{1}{\xi^{\alpha}},$$

что подтверждается не только многочисленными экспериментальными данными ($n \approx 2.2, \ldots, 2.8$, $\alpha \approx \approx 1.6, \ldots, 1.8$, работа [14]), но и прецизионными данными, полученными методом акустической эмиссии на этапе нарастания фронта полосы сдвига ($n = \alpha = = 2.03 \pm 0.12$, настоящая работа).

С учетом

$$\langle V(\tau_i)\rangle = V_{max}$$

немедленно получаем

$$\langle V(\xi)\rangle = \frac{V_{max}\tau_i^2}{\xi^2}. \qquad (12)$$

Интегрируя последнее соотношение с учетом условия

$$L(\xi \to \infty) = L_S,$$

где L_S — длина образца, получаем

$$L(\xi) = L_S - \frac{V_{max}\tau_i^2}{\xi}. \qquad (13)$$

Соотношения (12) и (13) описывают масштабную инвариантность процесса распространения полосы сдвига на этапе условного торможения в переменных (ξ; $L_S - L(\xi)$) и (ξ; $\langle V(\xi)\rangle$), соответственно.

В качестве дополнительной аргументации приведенного подхода, который связан с формулой (2), можно провести параллель между сейсмическими сдвиговыми процессами в земной коре и эволюцией полос сдвига в металлических стеклах. В частности, в работе [25] указывается, что величина сейсмического момента M_0 и масштаб землетрясения длины L (аналог длины полосы сдвига, но только в случае длины сейсмодислокации) связаны соотношением $M_0 \propto L^2$. В работе [26] на основе анализа 1308 сейсмических событий была установлена взаимосвязь между излученной сейсмической энергией и величиной сейсмического момента в виде

$$E_S = 2.33 \cdot 10^{-6} M_0^{1.04}. \qquad (14)$$

Или, с учетом $M_0 \propto L^2$, немедленно получаем

$$E_S \propto M_0^{1.04} \propto L^{2.08} \approx L^2, \qquad (15)$$

что полностью соответствует формуле (2), которую мы использовали для того, чтобы описать мгновенную релаксацию упругой энергии в металлическом стекле. Это лишний раз подчеркивает возможность использования предложенного подхода также и при описании сдвиговых процессов в земной коре. Однако стоит отметить, что, несмотря на то, что масштабная инвариантность физических величин описывающих сдвиговые процессы в земной коре подтверждена многочисленными работами (например, [27, 28]), она до сих пор является предметом дискуссий и нуждается в критическом анализе в силу неоднозначности численных параметров скейлинга.

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 18-08-00327.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. P. Sethna, *Statistical Mechanics: Entropy, Order Parameters and Complexity*, Clarendon Press, Oxford (2017), 371 p.

2. G. B. West and J. H. Brown, Physics Today **57**, 9, 36 (2004).

3. M. Zaiser, Advances in Physics **55**, 185 (2006).

4. G. I. Barenblatt, *Scaling*, Cambridge University Press, Cambridge (2003).

5. Keiiti Aki and P. G. Richards, *Quantitative Seismology: Theory and Methods*, W. H. Freeman and Co., San Francisco (1980), volumes I and II.

6. A. Vinogradov, M. Seleznev, and I. S. Yasnikov, Scripta Materialia. **130**, 138 (2017).

7. K. A. Dahmen, Y. Ben-Zion, and J. T. Uhl, Nature Physics **7**, 554 (2011).

8. J. Antonaglia, W. J. Wright, X. Gu, R. R. Byer, T. C. Hufnagel, M. LeBlanc, J. T. Uhl, and K. A. Dahmen, Phys. Rev. Lett. **112**, 155501 (2014).

9. G. Wang, K. C. Chan, L. Xia, P. Yu, J. Shen, and W. H. Wang, Acta Materialia **57**, 6146 (2009).

10. T. C. Hufnagel, C. A. Schuh, and M. L. Falk, Acta Materialia **109**, 375 (2016).

11. D. Klaumünzer, A. Lazarev, R. Maaß, F. H. Dalla Torre, A. Vinogradov, and J. F. Löffler, Phys. Rev. Lett. **107**, 185502 (2011).

12. A Vinogradov, Scripta Materialia **63**, 89 (2010).

13. M. Seleznev, I. S. Yasnikov, and A. Vinogradov, Materials Lett. **225**, 105 (2018).

14. И. С. Ясников, М. Н. Селезнев, А. В. Данюк, А. Ю. Виноградов, Письма в ЖЭТФ **110**, 421 (2019) [I. S. Yasnikov, M. N. Seleznev, A. V. Danyuk, and A. Yu. Vinogradov, JETP Lett. **110**, 436 (2019)].

15. R. T. Qu, Z. Q. Liu, G. Wang, and Z. F. Zhang, Acta Materialia **91**, 19 (2015).

16. P. Thurnheer, R. Maaß, K. J. Laws, S. Pogatscher, and J. F. Löffler, Acta Materialia **96**, 428 (2015).

17. S. H. Carpenter and F. P. Higgins, Metallurgical Transactions **8A**, 10, 1629 (1977).

18. T. T. Lamark, F. Chmelik, Y. Estrin, and P. Lukac, Journal of Alloys and Compounds **378**, 202 (2004).

19. A. Vinogradov, I. S. Yasnikov, and Y. Estrin, Journal of Applied Physics **115**, 233506 (2014).

20. A. Vinogradov, D. Orlov, A. Danyuk, and Y. Estrin, Materials Science and Engineering A **621**, 243 (2015).

21. A. Vinogradov, A. Lazarev, D. V. Louzguine-Luzgin, Y. Yokoyama, S. Li, A. R. Yavari, and A. Inoue, Acta Materialia **58**, 6736 (2010).

22. D. V. Louzguine-Luzgin, A. Vinogradov, S. Li, A. Kawashima, G. Xie, and A. R. Yavari, Metallurgical and Materials Transactions A **42**, 1504 (2010).

23. D. V. Louzguine-Luzgin, A. Vinogradov, G. Xie, S. Li, A. Lazarev, S. Hashimoto, and A. Inoue, Philosophical Magazine A **89**, 2887 (2009).

24. A. Vinogradov, A. Danyuk, and V. A. Khonik, Journal of Applied Phys. **113**, 153503 (2013).

25. C. H. Scholz, Bulletin of the Seismological Society of America **72**, 1 (1982).

26. Г. Г. Кочарян, Г. Н. Иванченко, С. Б. Кишкина, Физика Земли **4**, 141 (2016) [G. G. Kocharyan, G. N. Ivanchenko, and S. B. Kishkina, Izvestiya, Physics of the Solid Earth **52**, 606 (2016)].

27. J. G. Anderson, S. G. Wesnousky, and M. W. Stirling, Bulletin of the Seismological Society of America **86**, 683 (1996).

28. Jeen-Hwa Wang, Terrestrial Atmospheric and Oceanic Sciences **29**, 589 (2018).

ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 3, стр. 479–499

СВЕТОИНДУЦИРОВАННАЯ СВЕРХБЫСТРАЯ ДИНАМИКА СИСТЕМ СО СПИНОВЫМ КРОССОВЕРОМ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

Ю. С. Орлов [a,b*], *С. В. Николаев* [a,b], *А. И. Нестеров* [c], *С. Г. Овчинников* [a,b]

[a] *Сибирский федеральный университет*
660041, Красноярск, Россия

[b] *Институт физики им. Л. В Киренского ФИЦ КНЦ Сибирского отеделения Российской академии наук*
660036, Красноярск, Россия

[c] *Universidad de Guadalajara, Guadalajara, Codigo Postal*
44420, Jalisco, Mexico

Поступила в редакцию 24 июля 2020 г.,
после переработки 7 декабря 2020 г.
Принята к публикации 7 декабря 2020 г.

В рамках многоэлектронной модели магнитных диэлектриков с двумя спиновыми термами на каждом катионе и со спиновым кроссовером при высоком давлении с помощью релаксационного уравнения для матрицы плотности исследована временная динамика внезапно возбужденного неравновесного спинового состояния. Получены различные времена релаксации намагниченности, чисел заполнения высокоспинового (HS) и низкоспинового (LS) состояний, а также длины связи металл–кислород для различных значений внешнего давления. Для каждого значения давления и температуры равновесное стационарное состояние согласуется с фазовыми диаграммами, полученными в рамках теории среднего поля. Начальное неравновесное состояние формируется под действием внезапного возмущения импульсом света и соответствует взаимной замене заселенностей HS- и LS-термов. Обнаружены различия времен релаксации для магнитных и упругих степеней свободы. При малом давлении для основного высокоспинового состояния, кроме стандартной экспоненциальной релаксации всех характеристик к равновесному состоянию, мы получили долгоживущие осцилляции намагниченности. Вблизи критического давления кроссовера плавная релаксация сопровождается набором высокочастотных нелинейных колебаний намагниченности и чисел заполнения HS- и LS-состояний, вызванных резонансами Франка – Кондона.

DOI: 10.31857/S0044451021030093

1. ВВЕДЕНИЕ

Сверхбыстрый магнетизм — очень активная область современной физики конденсированных сред [1–11]. С помощью метода фемтосекундной накачки-зондирования было получено множество захватывающих результатов для различных магнитных материалов, включая металлы и изоляторы, в том числе сверхбыстрое размагничивание и долгоживущая прецессия намагниченности. Подобная динамика наблюдается, например, в экспериментах по накачке-зондированию [1, 5, 12] в виде долгоживущих периодических колебаний намагниченности после оптической накачки $FeBO_3$. В настоящей работе рассматривается сверхбыстрая квантовая динамика релаксации фотовозбужденного состояния в магнитоупорядоченных веществах со спиновым кроссовером под давлением с учетом электронно-колебательного взаимодействия (за рамками адиабатического приближения) и спин-орбитального взаимодействия между высокоспиновым (HS) и низкоспиновым (LS) состояниями. Мы рассмотрели такую динамику не только при нормальных условиях, но и с повышением давления, поскольку во многих магнитных оксидах с ростом давления наблюдается спиновый кроссовер из высокоспинового в низкоспиновое состояние. Эксперименты под давлением с оптической накачкой еще не ставились. Поэтому наши результаты

* E-mail: jso.krasn@mail.ru

дают предсказания для будущих экспериментов. Мы обсудим здесь материалы, в которых переключение между высокоспиновым и низкоспиновым состояниями вызвано некоторым внешним воздействием, таким как высокое давление (обычно оксиды железа) или температура (обычно комплексы металл–лиганд в органической матрице) [13–15]. Переход HS–LS был обнаружен также при облучении светом и назван эффектом LIESST (Light-Induced Spin State Trapping) [13, 14]. Эффект LIESST в $Fe(phen)_2(NCS)_2$ недавно был изучен с помощью XANES с временным разрешением и оптической спектроскопии на XPP LCLS XFEL (рентгеновская установка накачки-зондирования в линейном источнике когерентного света) в Стэнфорде [16]. Индуцированное светом переключение LS–HS и последующая релаксация выявили локальную деформацию и вибронные колебания лигандов.

Другая группа материалов, в которых переходы HS–LS вызваны высоким давлением, — это оксиды на основе железа с ионами Fe^{3+} или Fe^{2+} [17–22] с основным HS-состоянием и спиновым кроссовером при P_C, близком к 50–60 ГПа. Эти оксиды представляют собой типичные изоляторы Мотта – Хаббарда с электронной структурой и свойствами, определяемыми сильными электронными корреляциями [23,24]. Есть еще одна уникальная группа $3d$-оксидов с основным LS-состоянием, демонстрирующая спиновый кроссовер при нагревании, — редкоземельные кобальтиты $LnCoO_3$. $LaCoO_3$ — один из ярких примеров, когда сильное взаимодействие зарядовых, спиновых и решеточных степеней свободы приводит к низкотемпературному спиновому переходу и высокотемпературному переходу полупроводник–металл [25]. Недавно была обнаружена сверхбыстрая металлизация в $LaCoO_3$ с помощью экспериментов по отражению мягкого рентгеновского излучения с временным разрешением [26]. Процесс металлизации в этом кобальтите сопровождается переходом LS–HS ионов Co^{3+} [27].

Концептуально довольно простая картина спинового кроссовера основана на ансамбле невзаимодействующих $3d$-ионов в кристаллическом поле лигандов. Внутриатомное кулоновское взаимодействие приводит к образованию электронной HS-конфигурации (правило Хунда) с выигрышем энергии хундовского обменного взаимодействия J_H. Тем не менее в кристалле большое значение кубического кристаллического поля $10Dq$ может стабилизировать LS-состояние. Существует конкуренция между обменом Хунда и кристаллическим полем. Из диаграмм Танабэ – Сугано ясно, что спиновый кроссовер может иметь место для ионных d^n-соединений с $n = 4$–7 [28]. В рамках модели невзаимодействующих ионов спиновый кроссовер при $T = 0$ представляет собой квантовый фазовый переход, а фаза типа Берри является параметром порядка [29]. Такая простая одноионная модель качественно объясняет природу кроссовера, но не может ответить на несколько важных вопросов. Является ли спиновый кроссовер термодинамическим фазовым переходом при ненулевой температуре или нет? Какие эффекты кооперативности могут быть вызваны межатомным обменным взаимодействием или взаимодействием с решеткой в состоянии равновесия и сверхбыстрой динамикой возбужденных состояний?

В литературе есть несколько упрощенных моделей, учитывающих эффекты кооперативности и влияние давления, температуры и излучения на спиновые кроссоверы [30–39]. Вибронная модель комплексов металл–лиганд [40] рассматривает спиновый кроссовер и изменение локальных колебаний в комплексах в рамках неадиабатической теории электрон-вибронного взаимодействия. Расчеты молекулярной динамики с использованием стохастического подхода Монте-Карло [41, 42] позволяют описать фотоиндуцированный переход за пределами приближения Борна – Оппенгеймера [43]. Для магнитных оксидов важны оба механизма кооперативности: межатомное обменное взаимодействие и кооперативность магнитных катионов посредством электронно-колебательного взаимодействия. В данной статье мы исследуем влияние обоих механизмов кооперативности на спиновый кроссовер.

Мы рассматриваем многоэлектронную модель магнитного оксида с двумя локальными d^n-термами (HS и LS) и межатомным обменом между катионами. Электрон-вибронное взаимодействие в этом случае особенно важно из-за большой (около 10 %) разницы ионных радиусов в HS- и LS-состояниях. Переход из состояния HS в состояние LS и обратно приводит к сильному сокращению/увеличению длины связи Me–O. Также необходимо учитывать спин-орбитальное взаимодействие, которое приводит к смешиванию HS- и LS-состояний. В рамках данной модели мы изучаем как равновесную термодинамику, так и неравновесную динамику системы.

Статья организована следующим образом. В разд. 2 мы описываем модель и выводим систему уравнений среднего поля для намагниченности антиферромагнитной подрешетки m, заселенности HS-состояния n и длины связи Me–O q. Фазовые диаграммы в координатах давление–температура и влияние кооперативности обсуждаются в разд. 3. Раздел 4 содержит результаты использования основного кинетического уравнения для рассматриваемых динамических величин. Результаты численных расчетов динамики системы при различных давлениях анализируются в разд. 5. Обсуждение результатов приведено в разд. 6.

2. ЭФФЕКТИВНЫЙ ГАМИЛЬТОНИАН МАГНИТНЫХ ДИЭЛЕКТРИКОВ СО СПИНОВЫМ КРОССОВЕРОМ

Рассмотрим трехмерную решетку с $3d^n$-ионами в каждом узле, окруженными z лигандами, с равновесной длиной связи Me–O l_0. В дальнейшем мы будем использовать термин — комплекс со спиновым кроссовером (СК-комплекс). Вместо полного набора многоэлектронных термов мы рассматриваем только два из них (HS и LS с энергиями E_{HS} и E_{LS}). Согласно одноионной модели, энергии этих термов за счет роста кристаллического поля с давлением становятся равны при некотором давлении P_{C0}, что и приводит к спиновому кроссоверу.

Для определенности ограничимся случаем $3d^6$-ионов (FeO и $Mg_{1-x}Fe_xO$), для которых $S_{HS} = S = 2$ и $S_{LS} = 0$. Для описания возможного сосуществования различных катионных термов спиновые переменные неудобны, так как они действуют только в подпространстве спиновых подуровней данного спина. Более адекватен язык операторов Хаббарда, которые могут быть построены на базисе собственных состояний катиона с учетом нескольких термов. В данном случае X-операторы Хаббарда построены на HS-состояниях с различной проекцией спина $|\sigma\rangle$ ($\sigma = -S, -S+1, \ldots, +S$) и синглетном LS-состоянии $|s\rangle$. Эффективный гамильтониан для описания влияния обменного взаимодействия между HS-состояниями с учетом вибронного и спин-орбитального взаимодействий может быть записан в виде

$$\hat{H}_{eff} = \hat{H}^{(S)} + \hat{H}^{(e,q)} + \hat{H}^{(ex)}. \tag{1}$$

Здесь первое слагаемое

$$\hat{H}^{(S)} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\hat{\mathbf{S}}_i \hat{\mathbf{S}}_j - \frac{1}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j \right) + E_{LS} \sum_i X_i^{s,s} + E_{HS} \sum_{i,\sigma=-S}^{+S} X_i^{\sigma,\sigma} \tag{2}$$

содержит антиферромагнитное обменное взаимодействие J и энергии E_{LS} и E_{HS} электронных конфигураций соответственно LS- и HS-состояний. Анализ негейзенберговских эффектов, обусловленных вкладом немагнитных LS-состояний в (2) приведен в нашей работе [44], $\Delta_S = E_{LS} - E_{HS}$ — величина спиновой щели (энергетический интервал между LS- и HS-состояниями). В дальнейшем мы будем предполагать зависимость кристаллического поля и Δ_S от давления линейной, при этом P_{C0} — величина критического давления, при котором Δ_S сменяет знак в отсутствие кооперативных эффектов, $\hat{\mathbf{S}}_i$ — оператор спина. Для $S = 2$ в представлении операторов Хаббарда [45, 46]:

$$\hat{S}_i^+ = 2X_i^{-1,-2} + \sqrt{6}X_i^{0,-1} + \sqrt{6}X_i^{+1,0} + 2X_i^{+2,+1},$$
$$\hat{S}_i^- = 2X_i^{-2,-1} + \sqrt{6}X_i^{-1,0} + \sqrt{6}X_i^{0,+1} + 2X_i^{+1,+2},$$
$$\hat{S}_i^z = -2X_i^{-2,-2} - X_i^{-1,-1} + X_i^{+1,+1} + 2X_i^{+2,+2},$$

$$\hat{n}_i = 6 \sum_{\sigma=-S}^{+S} X_i^{\sigma,\sigma} + 6X_i^{s,s}$$

— оператор числа частиц на узле i. С учетом условия полноты для X-операторов Хаббарда

$$\sum_{\sigma=-S}^{+S} X^{\sigma,\sigma} + X^{s,s} = 1, \quad \langle \hat{n}_i \rangle = 6.$$

Эффективный гамильтониан (1) был получен в работе [47] из микроскопической многозонной p–d-модели с помощью техники проекционных операторов в рамках многоэлектронного метода LDA+GTB [48, 49].

Второе слагаемое в гамильтониане (1) содержит энергию локальных полносимметричных колебаний катион-анионного комплекса (который мы рассматриваем как элементарную ячейку и называем СК-комплексом, имея в виду возможность заселенности либо HS-, либо LS-состояний при спиновом кроссовере), электронно-колебательное (вибронное) взаимодействие [50, 51] и упругое взаимодействие катионов на соседних узлах решетки

$$\hat{H}^{(e,q)} = \sum_i \left(\frac{1}{2} k \hat{q}_i^2 + \frac{\hat{p}_i^2}{2M} \right) - \sum_i \left(g_1 \hat{q}_i + g_2 \hat{q}_i^2 \right) \left(-X_i^{s,s} + \sum_{\sigma=-S}^{+S} X_i^{\sigma,\sigma} \right) - \frac{1}{2} V_q \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{q}_i \hat{q}_j, \tag{3}$$

где g_1 и g_2 — константы электронно-колебательного взаимодействия, k — константа упругой связи, $\hat{q}$ —

оператор нормальной координаты, соответствующий дыхательной моде колебаний лигандов и сопряженный ему оператор импульса $\hat{p}$, V_q — константа упругого межмолекулярного взаимодействия, M — эффективная масса осциллятора. Поскольку ионные радиусы катионов в LS- и HS-состояниях различаются достаточно сильно (разница около 10 %), в электронно-колебательном взаимодействии необходимо учитывать не только линейные, но и квадратичные по $\hat{q}$ слагаемые. Это приводит к перенормировке констант упругой связи в LS- и HS-состояниях: $k_{LS} = k + 2g_2$, $k_{HS} = k - 2g_2$. Длину связи металл–лиганд можно представить в виде $l = l_0 + \langle\hat{q}\rangle$, где l_0 — регулярная составляющая, а $\langle\hat{q}\rangle$ — аномальный вклад, возникающий из-за смещений ионов кислорода.

Третье слагаемое в гамильтониане (1)

$$\hat{H}^{(ex)} = J_x \sum_i \sum_{\sigma=-S}^{+S} \left(X_i^{s,\sigma} + X_i^{\sigma,s}\right) \tag{4}$$

смешивает HS- и LS-состояния за счет спин-орбитального взаимодействия [52].

В общем, гамильтониан (1) включает в себя взаимодействия спиновых, зарядовых и решеточных степеней свободы, что представляет собой очень сложную многочастичную задачу. По этой причине мы используем приближение среднего поля для упругого и обменного межъячеечных взаимодействий, но все взаимодействия внутри СК-комплекса учитываем точно. Тогда эффективный гамильтониан имеет вид

$$\begin{aligned}\hat{H}_{eff} = -B\sum_i \hat{S}_i^z + \Delta_S \sum_i X_i^{s,s} + \\ + \sum_i \left(\frac{1}{2}k\hat{q}_i^2 + \frac{\hat{p}_i^2}{2M}\right) - \sum_i \left(g_1\hat{q}_i + g_2\hat{q}_i^2\right) \times \\ \times \left(-X_i^{s,s} + \sum_{\sigma=-S}^{+S} X_i^{\sigma,\sigma}\right) - V_q z\,\langle\hat{q}\rangle \sum_i \hat{q}_i + \\ + J_x \sum_i \sum_{\sigma=-S}^{+S} \left(X_i^{s,\sigma} + X_i^{\sigma,s}\right) + \\ + \frac{1}{2}JzNS^2m^2 + \frac{1}{2}V_q zN\,\langle\hat{q}\rangle^2 .\end{aligned} \tag{5}$$

Здесь $B = zJSm$ — поле Вейсса, где $z = 6$ — число ближайших соседей, $m = \left\langle \hat{S}^z \right\rangle / S$ — намагниченность подрешетки; N — число узлов кристаллической решетки.

Рассмотрим представление оператора эффективного гамильтониана в матричной форме, используя ортонормированный базис функций в виде прямого произведения собственных состояний операторов проекции спина $|\alpha, s_z\rangle$, $s_z = -S, (-S+1), \ldots, +S$ в случае HS-состояния ($\alpha = 1$) и $s_z = 0$ для LS-состояния ($\alpha = 2$), и гармонического осциллятора $|n_{ph}\rangle$: $|\alpha, s_z, n_{ph}\rangle = |\alpha, s_z\rangle\,|n_{ph}\rangle$, $n_{ph} = 0, 1, 2, \ldots$ Для этого удобно воспользоваться выражениями операторов смещения

$$\hat{q}_i = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}\left(a_i + a_i^\dagger\right)$$

и импульса

$$\hat{p}_i = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{\hbar M\omega}{2}}\left(a_i - a_i^\dagger\right)$$

в представлении вторичного квантования, тогда

$$|n_{ph}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_{ph}!}}\left(a^\dagger\right)^{n_{ph}} |0, 0, \ldots, 0\rangle .$$

Такое представление соответствует введению локальных поляронов.

В этом базисе гамильтониан можно записать в матричном виде:

$$\begin{aligned}H_{\alpha s_z n_{ph}}^{\alpha' s_z' n_{ph}'} = \left\{\left[-\frac{\Delta_S}{2} - \frac{g_2\hbar\omega}{2k}\left(2n_{ph}+1\right)\right]\lambda_\alpha + \right. \\ \left. + \hbar\omega\left(n_{ph} + \frac{1}{2}\right) - (zJSm)\, s_z\right\} \delta_{s_z s_z'}\delta_{\lambda_\alpha\lambda_{\alpha'}}\delta_{n_{ph}n'_{ph}} + \\ + \frac{1}{2}\left(zJS^2m^2 + V_q z\langle\hat{q}\rangle^2\right)\delta_{s_z s'_z}\delta_{\lambda_\alpha\lambda_{\alpha'}}\delta_{n_{ph}n'_{ph}} + \\ + J_x\delta_{\lambda_\alpha,-\lambda_{\alpha'}}\delta_{n_{ph}n'_{ph}} - \lambda_\alpha g_1\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2k}} \times \\ \times \left(\sqrt{n_{ph}}\,\delta_{n_{ph}-1,n'_{ph}} + \sqrt{n_{ph}+1}\,\delta_{n_{ph}+1,n'_{ph}}\right) \times \\ \times \delta_{\lambda_\alpha\lambda_{\alpha'}}\delta_{s_z s'_z} - V_q z\,\langle\hat{q}\rangle\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2k}} \times \\ \times \left(\sqrt{n_{ph}}\,\delta_{n_{ph}-1,n'_{ph}} + \sqrt{n_{ph}+1}\,\delta_{n_{ph}+1,n'_{ph}}\right) \times \\ \times \delta_{\lambda_\alpha\lambda_{\alpha'}}\delta_{s_z s'_z} - \\ - \lambda_\alpha g_2\frac{\hbar\omega}{2k}\left(\sqrt{n_{ph}\left(n_{ph}-1\right)}\,\delta_{n_{ph}-2,n'_{ph}} + \right. \\ \left. + \sqrt{\left(n_{ph}+2\right)\left(n_{ph}+1\right)}\,\delta_{n_{ph}+2,n'_{ph}}\right)\delta_{\lambda_\alpha\lambda_{\alpha'}}\delta_{s_z s'_z},\end{aligned} \tag{6}$$

где $\lambda_\alpha = 1$, если $\alpha = 1$ и $\lambda_\alpha = -1$, если $\alpha = 2$.

Набор собственных волновых функций можно представить в виде

$$|\varphi_k\rangle = \sum_{n_{ph}=0}^{N_{ph}} \Big[a_{n_{ph},k}\,|2,0,n_{ph}\rangle + \\ + \sum_{s_z=-S}^{+S} b_{n_{ph},s_z,k}\,|1,s_z,n_{ph}\rangle\Big], \quad (7)$$

где N_{ph} — максимальное число фононов, подбираемое из следующего условия: начиная с этого числа добавка еще одного фонона при заданной величине электронно-колебательного взаимодействия перестает менять энергию основного состояния $|\varphi_0\rangle$ ($E_0\,(N_{ph}+1) \approx E_0\,(N_{ph})$, погрешность вычисления меньше 1 %) и весовые коэффициенты

$$a_{n_{ph},0}\,(N_{ph}+1) \approx a_{n_{ph},0}\,(N_{ph})\,,$$
$$b_{n_{ph},s_z,0}\,(N_{ph}+1) \approx b_{n_{ph},s_z,0}\,(N_{ph})\,;$$

при рассмотрении различных температурных эффектов необходимо отслеживать неизменность энергии E_k ближайших к основному возбужденных состояний $|\varphi_k\rangle$ и весовых коэффициентов

$$a_{n_{ph},k}\,(N_{ph}+1) \approx a_{n_{ph},k}\,(N_{ph})\,,$$
$$b_{n_{ph},s_z,k}\,(N_{ph}+1) \approx b_{n_{ph},s_z,k}\,(N_{ph})\,.$$

Другими словами, N_{ph} определяет число фононов, которое необходимо учесть при данной величине электронно-колебательного взаимодействия, чтобы сформировалась «фононная шуба» основного и ближайших возбужденных состояний (хвост фононной шубы не превышал 0.01 от максимума шубы, т. е. относительная погрешность вычислений так же меньше 1 %). В наших расчетах $N_{ph} = 300$–500 в зависимости от значений используемых параметров и величины давления и температуры. Для $3d^6$-ионов в HS-состоянии электронная $t_{2g}^4 e_g^2$-конфигурация имеет трехкратное орбитальное вырождение, которое для простоты не показано в (7), но учитывается в численных расчетах. Многофононные вклады в волновой функции (7) приводят к резонансам Франка–Кондона при возбуждении таких состояний [53]. Тогда квантовомеханические средние операторов заселенности HS-состояния $\hat{n}_{HS}$, смещения $\hat{q}$ и проекции спина $\hat{S}^z$ будут равны

$$\langle \hat{n}_{HS}\rangle_k = \left\langle \varphi_k \left| \sum_{\sigma=-S}^{+S} X^{\sigma,\sigma} \right| \varphi_k \right\rangle = \\ = \sum_{n_{ph}=0}^{N_{ph}} \sum_{s_z=-S}^{+S} \left|b_{n_{ph},s_z,k}\right|^2, \quad (8)$$

$$\langle \hat{q}\rangle_k = \langle \varphi_k\,|\hat{q}_k|\,\varphi_k\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}} \sum_{n_{ph}=0}^{N_{ph}} \sqrt{n_{ph}}\,\times \\ \times \left(a_{n_{ph},k}a_{n_{ph}-1,k} + \sum_{s_z=-S}^{+S} b_{n_{ph},s_z,k}b_{n_{ph}-1,s_z,k}\right) + \\ + \sqrt{n_{ph}+1}\left(a_{n_{ph},k}a_{n_{ph}+1,k} + \\ + \sum_{s_z=-S}^{+S} b_{n_{ph},s_z,k}b_{n_{ph}+1,s_z,k}\right), \quad (9)$$

$$\left\langle \hat{S}^z \right\rangle_k = \left\langle \varphi_k \left| \hat{S}^z \right| \varphi_k \right\rangle = \\ = \sum_{n_{ph}=0}^{N_{ph}} \sum_{s_z=-S}^{+S} s_z \left|b_{n_{ph},s_z,k}\right|^2. \quad (10)$$

Их квантовостатистические средние равны

$$n = \langle \hat{n}_{HS}\rangle = \sum_k \frac{\langle \hat{n}_{HS}\rangle_k e^{-E_k/k_BT}}{Z}, \quad (11)$$

$$q = \langle \hat{q}\rangle = \sum_k \frac{\langle \hat{q}\rangle_k e^{-E_k/k_BT}}{Z}, \quad (12)$$

$$m = \frac{\left\langle \hat{S}^z \right\rangle}{S} = \frac{1}{S}\sum_k \frac{\left\langle \hat{S}^z \right\rangle_k e^{-E_k/k_BT}}{Z}, \quad (13)$$

где $Z = \sum_k e^{-E_k/k_BT}$ — статистическая сумма. Наличие LS-терма не позволяет записать намагниченность в виде функции Бриллюэна. Здесь проявляется отличие от модели Гейзенберга, где намагниченность уменьшается с ростом температуры за счет выравнивания чисел заполнения состояний с противоположными проекциями спина. В нашем случае (и всегда при учете возбужденных состояний) появляется дополнительный канал подавления намагниченности, связанный с постепенным заселением низкоспинового состояния. Такое поведение мы называем негейзенберговским.

Прежде чем перейти к численному моделированию, мы хотели бы обсудить типичные для $3d$-оксидов параметры. Наиболее изученными при высоком давлении являются Fe_2O_3 и некоторые другие оксиды с $3d^5$-(Fe^{3+}) ионом со значением $S = 5/2$ (HS) и $S = 1/2$ (LS) и $P_C = 47$ ГПа для $FeBO_3$ [21]. В этой статье мы рассматриваем спиновый кроссовер в оксидах с $3d^6$-ионами, которые имеют $S = 2$ (HS) и $S = 0$ (LS), примером является $Fe_xMg_{1-x}O$ с $P_C = 55$ ГПа [54]. Значения спиновой щели для всех $3d^n$-ионов приведены в [55]. Для Fe^{2+} выражение для спиновой щели может быть записано в виде $\Delta_S = 2(2J_H - 10Dq)$, где J_H — интеграл внутриатомного обменного взаимодействия Хунда, стабилизирующий HS-состояние, а $10Dq$ — параметр кубического кристаллического поля, стабилизирующий LS-состояние. С увеличением давления и уменьшением межатомного расстояния кристаллическое поле и эффективное межатомное обменное взаимодействие линейно возрастают как $10Dq\,(P) = 10Dq\,(0) + \alpha_\Delta P$ [54] и $J\,(P) = J_0 + bP$ [54]. Из-за линейного увеличения кристаллического поля с ростом давления выражение для спиновой щели может быть записано в виде $\Delta_S = a\,(P_{C0} - P)$ с $a = 2\alpha_\Delta$ и критическим значением давления P_{C0}, которое определяло бы кроссовер при отсутствии эффектов кооперативности. Из-за наличия этих эффектов критическое давление P_C, при котором происходит кроссовер, отличается от P_{C0}, что будет показано в разд. 3. Для ионов железа типичными значениями являются $J_H = 0.8$ эВ и $\Delta_S \sim 1$ эВ. Например, кристаллическое поле при нулевом давлении $10Dq\,(0) = 1.57$ эВ для $FeBO_3$ было определено из оптических спектров [56–58].

Значение параметра J_x, приводящего к смешиванию HS- и LS-состояний из-за спин-орбитального взаимодействия, мы можем оценить, зная энергию магнитной анизотропии. HS-терм иона Fe^{3+} имеет нулевой орбитальный момент. Энергия анизотропии, индуцированная спин-орбитальным взаимодействием, появляется во втором порядке теории возмущений $E_a = J_x^2/\Delta_S$. Для иона Fe^{2+} учет спин-орбитального взаимодействия в первом порядке теории возмущений приводит к расщеплению HS-терма на подуровни с полным эффективным угловым моментом $\tilde{J} = 1, 2, 3$, но не смешивает HS-и LS-состояния [59]. Параметр перемешивания (4) появляется во втором порядке теории возмущений. Типичное значение энергии анизотропии около 1 мэВ. Для спиновой щели $\Delta_S \sim 1$ эВ мы получаем $J_x = 30$ мэВ. Ниже мы рассмотрим несколько значений параметра перемешивания J_x в диапазоне 10–50 мэВ.

Остальные параметры были фиксированы следующим образом: $z = 6$, $J_0 = 28$ K, $P_{C0} = 55$ ГПа, $a = 80$ К/ГПа, $b = 0.5$ К/ГПа [54], $\omega = 0.05$ эВ, $k = 7.5$ эВ/Å^2 , $g_1 = 0.8$ эВ/Å, $g_2 = 0.75$ эВ/Å^2, $V_q = 0.2$ эВ/Å [40]. Еще два параметра, связанные с релаксацией возбуждений, будут введены в разд. 4 после формулы (23).

Из-за ангармонизма в электрон-фононном взаимодействии (3) частоты локальных колебаний различаются в HS- и LS-состояниях $\omega_{HS} = \sqrt{k_{HS}/M}$ и $\omega_{LS} = \sqrt{k_{LS}/M}$. Для выбранных значений параметров $\omega_{HS} = 0.045$ эВ, $\omega_{LS} = 0.055$ эВ. Рост частоты при переходе в более плотную низкоспиновую решетку очевиден. В отсутствие спин-орбитального взаимодействия равновесные положения лигандов, соответствующие минимумам потенциальной энергии, в LS- и HS-состояниях определяются выражениями

$$q_{LS}^0 = -g_1/k_{LS}, \quad q_{HS}^0 = g_1/k_{HS}.$$

Для выбранных значений параметров

$$q_{LS}^0 = -0.09\ \text{Å}, \quad q_{HS}^0 = 0.13\ \text{Å},$$

$$\Delta q^0 = q_{HS}^0 - q_{LS}^0 = 0.22\ \text{Å}.$$

Поскольку длина связи l_0 при $T = 0$ порядка 2 Å, Δq^0 составляет 10 % от этой величины. Это число согласуется с известной разностью ионных радиусов в LS- и HS-состояниях. Видно, что в отсутствие электронно-колебательного взаимодействия $q_{LS(HS)}^0 = 0$ изменение объема системы с ростом температуры возможно только из-за ангармонизма колебаний кристаллической решетки.

Объем элементарной ячейки как функцию давления и температуры можно представить как

$$V\,(P,T) = V_r\,(P,T) + \Delta V\,(P,T)\,,$$

где $V_r\,(P,T)$ — регулярная составляющая, обусловленная ангармонизмом колебаний решетки, и $\Delta V\,(P,T) \sim q^3$ — аномальный вклад, возникающий из-за вибронного взаимодействия. Кроме того, в случае материалов со спиновым кроссовером большой вклад в аномалию теплового расширения вносит перераспределение концентрации ионов в HS-, LS-состояниях из-за большой разницы в ионных радиусах [60].

3. ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА *P–T*

Рассмотрим сначала самосогласованное решение уравнений (6)–(8) в отсутствие обменного взаимодействия при $J = 0$. В этом случае будем иметь $m = 0$ для намагниченности и резкий скачок заселенности HS-состояния n и смещения q (объема элементарной ячейки) в точке кроссовера P_{C0} при $T = 0$, соответствующий квантовому фазовому переходу. При $J = 0$ и $T = 0$ спиновый кроссовер является квантовым фазовым переходом, который с ростом температуры размывается в плавный кроссовер

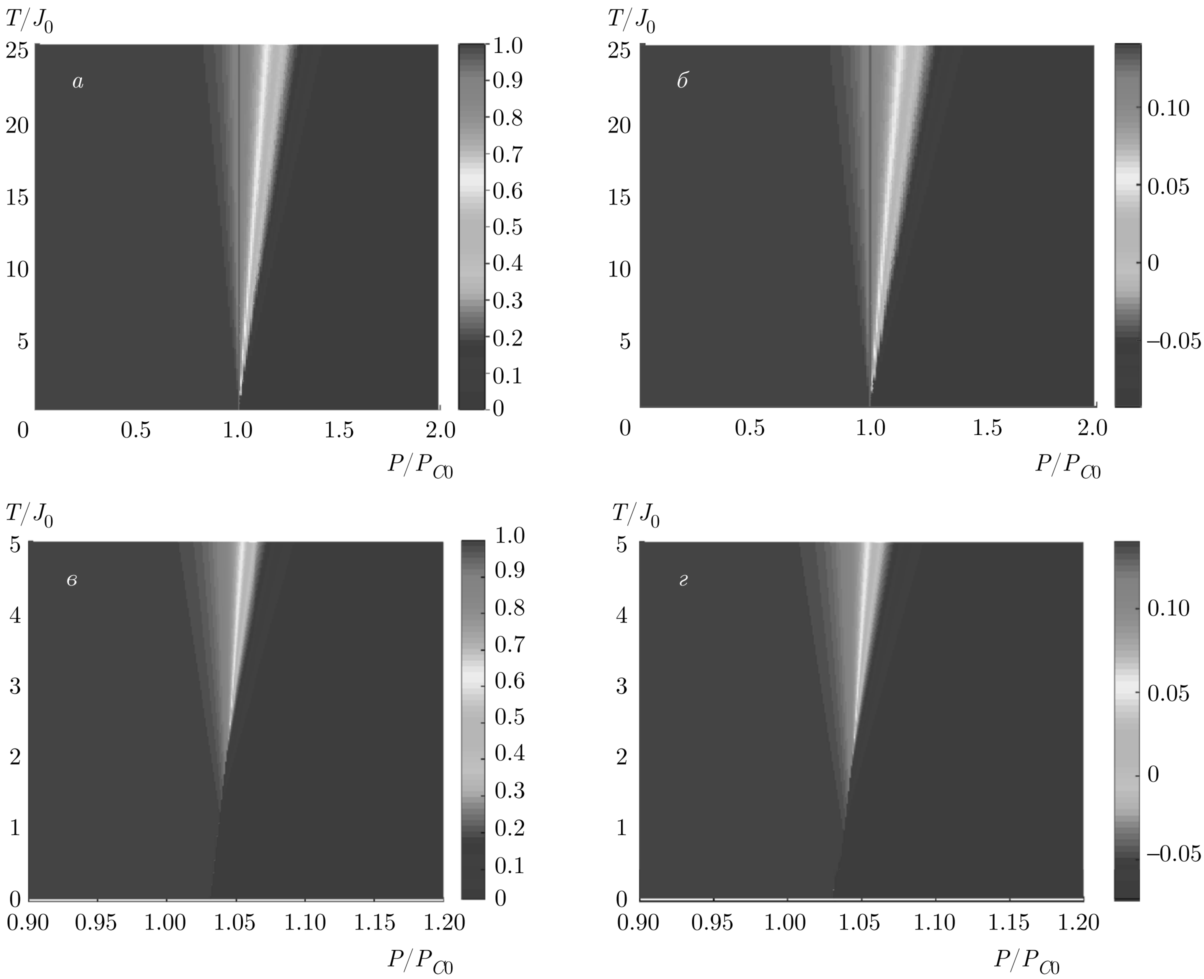


Рис. 1. Фазовые диаграммы $P-T$ для заселенности HS-состояния n (*а,в*) и смещения q (*б,г*) в отсутствие обменного взаимодействия $J=0$. На рис. *в* и *г* показана увеличенная область вблизи критической точки, где хорошо виден резкий спиновый переход при низких температурах

между HS- и LS-состояниями (рис. 1*а,б*). Тем не менее, даже при $J=0$ мы имеем другой тип кооперативности, обусловленный электрон-вибронным взаимодействием. На рис. 1*в,г* мы видим небольшой но конечный температурный диапазон резкого кроссовера вблизи критического давления. При $J=0$ кроссовер от парамагнитного состояния HS к немагнитному LS сопровождается изоструктурным фазовым переходом с изменением объема (рис. 1*г*). Для удобства сравнения случаев $J=0$ и $J\neq 0$ здесь и ниже внешнее давление и температура приведены соответственно в единицах P_{C0} и обменного взаимодействия J_0.

На рис. 2 в координатах давления и температуры представлены диаграммы заселенности HS-состояния n (*а*), намагниченности m (*б*) и смещения q (*в*) при $J\neq 0$. Для заданных значений температуры и давления возможно появление нескольких решений для параметров m, n и q, из которых мы выбираем решения, соответствующие минимуму свободной энергии Гельмгольца $F=-k_BT\ln Z$. Видно, что из-за наличия кооперативного обменного взаимодействия J в системе сохраняется основное магнитоупорядоченное антиферромагнитное HS-состояние (AFM (HS)) вплоть до $P=P_C>P_{C0}$ (рис. 2*б*), несмотря на то, что в одноионной картине при $P>P_{C0}$ основным является LS-состояние. Сдвиг критического давления P_C за счет кооперативных эффектов вполне понятен, так как обменное взаимодействие больше стабилизирует HS-состояние. При $P>P_C$ основное антиферромагнитное HS-состояние сменяется диамагнитным LS-состоянием (DM (LS)) (рис. 2*б*), а объем испытывает скачок в точке перехода $P=P_C$ (рис. 2*в*).

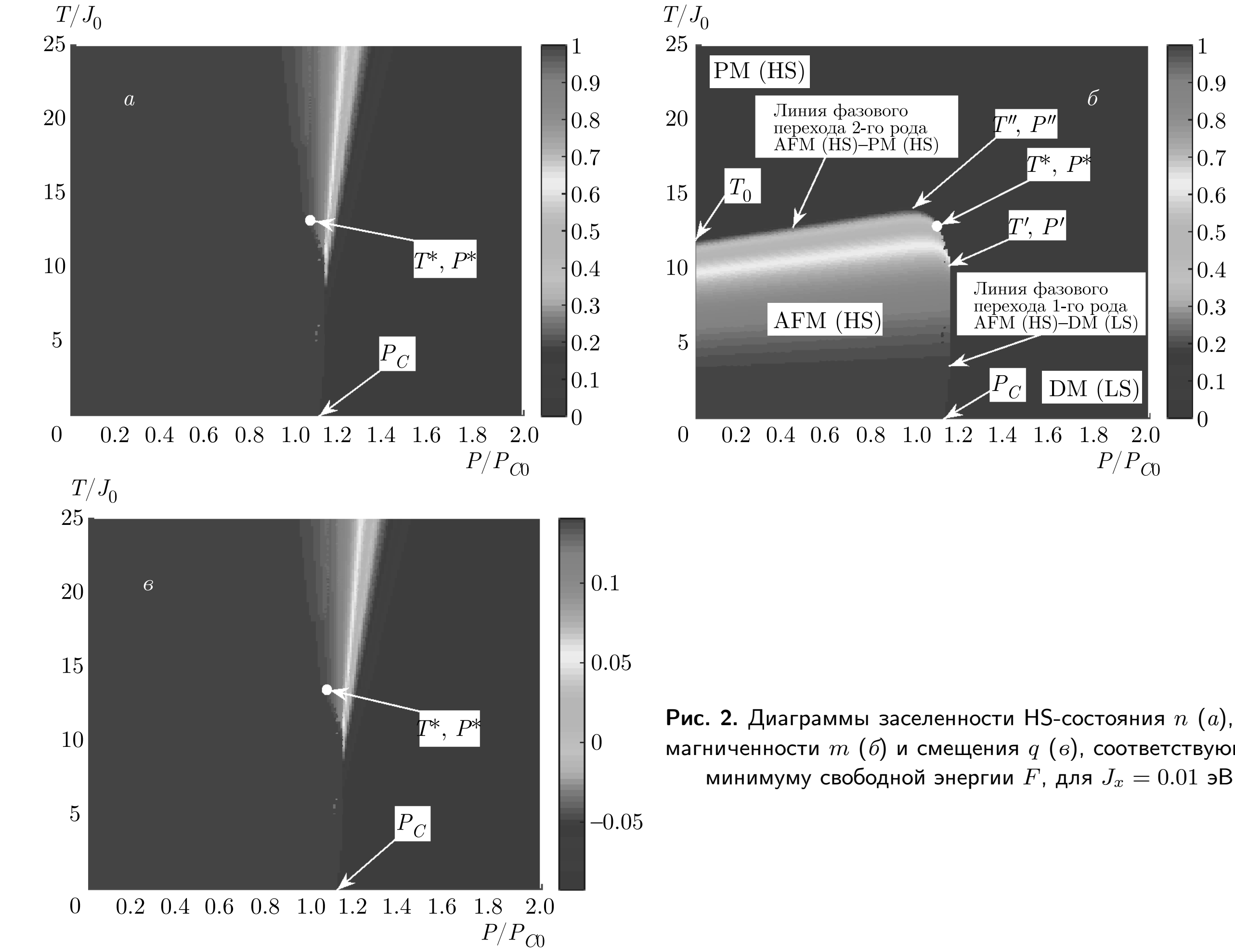
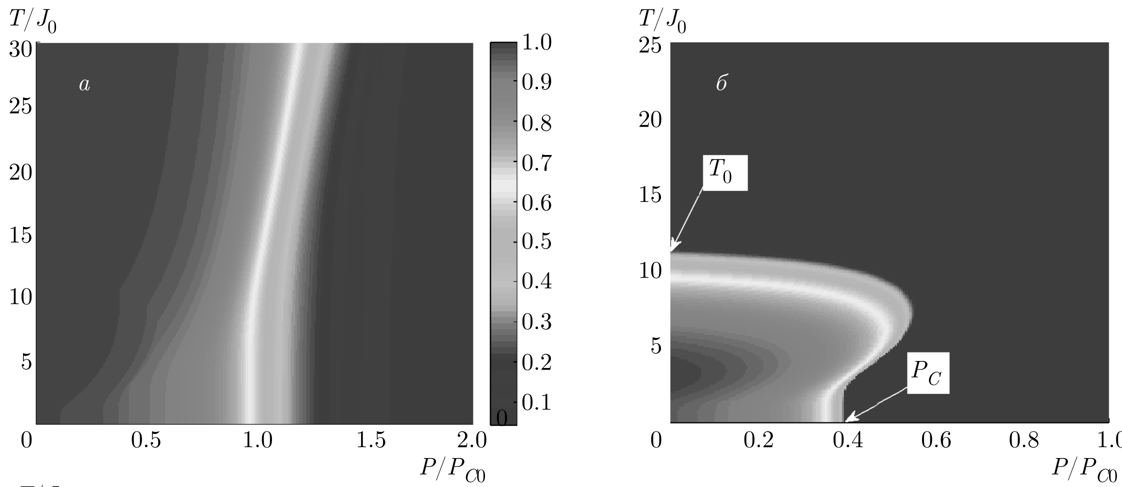


Рис. 2. Диаграммы заселенности HS-состояния n (a), намагниченности m ($б$) и смещения q ($в$), соответствующие минимуму свободной энергии F, для $J_x = 0.01$ эВ

В области давлений $P < P_C$ (рис. 2$б$) с ростом температуры система испытывает фазовый переход второго рода из AFM (HS) в парамагнитное состояние, если $P < P^*$, и первого рода, если $P^* < P < P_C$. В первом случае наблюдается плавное изменение объема, а во втором, наоборот, резкое (рис. 2$в$). На P–T-диаграммах хорошо видно существование особой точки, так называемой трикритической точки (T^* и P^* на рис. 2$б$), в которой линия фазовых переходов второго рода непрерывно переходит в линию фазовых переходов первого рода. При $P_C < P \leq P'$ основное состояние системы является немагнитным, но с ростом температуры заселяется магнитное HS-состояние, и в системе путем фазового перехода первого рода восстанавливается дальний магнитный порядок (рис. 2$б$), как энергетически более выгодный, объем системы меняется скачком (рис. 2$в$). Таким образом, благодаря антиферромагнитному обменному взаимодействию J в окрестности кроссовера возможно существование возвратной намагниченности. При дальнейшем увеличении температуры система переходит в парамагнитное состояние путем фазового перехода второго рода, если $P_C < P \leq P^*$, и первого рода близкого ко второму, если $P^* < P \leq P'$. С ростом давления при $P > P_C$ увеличивается энергетический интервал между основным немагнитным LS- и ближайшим возбужденным магнитным HS-состоянием и при $P > P'$ (рис. 2$б$) тепловая энергия, необходимая для заселения HS-состояния в нужной степени, становится сопоставимой с величиной обменного взаимодействия J — дальний магнитный порядок не возникает. В области давлений $P > P'$ с ростом температуры система испытывает плавный переход (кроссовер) из DM (LS) в парамагнитное состояние.

Кроме существования возвратной намагниченности по температуре при $P_C < P \leq P'$, с учетом увеличения обменного интеграла с ростом давления становится возможным существование возвратной намагниченности по давлению при $T_0 < T \leq T'$, где T_0 — температура Нееля при $P = 0$, а T' — максимально возможное значение температуры Нееля при увеличении давления. Так, при $T_0 < T \leq T'$ (рис. 2$б$) система из парамагнитного состояния при



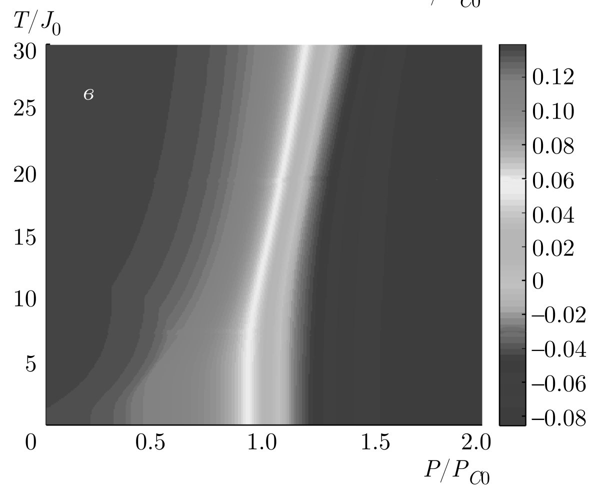


Рис. 3. Диаграммы заселенности HS-состояния n (*а*), намагниченности m (*б*) и смещения q (*в*), соответствующие минимуму свободной энергии F, для $J_x = 0.05$ эВ

увеличении давления сначала переходит в магнитоупорядоченное антиферромагнитное состояние путем фазового перехода второго рода, а потом в парамагнитное путем фазового перехода второго рода, если $T^* < T_0$ и либо первого рода, если $T^* > T_0$ и $T_0 < T < T^*$, либо второго рода, если $T^* > T_0$, но $T^* < T < T'$. В нашем случае для используемого набора параметров $T^* > T_0$. При $0 \le T \le T^*$ с ростом давления объем системы меняется скачком, а при $T > T^*$ — непрерывным образом (рис. 2*в*).

Увеличение спин-орбитального параметра J_x сильно влияет на намагниченность и уменьшает температуру Нееля с увеличением давления. Одновременно зависимости $n(P)$ и $q(P)$ показывают незначительные изменения, проявляющиеся в основном в более плавном кроссовере. Причину такого сильного подавления намагниченности можно легко понять, если посмотреть на структуру гамильтониана (4), в котором оператор $X^{s,\sigma}$ переводит HS-состояние со спином σ в синглетное LS-состояние $|s\rangle$, т. е. спин-орбитальное взаимодействие перемешивает HS/LS-состояния. Фазовая диаграмма для $J_x = 0.05$ эВ представлена на рис. 3.

Температура Нееля при нулевом давлении $T_0/J_0 \sim 12$ является одинаковой для обоих случаев (рис. 2, 3), но температурная зависимость намагниченности существенно изменяется с увеличением величины J_x. Хорошо видно существование возвратной намагниченности по температуре и давлению (рис. 3*б*), но в отличие от предыдущего случая ($J_x = 0.01$ эВ) уменьшается область существования дальнего магнитного порядка. Так, на рис. 3 наблюдается значительное уменьшение P_C ($P_C < P_{C0}$). Кроме того, существенным отличием является плавное изменение намагниченности m при $T = 0$, отсутствие термодинамических фазовых переходов первого рода и трикритической точки на фазовой диаграмме. Заселенность HS-состояния n и смещение q плавно меняются во всем диапазоне давлений, что хорошо видно на рис. 3*а,в*. Все характеристики системы изменяются непрерывным образом (без скачков).

4. НЕРАВНОВЕСНАЯ КВАНТОВАЯ ДИНАМИКА И РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ

Для исследования процессов релаксации необходимо учесть взаимодействие системы с некоторой внешней средой. Рассмотрим релаксацию СК-комплекса, помещенного в равновесную среду (термостат или резервуар R), при внезапном возбуждении светом из HS- в LS-состояние и наоборот, в зависимости от величины внешнего давления P. Гамильтониан полной системы запишем в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_R + \hat{V}. \qquad (14)$$

Здесь

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_{MF} = \sum_k E_k \left|\varphi_k\right\rangle \left\langle\varphi_k\right|$$

— гамильтониан СК-комплекса в приближении среднего поля;

$$\hat{H}_R = \sum_q \hbar\omega_q b_q^\dagger b_q$$

— гамильтониан термостата R, где $b_q^\dagger$ (b_q) — операторы рождения (уничтожения) фононов термостата с волновым вектором q; $\hat{V} = \hat{V}_{v-ph} + \hat{V}_{s-ph}$ — гамильтониан взаимодействия между СК-комплексом и термостатом, где

$$\hat{V}_{v-ph} = \sum_q \left(g_{v-ph,q} b_q^\dagger a + g^*_{v-ph,q} b_q a^\dagger\right),$$

$$\hat{V}_{s-ph} = \sum_q \left(g_{s-ph,q} b_q^\dagger \hat{S}^+ + g^*_{s-ph,q} b_q \hat{S}^-\right),$$

где $a^\dagger$ (a) — операторы рождения (уничтожения) квантов локальных колебаний анионов СК-комплекса, g_{v-ph} и g_{s-ph} — константы соответственно виброн-фононного и спин-фононного взаимодействия.

Рассмотрим динамику системы в терминах редуцированной матрицы плотности (РМП) $\hat{\rho}_0(t)$, используя уравнение

$$\frac{d\hat{\rho}_0}{dt} = -i\left[\hat{H}_0(t), \hat{\rho}_0\right] + \hat{V}\hat{\rho}_0. \qquad (15)$$

Влияние системы на термостат пренебрежимо мало, поэтому последний все время находится в состоянии теплового равновесия. Термостат имеет так много степеней свободы, что результат взаимодействия с системой быстро исчезает и не оказывает сколько-нибудь значительной обратной реакции на систему, поэтому R всегда описывается с помощью теплового равновесного распределения при постоянной температуре независимо от количества энергии, перешедшей в него из системы. Другими словами, мы предполагаем, что можно пренебречь реакцией системы на термостат и корреляциями между рассматриваемой системой и термостатом R, вызванными взаимодействием.

Взаимодействие наблюдаемой системы с резервуаром приводит к уничтожению информации о ее поведении в прошлом. Движение системы демпфируется за счет ее связи с термостатом [61–64]. Поэтому можно считать, что изменение $\hat{\rho}_0(t)$ в каждый момент времени зависит только от ее текущего значения (марковское приближение). Если корреляционное время резервуара много меньше характерного времени, требуемого для заметного изменения $\hat{\rho}_0(t)$, то марковское приближение справедливо.

В базисе собственных функций гамильтониана подсистемы $\hat{H}_0$ уравнение (15) после некоторых преобразований и перехода от представления взаимодействия к представлению Шредингера принимает вид уравнения Редфилда [65]:

$$\frac{d}{dt}\rho^0_{kl} = -i\omega_{kl}\rho^0_{kl} - \sum_{m,n}\rho^0_{mn}R_{klmn}. \qquad (16)$$

Первое слагаемое в (16) описывает обратимые процессы в терминах частот переходов

$$\omega_{kl} = \frac{E_k - E_l}{\hbar}$$

между уровнями энергии системы, а второе слагаемое — процессы релаксации. Отметим, что приближение Редфилда справедливо на временах $\Delta t \gg \tau_c$, где τ_c есть корреляционное время резервуара, и вторым одновременным условием является требование $R_{klmn}\Delta t \ll 1$ [62]. Уравнение Редфилда (16) — это основное уравнение квантовой теории диссипации в приближении слабой связи «система–термостат». Оно описывает необратимое поведение системы и этим коренным образом отличается от точных уравнений движения — Шредингера и Лиувилля–фон Неймана. Для СК-системы с двумя каналами взаимодействия с резервуаром тензор релаксации (тензор Редфилда)

$$R_{klmn} = \sum_p \delta_{nl}\Gamma^+_{kppm} + \sum_p \delta_{km}\Gamma^-_{nppl} - \Gamma^+_{nlkm} - \Gamma^-_{nlkm}.$$

Здесь величины Γ_{klmn} даются выражениями

$$\begin{aligned}
\Gamma^{+}_{mkln} &= \frac{1}{\hbar^2}\int\limits_0^\infty dt \exp\left(-it\omega_{ln}\right) \times \\
&\quad \times Tr_R\left(V_{mk}\left(t\right)V_{ln}\left(0\right)\rho_R\left(0\right)\right), \\
\Gamma^{-}_{mkln} &= \frac{1}{\hbar^2}\int\limits_0^\infty dt \exp\left(-it\omega_{mk}\right) \times \\
&\quad \times Tr_R\left(V_{mk}\left(0\right)V_{ln}\left(t\right)\rho_R\left(0\right)\right),
\end{aligned} \qquad (17)$$

где $V_{mk}(t)$ — матричные элементы оператора $\hat{V}$ в представлении взаимодействия. Разные элементы тензора Редфилда дают неодинаковый вклад в динамику матрицы плотности. Влияние многих из них становится пренебрежимо малым при усреднении по некоторому промежутку времени. Роль элемента R_{klmn} $(\omega_{kl} \neq \omega_{mn})$ является существенной только на временах $t < (\omega_{kl} - \omega_{mn})^{-1}$. Это служит основой секулярного приближения, в котором в уравнении Редфилда учитывают только слагаемые, удовлетворяющие условию

$$E_k - E_m + E_n - E_l = 0.$$

В этом приближении уравнение Редфилда (16) приобретает следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho^0_{kl} = -i\omega_{kl}\rho^0_{kl} + \delta_{kl}\sum_{n\neq l}\rho^0_{nn}W_{ln} - \gamma_{kl}\rho^0_{kl}, \qquad (18)$$

где

$$W_{ln} = \Gamma^{+}_{nlln} + \Gamma^{-}_{nlln},$$

$$\gamma_{kl} = \sum_n\left(\Gamma^{+}_{knnk} + \Gamma^{-}_{lnnl}\right) - \Gamma^{+}_{llkk} - \Gamma^{-}_{llkk}.$$

В таком виде уравнение движения для РМП называют обобщенным основным кинетическим уравнением. Для диагональных элементов РМП оно принимает вид

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho^0_{kk}(t) = \sum_{n\neq k}\rho^0_{nn}(t)W_{kn} - \rho^0_{kk}(t)\sum_{n\neq k}W_{nk}, \qquad (19)$$

где коэффициенты W_{kn} имеют смысл вероятностей перехода между состояниями системы, вызванными взаимодействием с термостатом. Уравнение (19) часто называют основным кинетическим уравнением Паули.

Если $\hat{Q}_0$ — оператор, действующий на переменные только интересующей нас подсистемы (в нашем случае в качестве $\hat{Q}_0$ выступают операторы $\hat{m}$, $\hat{n}$, $\hat{q}$), тогда среднее значение некоторой величины, определяемой этим оператором, запишется в виде

$$\left\langle \hat{Q}_0 \right\rangle = \mathrm{Tr}\,\hat{Q}_0\hat{\rho}^0(t).$$

Перейдем к конкретным приложениям теории Редфилда. Оператор взаимодействия представим в виде суммы произведений операторов, действующих на переменные соответственно динамической подсистемы и термостата:

$$\begin{aligned}
\hat{V}_{\upsilon-ph} &= \sum_q\Bigg(g_{\upsilon-ph,q}b^\dagger_q\sum_{ij}\left|\varphi_i\right\rangle\left\langle\varphi_i\left|a\right|\varphi_j\right\rangle\left\langle\varphi_j\right| + \\
&\quad + g^*_{\upsilon-ph,q}b_q\sum_{ij}\left|\varphi_i\right\rangle\left\langle\varphi_i\left|a^\dagger\right|\varphi_j\right\rangle\left\langle\varphi_j\right|\Bigg), \\
\hat{V}_{\upsilon-ph} &= \sum_{ij,q}\left(g_{\upsilon-ph,q}b^\dagger_q a_{ij} + g^*_{\upsilon-ph,q}b_q a^*_{ji}\right)\left|\varphi_i\right\rangle\left\langle\varphi_j\right| = \\
&= \sum_{ij}\hat{B}^{\upsilon-ph}_{ij}\hat{Q}_{ij},
\end{aligned}$$

где

$$\left\langle\varphi_i\left|a\right|\varphi_j\right\rangle = a_{ij}, \quad \hat{Q}_{ij} = \left|\varphi_i\right\rangle\left\langle\varphi_j\right|$$

и

$$\hat{B}^{\upsilon-ph}_{ij} = \sum_q\left(g_{\upsilon-ph,q}b^\dagger_q a_{ij} + g^*_{\upsilon-ph,q}b_q a^*_{ji}\right).$$

Аналогично для спин-фононного взаимодействия

$$\hat{V}_{s-ph} = \sum_{ij}\hat{B}^{s-ph}_{ij}\hat{Q}_{ij},$$

где

$$\hat{B}^{s-ph}_{ij} = \sum_q\left(g_{s-ph,q}b^\dagger_q s_{ij} + g^*_{s-ph,q}b_q s^*_{ji}\right),$$

$$\left\langle\varphi_i\left|\hat{S}^+\right|\varphi_j\right\rangle = s_{ij}.$$

Окончательно

$$\hat{V} = \sum_{ij}\left(\hat{B}^{\upsilon-ph}_{ij} + \hat{B}^{s-ph}_{ij}\right)\hat{Q}_{ij} = \sum_{ij}\hat{B}_{ij}\hat{Q}_{ij},$$

$$\hat{B} = \left(\hat{B}_{\upsilon-ph} + \hat{B}_{s-ph}\right).$$

Матричные элементы тензоров релаксации примут вид

$$\begin{aligned}
\Gamma^{+}_{mkln} &= \int\limits_0^\infty d\tau e^{-i\omega_{ln}\tau}\left\langle\hat{B}_{mk}\hat{B}_{ln}(\tau)\right\rangle_R, \\
\Gamma^{-}_{mkln} &= \int\limits_0^\infty d\tau e^{-i\omega_{mk}\tau}\left\langle\hat{B}_{mk}(\tau)\hat{B}_{ln}\right\rangle_R,
\end{aligned} \qquad (20)$$

где $\hat{B}(\tau) = e^{i\hat{H}_{ph}\tau}\hat{B}e^{-i\hat{H}_{ph}\tau}$.

Для виброн-фононного канала релаксации прямые вычисления приводят к

$$\Gamma_{nlln}^{(\upsilon-ph)+} = = |a_{ln}|^2 \int_0^\infty \sum_q |g_{\upsilon-ph,q}|^2 \langle \hat{n}_q \rangle_R e^{i(\omega_q-\omega_{ln})\tau} d\tau + + |a_{ln}|^2 \int_0^\infty \sum_q |g_{\upsilon-ph,q}|^2 \left(\langle \hat{n}_q \rangle_R + 1 \right) e^{-i(\omega_q-\omega_{nl})\tau} d\tau$$

или приближенно

$$\Gamma_{nlln}^{(\upsilon-ph)+} = \gamma_0^{\upsilon-ph} \left[|a_{ln}|^2 n_{BE}(\omega_{ln}) + + |a_{ln}|^2 \left(n_{BE}(\omega_{nl}) + 1 \right) \right], \quad (21)$$

где n_{BE} — функция распределения Бозе–Эйнштейна.

Аналогично для спин-фононного канала релаксации будем иметь

$$\Gamma_{nlln}^{(s-ph)+} = \gamma_0^{s-ph} \left[|s_{ln}|^2 n_{BE}(\omega_{ln}) + + |s_{ln}|^2 \left(n_{BE}(\omega_{nl}) + 1 \right) \right]. \quad (22)$$

Смешанные произведения типа $V_{\upsilon-ph}(t)$ $V_{s-ph}(0)$ в выражениях (17) дают значительно меньший вклад, и соответствующими слагаемыми можно пренебречь по сравнению с выражениями (21), (22).

Окончательно

$$\Gamma_{nlln}^{+} \approx \Gamma_{nlln}^{(\upsilon-ph)+} + \Gamma_{nlln}^{(s-ph)+}. \quad (23)$$

В нашем случае $\Gamma_{nlln}^{+} = \Gamma_{nlln}^{-}$, $\Gamma_{llkk}^{+} = \Gamma_{llkk}^{-} = 0$.

Коэффициенты $\gamma_0^{\upsilon-ph}$ и γ_0^{s-ph} в уравнениях (21), (22), характеризующие динамику системы и отвечающие за виброн-фононную и спин-фононную связи системы с резервуаром, определяются соответственно константами $g_{\upsilon-ph}$ и g_{s-ph}. В качестве типичного значения этих коэффициентов используем

$$\tau_0^{\upsilon-ph} \sim 1/\gamma_0^{\upsilon-ph} \sim 1 \text{ пс}, \quad \tau_0^{s-ph} \sim 1/\gamma_0^{s-ph} \sim 1 \text{ пс},$$

соответствующие экспериментам [26] по возбуждениям Co(LS)–O2p–Co(HS), а также [66–68] по возбуждениям спиновых термов через промежуточные 2p-состояния кислорода в металлоорганических комплексах. Для сокращения числа эмпирических параметров мы полагаем эти два параметра одинаковыми. Тем не менее, как будет показано ниже, времена релаксации для магнитной и упругой систем оказываются разными, что определяется различием матричных элементов в формулах (21), (22).

С помощью уравнений (21), (22) вычислялись коэффициенты Γ и их линейные комбинации W_{ln} и γ_{kl}, входящие в уравнения (18). Рисунок 4 дает представление о структуре этих коэффициентов.

Для двух значений давления на рис. 4 можно увидеть формирование системы ненулевых матричных элементов в виде кластеров, содержащих по 16 уровней энергии. Природу формирования этих кластеров можно легко понять, если рассмотреть структуру гамильтониана (1): 15 собственных состояний у высокоспинового терма (с учетом трехкратного орбитального вырождения) плюс одно синглетное состояние низкоспинового терма. При нулевой температуре можно видеть только матричные элементы, находящиеся под диагональю (рис. 4*а,б*), что соответствует возбуждениям с занятых состояний на свободные уровни. При $T = 300$ K матрица более симметричная относительно диагонали (рис. 4*в,г*), что указывает на наличие прямых и обратных переходов.

5. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИНАМИКИ СИСТЕМЫ ПРИ РАЗЛИЧНОМ ДАВЛЕНИИ

Мы предполагаем, что основное при $P < P_C$ HS-состояние может быть внезапно переведено (например, ультракоротким электромагнитным импульсом) в LS-состояние или при $P > P_C$ основное LS-состояние может быть возбуждено в HS-состояние. Таким образом, в качестве начального фотовозбужденного состояния $|\psi_0\rangle$ задавалось состояние, которое получается из основного равновесного:

$$|\varphi_0\rangle = \sum_{n_{ph}=0}^{N_{ph}} \left[a_{n_{ph},0} |2,0,n_{ph}\rangle + + \sum_{s_z=-S}^{+S} b_{n_{ph},s_z,0} |1,s_z,n_{ph}\rangle \right]$$

путем переключения квантовых чисел α и s_z. Так, если основным при малых давлениях является магнитное HS-состояние, то

$$|\psi_0\rangle = \sum_{n_{ph}=0}^{N_{ph}} \left[a_{n_{ph},0} |2,0,n_{ph}\rangle + + \sum_{s_z=-S}^{+S} b_{n_{ph},s_z,0} |2,0,n_{ph}\rangle \right],$$

при этом упругая (фононная) система оставалась неизменной, т. е. сохранялась в исходном, соответствующем электронной HS-конфигурации d-иона,

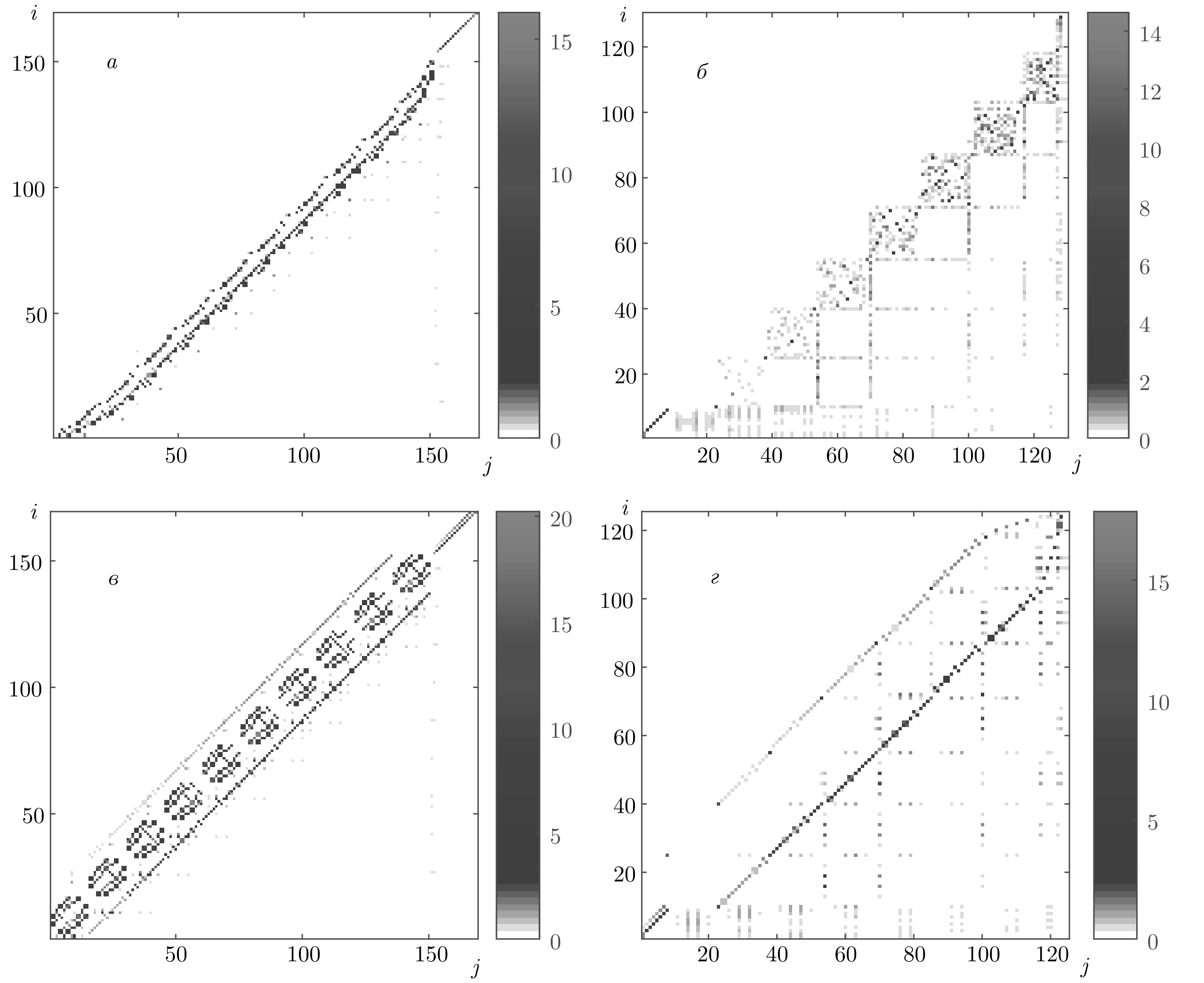


Рис. 4. Структуры релаксационных матричных элементов W_{ij} из уравнения (18) для набора из 169 низкоэнергетических уровней при $P/P_{C0} = 0.1$ (основное HS-состояние) для $T = 0$ (*а*) и 300 K (*в*) и для 130 уровней энергии при $P/P_{C0} = 1.5$ (основное LS-состояние) для $T = 0$ (*б*) и 300 K (*г*). Параметр спин-орбитального взаимодействия $J_x = 50$ мэВ

состоянии. И наоборот, если при высоком давлении основным является немагнитное LS-состояние, то

$$|\psi_0\rangle = \sum_{n_{ph}=0}^{N_{ph}} \Big[a_{n_{ph},0}\,|1,+2,n_{ph}\rangle + \\ + \sum_{s_z=-S}^{+S} b_{n_{ph},s_z,0}\,|1,+2,n_{ph}\rangle\Big],$$

при этом упругая система также оставалась неизменной, т. е. сохранялась в исходном, но уже соответствующем электронной LS-конфигурации d-иона, состоянии. Тем самым такое переключение состояний меняет электронное состояние иона, оставляя при этом неизменным состояние лигандов. Другими словами, такое переключение состояний реализует динамический кроссовер катиона, оставляя при этом неизменным начальное состояние лигандов, и оправдано тем, что в эксперименте [16] фотовозбуждение системы из основного, например, высокоспинового $^1A_{1g}$-состояния происходит сначала в некоторое промежуточное $^1T_{2g}$, $^1T_{1g}$ или состояние с переносом заряда, из которого система достаточно быстро может вернуться обратно в основное или каскадным образом свалиться в возбужденное вибронное HS-состояние и в дальнейшем из-за фононного демпфирования уже гораздо медленнее релаксирует к основному состоянию. В случае же основного низкоспинового $^5T_{2g}$-состояния в качестве промежуточного выступает ^5E_g-терм, из которого система достаточно быстро каскадным образом сваливается в возбужденное вибронное, но уже LS-состояние и в дальнейшем также из-за фононного демпфирования гораздо медленнее релаксирует к основному HS-состоянию [66, 68]. Характерное время каскадных переходов меньше 100 фс, а релаксации через фононную систему около 3 пс [66,68], поэтому в настоящей работе мы не рассматриваем первичные каскадные процессы в системе, и в качестве начального состояния при $t = 0$ в случае малых давлений берется немагнитное вибронное LS-состояние.

Фотовозбужденное состояние может быть разложено по базису собственных состояний гамильтониана изолированной подсистемы

$$|\psi_0\rangle = \sum_k C_{0k} |\varphi_k\rangle, \quad C_{0k} = \langle \varphi_k \mid \psi_0\rangle .$$

Начальная матрица плотности имеет вид

$$\rho^0_{kk'}(0) = C_{0k} C^*_{0k'}.$$

При конечных температурах подсистема находится в состояниях $|\varphi_k\rangle$ с вероятностью

$$p_k = \exp\left(-\frac{E_k}{k_B T}\right) Z^{-1},$$

поэтому начальный оператор плотности имеет вид

$$\hat\rho^0(0) = \sum_k p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \sum_k \sum_{ii'} p_k C_{ik} C^*_{i'k} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_{i'}|,$$

$$|\psi_k\rangle = \sum_i C_{ki} |\varphi_i\rangle, \quad C_{ki} = \langle\varphi_i \mid \psi_k\rangle .$$

Ниже показаны временные зависимости намагниченности подрешетки m, заселенности HS-состояния n и длины катион-анионной связи q при внезапном возмущении. На рис. 5 параметр спин-орбитальной связи был мал, $J_x = 0.01$ эВ, а на рис. 7 $J_x = 0.05$ эВ. В расчетах мы фиксировали температуру $T = 100$ К и варьировали давление от $0.1P_{C0}$ до $1.5P_{C0}$.

Для определения характерного времени затухания (релаксации) фотовозбужденных состояний использовалась экспоненциальная аппроксимация $y_i = y_{0i} + \eta_i e^{-\xi_i t}$ зависимости от времени намагниченности ($i = m$), заселенности HS-состояния ($i = n$) и смещения ($i = q$), где η_i и ξ_i — подгоночные параметры, а равновесное значение y_{0i} бралось из стационарного самосогласованного решения уравнений в приближении среднего поля (11)–(13). На рис. 6 и 7 представлены результаты такой аппроксимации для случая низкого $P/P_{C0} = 0.1$ (верхний ряд) и высокого $P/P_{C0} = 1.5$ (нижний ряд) давления соответственно при $J_x = 0.01$ и $J_x = 0.05$ эВ.

Как видно из сравнения рис. 5 и рис. 6, выведенные из состояния равновесия намагниченность m, заселенность HS-состояния n и смещение q возвращаются к своим равновесным значениям за разные времена, причем для намагниченности свое время релаксации τ_m, а для n и q времена практически совпадают. Это совпадение неудивительно, поскольку изменение длины связи q пропорционально ионному радиусу катиона. Времена релаксации и их анализ приведены ниже в табл. 1.

Сильное изменение магнитной динамики, заметное на рис. 8*б, в* по сравнению с рис. 5*б,в*, связано с сильным подавлением критического давления (рис. 3*б*). Для $J_x = 0.05$ эВ и $P/P_{C0} = 0.5$ $m(T = 0) = 0$, но для этого давления появляется возвратная намагниченность в интервале температур $4 < T/J_0 < 10$. Эта возвратная намагниченность также проявляется и в динамике с максимальным значением при $t = 0.25$ (рис. 8*б*). Тем не менее, в соответствии с фазовой диаграммой равновесное состояние немагнитно. На рис. 8*в* мы видим большую амплитуду начальных колебаний заселенности HS-состояния n. На фазовой диаграмме (рис. 3*а*) видно, что при $P/P_{C0} = 1$ и $T = 0$ величина $n \sim 0.8$ и плавно изменяется от $n = 1$ при $P/P_{C0} = 0.8$ до $n = 0$ при $P/P_{C0} = 1.2$. Такая широкая область изменения n проявляется также и во временной зависимости.

Сравнение рис. 8*а* с рис. 8*г* показывает, что для HS-состояния n и q релаксируют быстрее, чем намагниченность m, имеющая долгоживущие колебания. Для LS-состояния, наоборот, m и q затухают быстрее, а n более медленно. Так, при $t = 5$ величина n остается достаточно большой ($n = 0.2$) вместо ожидаемого $n = 0$. Вообще говоря, при определенных динамических режимах нагрузки стационарное состояние может быть смесью HS- и LS-состояний [69], поэтому мы специально рассмотрели поведение системы при $P/P_{C0} > 1$ на больших временах до 80 пс и увидели, что при большом давлении возбужденное HS-состояние при $T = 300$ К медленно, но все-таки релаксирует к стационарному LS-состоянию (рис. 9).

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Значения времен релаксации и частот колебаний из рис. 5, 8 приведены в табл. 1, 2. Из табл. 1 следует,

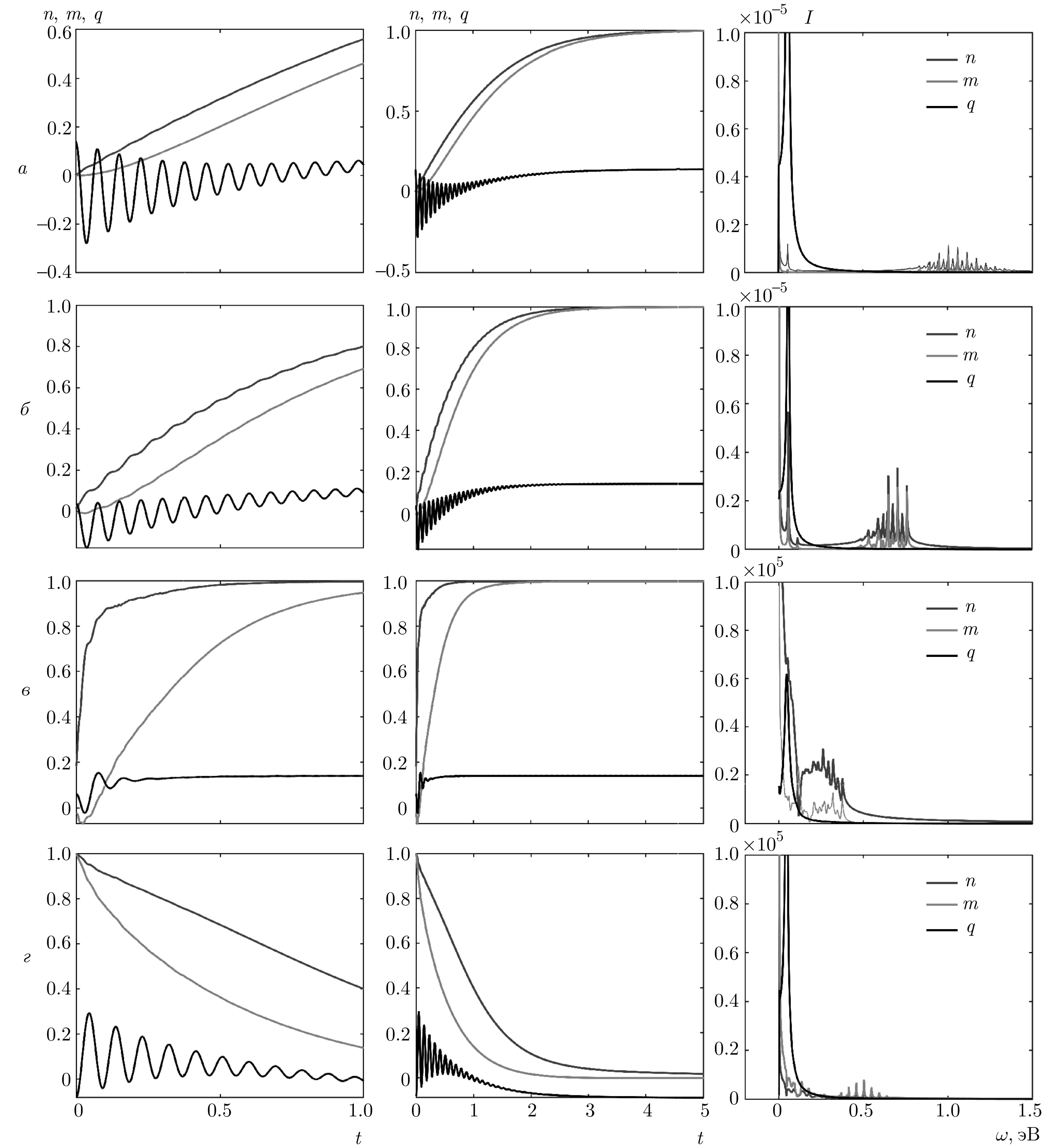


Рис. 5. Квантовая динамика релаксации фотовозбужденных франк-кондоновских состояний в магнитоупорядоченных веществах со спиновым кроссовером при $T = 100$ К при давлениях $P/P_{C0} = 0.1$ (*а*), 0.5 (*б*), 1 (*в*) и 1.5 (*г*) при $J_x = 0.01$ эВ. В правом столбце приведены результаты анализа фурье-зависимостей намагниченности m, заселенности HS-состояния n и смещения q от времени для определения интенсивности и частоты спектральных составляющих полученных решений

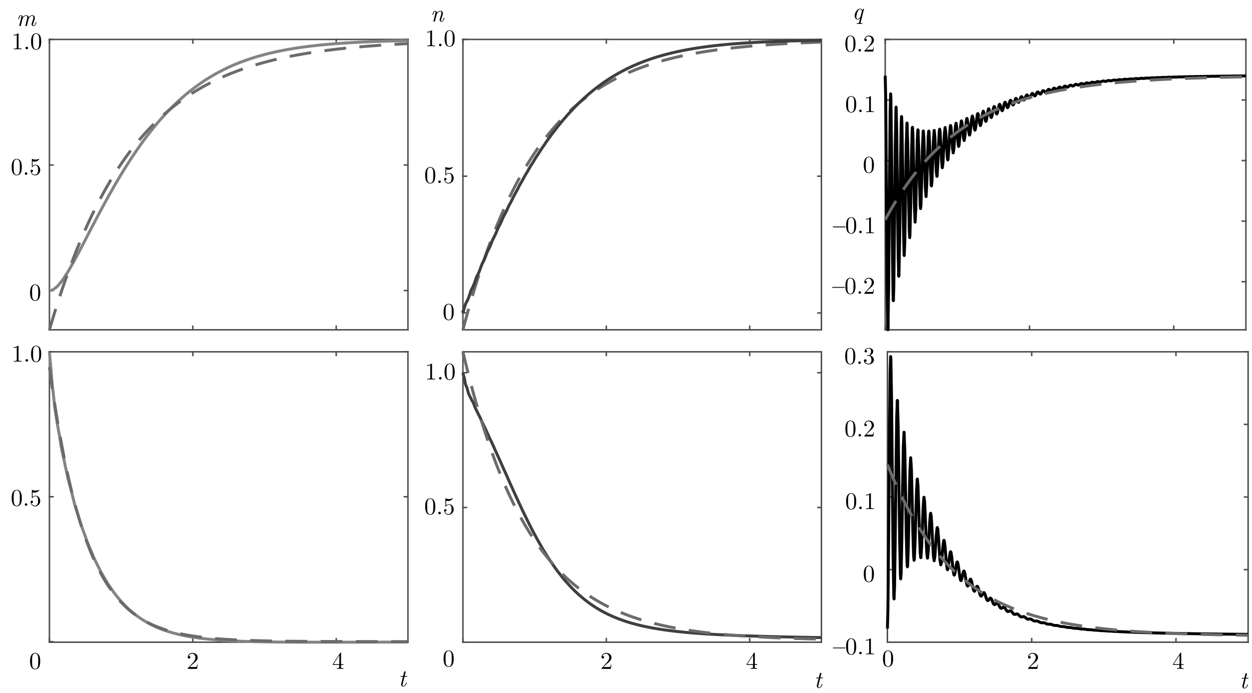


Рис. 6. Экспоненциальная аппроксимация функцией $y = y_0 + \eta e^{-\xi t}$ зависимостей намагниченности m, заселенности HS-состояния n и смещения q от времени для случая низкого $P/P_{C0} = 0.1$ (верхний ряд) и высокого $P/P_{C0} = 1.5$ (нижний ряд) давления при $J_x = 0.01$ эВ: a — $m = 1.00 - 1.17e^{-0.85t}$, $n = 1.00 - 1.06e^{-0.94t}$, $q = 0.14 - 0.24e^{-0.94t}$; $б$ — $m = 0 + 0.95e^{-1.94t}$, $n = 0 + 1.07e^{-1.06t}$, $q = -0.09 + 0.24e^{-1.05t}$

Таблица 1. Времена релаксации намагниченности (τ_m), заселенности HS-состояния (τ_n) и искажения решетки (τ_q) при различном давлении и спин-орбитальном взаимодействии J_x

J_x, мэВ	P/P_{C0}	τ_m, пс	τ_n, пс	τ_q, пс
10	0.1	1.18	1.06	1.06
	1.5	0.52	0.94	0.95
50	0.1	0.40	0.18	0.18
	1.5	0.33	0.93	0.95

что все времена релаксации уменьшаются с увеличением спин-орбитального взаимодействия J_x, и это довольно очевидно. Мы получили противоположное соотношение для времен магнитной/немагнитной релаксации при малых и высоких давлениях. Действительно, когда $P/P_{C0} = 0.1$ и HS-состояние является равновесным, время релаксации намагниченности τ_m больше, чем время релаксации заселенности HS-состояния τ_n и решеточной релаксации τ_q для обоих значений спин-орбитальной связи. Напротив, когда основным состоянием является немагнитное LS-состояние при $P/P_{C0} = 1.5$, релаксация намагниченности происходит быстрее, чем релаксация заселенности HS-состояния и решеточная релаксация. Из табл. 2 следует, что частоты колебаний практически не зависят от давления и спин-орбитального взаимодействия. Что касается колебаний намагниченности и заселенности HS-состояния, которые демонстрируют мультимодальное поведение, можно заметить, что они имеют высокочастотные составляющие для некоторых значений давления помимо основной частоты колебаний.

Из спектрального анализа, приведенного на рис. 5 и 8, следует, что можно выделить несколько временных масштабов сложной динамики системы. Заметна существенная разница временной динамики системы в случае слабого и сильного спин-орбитальных взаимодействий. Так, например, при $J_x = 0.05$ эВ в зависимостях $m(t)$ и $n(t)$ можно выделить ряд возмущений с перерывами между ними (волновой пакет или цуг высокочастотных волн с энергией колебаний около 1 эВ). Узкие пики в фурье-спектре этого цуга высокочастотных волн (рис. 8) разделены интервалом частот $\Delta\omega = 58$ мэВ, что практически совпадает с энергией колебаний

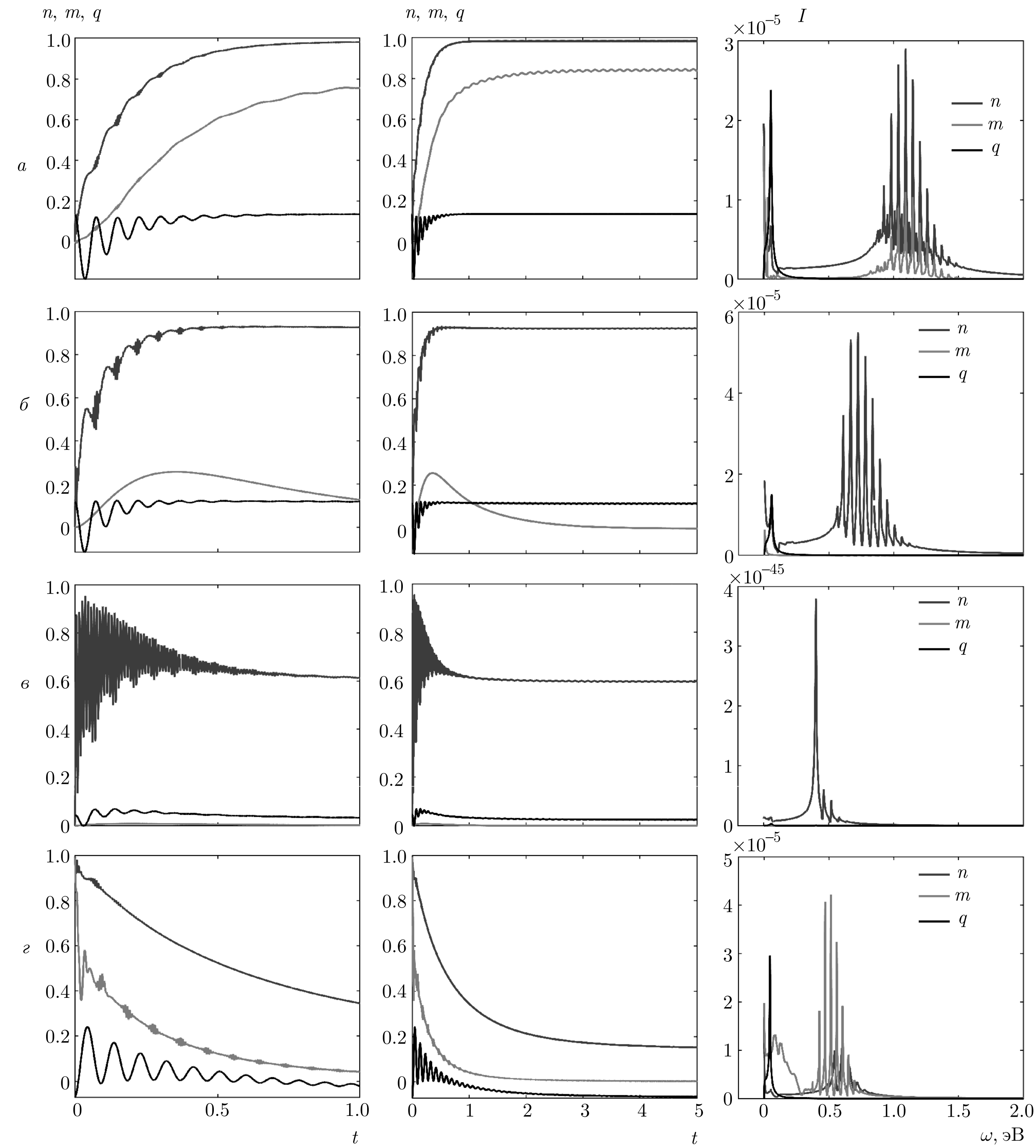


Рис. 7. Квантовая динамика релаксации фотовозбужденных франк-кондоновских состояний в магнитоупорядоченных веществах со спиновым кроссовером при $T = 100$ К при давлениях $P/P_{C0} = 0.1$ (*a*), 0.5 (*б*), 1 (*в*) и 1.5 (*г*) при $J_x = 0.05$ эВ. В правом столбце приведены результаты анализа Фурье зависимости намагниченности m, заселенности HS-состояния n и смещения q от времени для определения интенсивности и частоты спектральных составляющих полученных решений

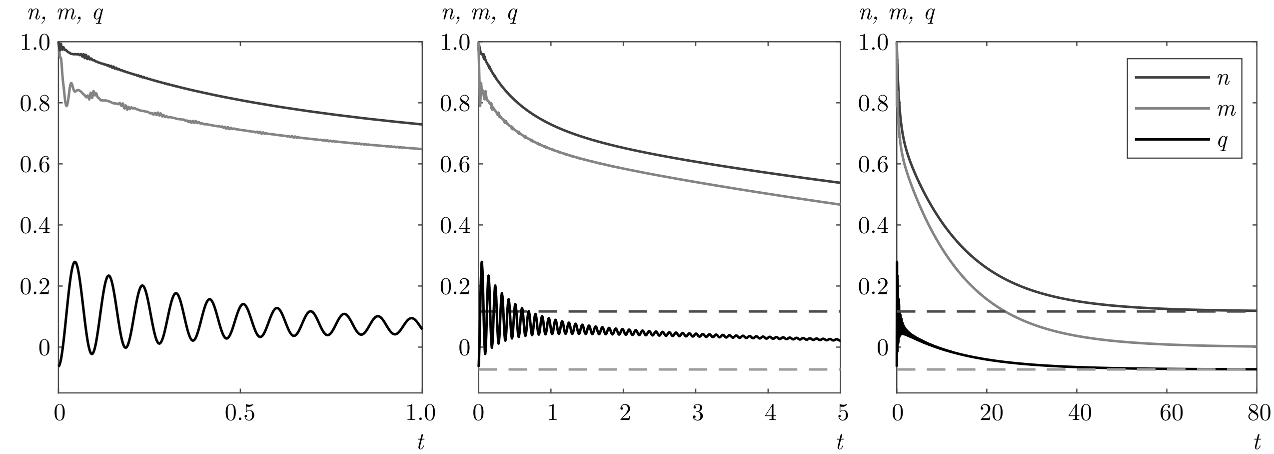


Рис. 8. Медленная релаксация возбужденного HS-состояния при $P/P_{C0} = 1.5$, $J_x = 0.05$ эВ и $T = 300$ К к стационарному LS-состоянию, показанному для переменных n и q штриховыми линиями. Для намагниченности асимптотическое равновесное значение $m = 0$

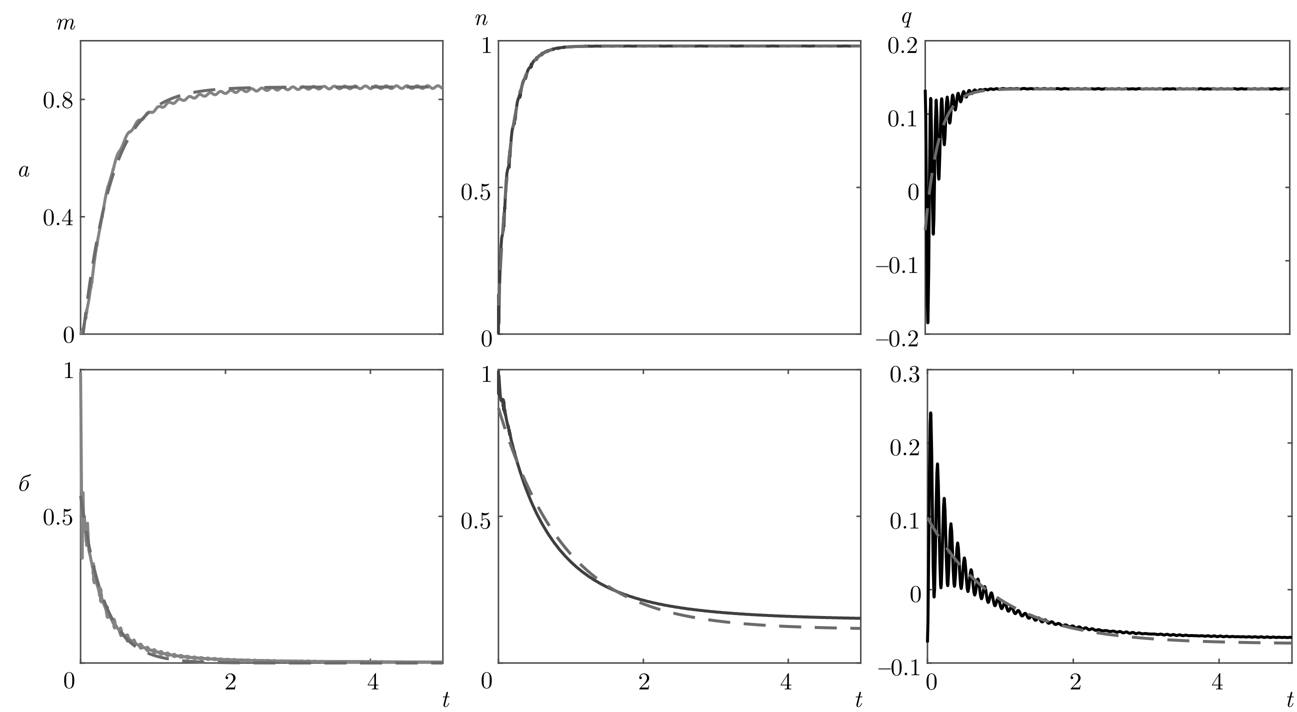


Рис. 9. Экспоненциальная аппроксимация функцией $y = y_0 + \eta e^{-\xi t}$ зависимостей намагниченности m, заселенности HS-состояния n и смещения q от времени для случая низкого $P/P_{C0} = 0.1$ (верхний ряд) и высокого $P/P_{C0} = 1.5$ (нижний ряд) давления при $J_x = 0.05$ эВ: *а* — $m = 0.84 - 0.92e^{-2.51t}$, $n = 0.98 - 0.88e^{-5.76t}$, $q = 0.13 - 0.19e^{-5.45t}$; *б* — $m = 0 + 0.95e^{-1.94t}$, $n = 0 + 1.07e^{-1.06t}$, $q = -0.09 + 0.24e^{-1.05t}$

решетки $\omega_{LS} = 55$ мэВ и позволяет отождествить цуг высокочастотных колебаний, коррелирующих с минимумами и максимумами осцилляций $q(t)$, с резонансами Франка–Кондона. Эти возмущения затухают за время порядка τ_q, после чего при малых давлениях $P/P_{C0} = 0.1$ наблюдаются долгоживущие периодические колебания намагниченности с периодом 140 фс и энергией 35 мэВ. Такие же частоты видны и для $J_x = 0.01$ эВ по результатам фурье-анализа (рис. 5), но амплитуды колебаний в

Таблица 2. Частоты колебаний намагниченности, заселенности HS-состояния и длины связи для различных давлений и спин-орбитального взаимодействия J_x. Слабый/сильный означает малую/большую амплитуду. FCR 675 представляет собой набор узких эквидистантных резонансов Франка – Кондона с центром около 675 мэВ

J_x, мэВ	P/P_{C0}	ω_m, мэВ	ω_n, мэВ	ω_q, мэВ
10	0.1	FCR 1100 с $\Delta\omega = 55$	55 слабый, FCR 1100 с $\Delta\omega = 27.5$	55 сильный
	0.5	55 слабый, FCR 675 с $\Delta\omega = 55$	55 сильный, FCR 675 с $\Delta\omega = 27.5$	55 сильный
	1.0	250 ± 100	250 ± 100	47
	1.5	FCR 500 с $\Delta\omega = 45$		45
50	0.1	29, FCR 1100 с $\Delta\omega = 55$	55 слабый, FCR 1100 с $\Delta\omega = 27.5$	55 сильный
	0.5		55, FCR 723 с $\Delta\omega = 57$	55
	1.0		56, FCR 400 с $\Delta\omega = 60$	56 слабый
	1.5	широкий FCR 84 с $\Delta\omega = 48$ FCR 515 с $\Delta\omega = 45$	45 слабый, FCR 600 с $\Delta\omega = 45$	45

этом случае много меньше, чем на рис. 8. Подобные низкочастотные колебания намагниченности при фемтосекундной накачке скошенного антиферромагнетика $FeBO_3$ при нормальном давлении были обнаружены экспериментально в работах [70, 71]. В этих работах исходное HS-состояние ($S = 5/2$) иона Fe^{3+} возбуждалось в промежуточно спиновое состояние Fe^{3+} со спином $S = 3/2$, и спустя примерно 4 пс после возбуждения наблюдались периодические колебания намагниченности с периодом около 2 фс. В наших расчетах периодические колебания намагниченности устанавливались после возвращения электронной и упругой системы к равновесным HS-значениям за время порядка 2 пс и имели период 0.14 пс. Поскольку в этой работе мы не рассматривали модель, соответствующую схеме уровней иона Fe^{3+} и адекватную $FeBO_3$, претендовать на количественные совпадения с экспериментом не имеет смысла. В то же время качественная картина наблюдаемых в работах [70, 71] осцилляций вполне соответствует описанной нами теории.

Заметим, что при низком давлении $P/P_{C0} = 0.1$ и $P/P_{C0} = 0.5$ в случае основного HS-состояния после резкого возбуждения электронной и магнитной систем в LS-состояние без изменения окружающих анионов релаксация длины связи характеризуется частотой 55 мэВ, что соответствует частоте LS-колебаний ω_{LS}. И наоборот, при давлении $P/P_{C0} = 1.5$, когда электронная и магнитная системы основного LS-состояния резко возбуждаются в исходное HS-состояние релаксация характеризуется частотой $\omega_{HS} = 45$ мэВ. Этот факт демонстрирует, что электронные, магнитные и упругие подсистемы в материалах со спиновым кроссовером настолько сильно коррелированы, что колебания в одной из них приводят к аналогичным колебаниям других.

7. ВЫВОДЫ

В магнитных материалах со спиновым кроссовером переключение между HS- и LS-состояниями сильно связано с взаимодействием с решеткой и межатомным обменным взаимодействием, что и обеспечивает эффекты кооперативности. До сих пор большая часть экспериментальных исследований сверхбыстрой динамики спинового кроссовера проводилась с немагнитными материалами. В этой статье мы обнаружили колебания намагниченности и сложную многомасштабную динамику магнитной релаксации, заселенности HS-состояния и длины связей Me–O в сильнокоррелированной электронной системе с дальним магнитным порядком. Мы надеемся, что наша теория может стимулировать новые экспериментальные исследования сверхбыстрой магнитной динамики с переключением различных спиновых состояний многоэлектронных катионов при облучении световыми импульсами.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 18-12-00022).

ЛИТЕРАТУРА

1. А. М. Калашникова, А. В. Кимель, Р. В. Писарев, УФН **185**, 1064 (2015).

2. А. П. Пятаков, А. С. Сергеев, Е. П. Николаева, Т. Б. Косых, А. В. Николаев, К. А. Звездин, А. К. Звездин, УФН **185**, 1077 (2015).

3. А. А. Мухин, А. М. Кузьменко, В. Ю. Иванов, А. Г. Пименов, А. М. Шуваев, В. Е. Дем, УФН **185**, 1089 (2015).

4. С. А. Никитов, Д. В. Калябин, И. В. Лисенков, А. Н. Славин, Ю. Н. Барабаненков, С. А. Осокин, А. В. Садовников, Е. Н. Бегинин, М. А. Морозова, Ю. П. Шараевкий, Ю. А. Филимонов, Ю. В. Хивинец, С. Л. Высоцкий, В. К. Сахаров, Е. С. Павлов, УФН **185**, 1099 (2015).

5. D. Bossini, V. I. Belotelov, A. K. Zvezdin, A. N. Kalish, and A. V. Kimel, ACS Photonics **3**, 1385 (2016).

6. A. V. Kimel, A. Kirilyuk, P. A. Usachev, R. V. Pisarev, A. M. Balbashov, and Th. Rasing, Nature **435**, 655 (2005).

7. T. Satoh, Y. Terui, R. Moriya, B. A. Ivanov, K. Ando, E. Saitoh, T. Shimura, and K. Kuroda, Nature Photon. **6**, 662 (2012).

8. H. S. Rhie, H. Darr, and W. Eberhardt, Phys. Rev. Lett. **90**, 247201 (2003).

9. S. Wall, D. Prabhakaran, A. T. Boothroyd, and A. Cavalleri, Phys. Rev. Lett. **103**, 097402 (2009).

10. D. Afanasiev, A. Gatilova, D. J. Groenendijk, B. A. Ivanov, M. Gibert, S. Gariglio, J. Mentink, J. Li, N. Dasari, M. Eckstein, Th. Rasing, A. D. Caviglia, and A. V. Kimel, Phys. Rev. X **9**, 021020 (2019).

11. А. М. Калашникова, В. В. Павлов, Р. В. Писарев, Л. Н. Безматерных, М. Бауер, Т. Расинг, Письма в ЖЭТФ **80**, 339 (2004).

12. R. V. Mikhaylovskiy, T. J. Huisman, V. A. Gavrichkov, S. I. Polukeev, S. G. Ovchinnikov, D. Afanasiev, R. V. Pisarev, Th. Rasing, and A. V. Kimel, Phys. Rev. Lett **125**, 157201 (2020).

13. P. Gutlich and H. A. Goodwin, *Spin Crossover in Transition Metal Compounds I-III*, Springer, Berlin, Heidelberg, Germany (2004).

14. M. A. Halcrow, *Spin-Crossover Materials*: *Properties and Applications*, John Wiley and Sons, Ltd., Oxford, UK (2013).

15. S. Maekava, T. Tohyama, S. E. Barnes, S. Ishihara, W. Koshibae, and G. Khaliullin, *Physics of Transition Metal Oxides*, Springer, Berlin (2004).

16. M. Cammarata, R. Bertoni, M. Lorenc, H. Cailleau, S. D. Matteo, C. Mauriac, S. F. Matar, H. Lemke, M. Chollet, S. Ravy, C. Laulhe, J-F Letard, and E. Collet, Phys. Rev. Lett. **113**, 227402 (2014).

17. J. Badro, G. Fiquet, V. V. Struzhkin, M. Somayazulu, H-K. Mao, G. Shen, and T. L. Bihan, Phys. Rev. Lett. **89**, 205504 (2002).

18. J-F. Lin, A. G. Gavriliuk, V. V. Struzhkin, S. D. Jacobsen, W. Sturhahn, M. Y. Hu, P. Chow, and C-S. Yoo, Phys. Rev. B **73**, 113107 (2006).

19. I. Y. Kantor, L. S. Dubrovinsky, and C. A. McCommon, Phys. Rev. B **73**, 100101 (2006).

20. J. F. Lin, S. D. Jacobsen, and R. M. Wentzcovitch, Eos **88**, 13 (2007).

21. И. С. Любутин, А. Г. Гаврилюк, УФН **179**, 1047 (2009).

22. L. Dubrovinsky, T. Boffa-Ballaran, K. Glazyrin, A. Kurnosov, D. Frost, M. Merlini, M. Hanfland, V. B. Prakapenka, P. Schouwink, T. Pippinger, and N. Dubrovinskaia, High Pressure Res. **30**, 620 (2010).

23. N. F. Mott, *Metal-Insulator Transitions*, Taylor and Francis LTD, London (1974).

24. J. Zaanen, G. Sawatzky, and J. W. Allen, Phys. Rev. Lett. **55**, 418 (1985).

25. Н. Б. Иванова, С. Г. Овчинников, М. М. Коршунов, И. М. Еремин, Н. В. Казак, УФН **179**, 837 (2009).

26. M. Izquierdo, M. Karolak, D. Prabhakaran, A. T. Boothroyd, A. O. Scherz, A. Lichtenstein, and S. L. Molodtsov, Comm. Phys. **2**, 8 (2019).

27. С. Г. Овчинников, Ю. С. Орлов, И. А. Некрасов, З. В. Пчелкина, ЖЭТФ **139**, 162 (2011).

28. Y. Tanabe and S. Sugano, J. Phys. Soc. Jpn. **9**, 753 (1954).

29. А. И. Нестеров, С. Г. Овчинников, Письма в ЖЭТФ **90**, 580 (2009).

30. T. Kambara, J. Phys. Soc. Jpn. **49**, 1806 (1980).

31. N. Sasaki and T. Kambara, J. Chem. Phys. **74**, 3472 (1981).

32. N. Sasaki and T. Kambara, Phys. Rev. B **40**, 2442 (1989).

33. K. Koshino and T. Ogawa, J. Phys. Soc. Jpn. **68**, 2164 (1999).

34. S. W. Biernacki and B. Clerjaud, Phys. Rev. B **72**, 024406 (2005).

35. J. Chang, A. J. Fedro, and M. van Veenendaal, Phys. Rev. B **82**, 075124 (2010).

36. M. van Veenendaal, J. Chang, and A. J. Fedro, Phys. Rev. Lett. **104**, 067401 (2010).

37. S. Klokishner and J. Linares, J. Phys. Chem. C **111**, 10644 (2007).

38. N. Klinduhov, D. Chernyshov, and K. Boukheddaden, Phys. Rev. B **81**, 094408 (2010).

39. K. Boukheddaden, M. Nishino, and S. Miyashita, Phys. Rev. Lett. **100**, 177206 (2008).

40. G. D'Avino, A. Painelli, and K. Boukheddaden, Phys. Rev. B **84**, 104119 (2011).

41. G. Mazzola, A. Zen, and S. Sorella, J. Chem. Phys. **137**, 134112 (2012).

42. N. M. Tubman, L. Kylanpaa, S. Hammes-Schiffer, and D. M. Ceperley, Phys. Rev. A **90**, 042507 (2014).

43. B. G. Levine and T. J. Martinez, Ann. Rev. Phys. Chem. **58**, 613 (2007).

44. V. I. Kuz'min, Yu. S. Orlov, A. E. Zarubin, T. M. Ovchinnikova, and S. G. Ovchinnikov, Phys. Rev. B **100**, 144429 (2019).

45. Р. О. Зайцев, ЖЭТФ **68**, 207 (1975).

46. В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, ТМФ **50**, 466 (1982).

47. A. I. Nesterov, Yu. S. Orlov, S. G. Ovchinnikov, and S. V. Nikolaev, Phys. Rev. B **96**, 134103 (2017).

48. В. А. Гавричков, С. Г. Овчинников, А. А. Борисов, Е. Г. Горячев, ЖЭТФ **118**, 422 (2000).

49. M. M. Korshunov, V. A. Gavrichkov, S. G. Ovchinnikov, Z. V. Pchelkina, I. A. Nekrasov, M. A. Korotin, and V. I. Anisimov, ЖЭТФ **126**, 642 (2004).

50. N. O. Lipari, C. B. Duke, and L. Pietronero, J. Chem. Phys. **65**, 1165 (1976).

51. A. Painelli and A. Girlando, J. Chem. Phys. **84**, 5655 (1986).

52. J. S. Griffith, *The Theory of Transition-Metal Ions*, Cambridge University Press, Cambridge (1961).

53. G. A. Sawatzky, Nature **342**, 480 (1989).

54. I. S. Lyubutin and S. G. Ovchinnikov, J. Magn. Magn. Mater. **324**, 3538 (2012).

55. С. Г. Овчинников, ЖЭТФ **134**, 172 (2008).

56. И. С. Эдельман, А. В. Малаховский, ФТТ **15**, 3084 (1973).

57. С. Г. Овчинников, В. Н. Заблуда, ЖЭТФ **125**, 198 (2004).

58. А. Г. Гаврилюк, И. А. Троян, С. Г. Овчинников, И. С. Любутин, В. А. Саркисян, ЖЭТФ **126**, 650 (2004).

59. Z. Ropka and R. J. Radwanski, Phys. Rev. B **67**, 172401 (2003).

60. Yu. S. Orlov, L. A. Solovyov, V. A. Dudnikov, A. S. Fedorov, A. A. Kuzubov, N. V. Kazak, V. N. Voronov, S. N. Vereshchagin, N. N. Shishkina, N. S. Perov, K. V. Lamonova, R. Yu. Babkin, Yu. G. Pashkevich, A. G. Anshits, and S. G. Ovchinnikov, Phys. Rev. B **88**, 235105 (2013).

61. K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications, 3rd ed., Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2012).

62. C. P. Slichter, *Principles of Magnetic Resonance (3rd Enlarged and Updated Edition)*, Springer (1996).

63. U. Weiss, *Quantum dissipative systems, 3rd ed., Series in Modern Condensed Matter Physics*, World Scientific Publishing Company (2008).

64. F. P. H-P. Breuer, *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford University Press, USA (2002).

65. A. G. Redfield, Adv. Magn. Res. **1**, 1 (1965).

66. G. Aubock and M. Chergui, Nat. Chem. **7**, 629 (2015).

67. A. Cannizzo, C. J. Milne, C. Consani, W. Gawelda, Ch. Bressler, F. van Mourik, and M. Chergui, Coord. Chem. Rev. **254**, 2677 (2010).

68. H. T. Lemke, K. S. Kjaer, R. Hartsock, T. B. van Driel, M. Chollet, J. M. Glownia, S. Song, D. Zhu, E. Pace, S. F. Matar, M. M. Nielsen, M. Benfatto, K. J. Gaffney, E. Collet, and M. Cammarata, Nat. Comm. **8**, 15342 (2017).

69. A. I. Nesterov, S. G. Ovchinnikov, and G. A. Iaroshenko, Cent. Eur. J. of Phys. **11**, 894 (2013).

70. A. M. Kalashnikova, A. V. Kimel, R. V. Pisarev, V. N. Gridnev, A. Kirilyuk, and Th. Rasing, Phys. Rev. Lett. **99**, 167205 (2007).

71. R. V. Mikhaylovskiy, E. Hendry, A. Secchi, J. H. Mentink, M. Eckstein, A. Wu, R. V. Pisarev, V. V. Kruglyak, M. I. Katsnelson, Th. Rasing, and A. V. Kimel, Nat. Comm. **6**, 8190 (2015).

ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 3, стр. 500–510

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ПОЛОСОВОЙ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЕ МАГНИТООДНООСНОЙ ПЛЕНКИ ФЕРРИТА-ГРАНАТА

Ю. А. Сирюк [a*], *А. В. Безус* [a**], *Р. А. Капшуков* [a], *В. В. Кононеко* [b]

[a] *Донецкий национальный университет*
283001, Донецк, Украина

[b] *Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина*
83114, Донецк, Украина

Поступила в редакцию 27 июля 2020 г.,
после переработки 10 ноября 2020 г.
Принята к публикации 22 ноября 2020 г.

Экспериментально изучены спонтанные и индуцируемые магнитным полем фазовые переходы в жесткой решетке полосовой доменной структуры одноосной феррит-гранатовой пленки. Показано, что температурный и полевой интервалы устойчивости решетки полосовых доменов зависят от структуры доменных границ и магнитостатической энергии. Проведено сравнение особенностей решетки полосовых доменов и решетки цилиндрических магнитных доменов при изменении температуры и магнитного поля.

DOI: 10.31857/S004445102103010X

1. ВВЕДЕНИЕ

Доменные структуры магнетиков в течение многих лет являются объектом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований, вызванных интересами как прикладной науки, так и фундаментальной. Основы теории доменных структур (ДС) ферромагнетиков были заложены работой Ландау и Лифшица [1], в которой авторы показали, что возникновению ДС в кристалле соответствует уменьшение общей энергии образца за счет уменьшения энергии магнитного дипольного взаимодействия, и установили связь размеров доменов с геометрическими и магнитными параметрами образца.

Особое место среди магнетиков занимают эпитаксиальные пленки ферритов-гранатов, большое разнообразие ДС которых обусловлено как физическими свойствами материала пленки, так и воздействием магнитных полей и температуры. Пленки ферритов-гранатов привлекают внимание исследователей, во-первых, из-за оптической прозрачности и, во-вторых, из-за высокой чувствительности ДС к воздействию внешних факторов: магнитных полей, температуры, механических напряжений, лазерного излучения и т. д.

Первые систематические исследования ДС в тонких пленках, помещенных во внешнее магнитное поле, были выполнены Коем и Энцом [2]. В этой работе показано, что под действием внешнего магнитного поля полосовая ДС становится неустойчивой и домены, в которых намагниченность направлена против поля, распадаются на «капли» круговой формы.

Эпитаксиальные пленки ферритов-гранатов обладают малым количеством дефектов, поэтому являются уникальным объектом для изучения динамических свойств ДС [3–5]. После того как Бобек предложил использовать цилиндрические магнитные домены (ЦМД) в устройствах вычислительной техники для записи и хранения информации [6], начался этап бурных исследований ДС разных материалов — носителей ЦМД. Впоследствии выяснилось, что чисто одноосная анизотропия, обеспечивая статическую устойчивость ЦМД, оказалась неспособной поддерживать динамическую устойчивость доменных границ при больших скоростях движения доменов, что ограничивало скорость записи информации. ЦМД-устройства утратили свою актуальность.

[*] E-mail: juliasiryuk@gmail.com
[**] E-mail: a.bezus@donnu.ru

Тем не менее интерес к исследованию пленок ферритов-гранатов остался устойчивым до настоящего времени. Это объясняется тем, что степень проявления различных эффектов в таких пленках гораздо выше, чем у объемных монокристаллов того же свойства. В результате появились работы по изучению спонтанных и индуцируемых магнитным полем фазовых переходов в пленках ферритов-гранатов [7–11]. В работах [7, 8] определено положение границ устойчивости для основных типов доменов: для простой полосовой ДС, для полосовой ДС с периодическими изгибными поверхностными искажениями профиля доменных границ и для гексагональных решеток ЦМД. В работе [9] изучены фазовые переходы между монопериодическими и синфазными бипериодическими ДС. В работах [10, 11] исследовано поведение динамической магнитной восприимчивости квазиодноосных пленок феррита-граната при спонтанных фазовых переходах в окрестности точки Кюри. Экспериментально исследовано влияние моноперидических и бипериодических полей подмагничивания на процессы зарождения ДС. В работах [12, 13] теоретически и экспериментально изучены спин-переориентационные фазовые переходы, построена теория динамической спиновой переориентации в антиферромагнетике под действием фемтосекундного лазерного импульса. Показано, что даже слабый разогрев спиновой подсистемы может существенно усилить эффект переориентации. В пленках с разной величиной одноосной анизотропии изучены особенности доменных границ при спиновой переориентации первого и второго рода [14, 15].

В работе [16] изучены свойства эпитаксиальных пленок феррита-граната с ориентацией (210). Показано, что в таких пленках проявляется магнитоэлектрический эффект. В случае одноосных феррит-гранатовых пленок действие внешних магнитных полей в первую очередь сказывается на структуре доменных границ.

В научной литературе появилось большое число работ, в которых изучаются нелинейные процессы, наблюдающиеся в пленках ферритов-гранатов, проводится анализ возникновения блоховских доменных стенок. В работе [17] рассмотрены экспериментальные исследования индуцированного доменными стенками магнитоэлектричества.

Из перечня приведенных работ видно, что исследователей интересуют фазовые переходы в ДС и поведение доменных границ при изменении температуры и внешних магнитных полей.

В последнее время свойства полосовых ДС и решеток ЦМД используют при создании устройств транспортировки магнитомаркированных микробиологических частиц [18, 19].

В большинстве исследований ДС была получена из размагниченного состояния. Чаще всего такая ДС не является равновесной. Она находится в метастабильном состоянии. Нами разработан способ получения ДС путем действия монополярным импульсным магнитным полем H_{imp}, перпендикулярным плоскости пленки. Поскольку ДС является термодинамической системой, импульсным полем создается такое количество доменов, при котором энергия структуры является минимальной. Такая ДС является равновесной при сохранении условий формирования [20, 21].

Мы изучаем ДС в пленках, выращенных методом жидкофазной эпитаксии на гадолиний-галлиевом гранате. В этих пленках ось легкого намагничивания перпендикулярна плоскости пленки и коллинеарна кристаллографическому направлению $\langle 111 \rangle$ (что проверялось на рентгеновской установке), т. е. это пленки с перпендикулярной анизотропией.

В эпитаксиальных пленках с осью легкого намагничивания, перпендикулярной развитой поверхности пленки, доменная граница Блоха наблюдается в широком температурном интервале вплоть до температуры Нееля. И только при приближении к точке компенсации, где растут константа кубической анизотропии и характеристическая длина пленки, доменная граница Блоха переходит в доменную границу Нееля. Если в пленке формировать ДС импульсным магнитным полем, перпендикулярным плоскости пленки, то создается доменная граница, имеющая сложную структуру. В границе создается большое число поворотов спинов двух направлений (полярностей): как левовинтовых, так и правовинтовых. Линия, разделяющая два участка стенки Блоха с различными полярностями, проходит вертикально через пленку, и такую структуру назвали вертикальной линией Блоха. Лучше всего изучена структура доменных границ в ЦМД-материалах [22]. Число линий Блоха в ЦМД должно быть четным, т. е. в стенке ЦМД могут находиться только пары линий Блоха. Длина окружности ЦМД представляет собой граничное условие, которое заставляет линии Блоха сближаться до интервала $s = \pi d/2N$, где d — диаметр ЦМД, N — число оборотов спинов, s — расстояние между вертикальными линиями Блоха. Для ЦМД диаметром 4–13 мкм получено максимальное значение $N = 90$, что соответствует 180 вертикальным линиям Блоха [22].

Решетки ЦМД, сформированные под действием монополярного импульсного магнитного поля, имеют сложную доменную границу. Они более устойчивы при изменении температуры или магнитного поля смещения по сравнению с решетками, полученными иным путем, например, из размагниченного состояния. Такие решетки мы назвали жесткими.

В наших работах [23–25] изучены спонтанные фазовые переходы в ДС феррит-гранатовой пленки в широком температурном интервале от точки магнитной компенсации до температуры Нееля. Показано, что при изменении температуры или магнитного поля фазовые переходы в доменной границе вызывают фазовые переходы в решетке ЦМД, а температурные интервалы устойчивости решетки ЦМД зависят от структуры доменных границ.

В настоящее время перед нами стоит задача исследовать возможность транспортировки магнитомаркированных биологических частиц как жесткими решетками полосовой ДС, так и жесткими решетками ЦМД. Экспериментальных исследований по влиянию температуры и магнитного поля на свойства решетки полосовой ДС было проведено мало, поскольку, во-первых, не было практического интереса к таким исследованиям, а во-вторых, из-за экспериментальных трудностей. Полосовая ДС является неустойчивой структурой, подвергается изгибным деформациям. Что касается жесткой решетки полосовой ДС, то ее свойства в широком температурном интервале не исследованы.

Теоретические исследования полосовой ДС проведены в работе [26]. В ней определено влияние внешнего магнитного поля на полосовую ДС и вычислена плотность энергии этой структуры:

$$W = 2\pi M_s^2 \left\{ 1 - \frac{4}{\pi z} \left[2\nu_0 \operatorname{arctg} \frac{1}{\nu_0} + \nu_0^2 \ln \nu_0 - \right.\right.$$
$$\left.\left. - \frac{\nu_0^2 - 1}{2} \ln(\nu_0^2 + 1) - \pi \frac{1}{h} \right] - \frac{H}{2\pi M_s} \left(1 - 2\frac{x_s}{z} \right) \right\}, \quad (1)$$

где $x_s = d_s/h$, d_s — ширина полосового домена, в котором вектор намагниченности ориентирован противоположно направлению поля, $z = P/h$, P — период полосовой ДС, h — толщина пленки, $4\pi M_s$ — намагниченность насыщения,

$$\nu_0 = \frac{z}{\pi} \cos \frac{\pi}{2} \left(1 - 2\frac{x_s}{z} \right).$$

Выражение (1) справедливо при $z \geqslant 1$.

Из выражения для плотности энергии полосовой ДС видно, что при постоянной температуре плотность энергии зависит от периода этой структуры, т. е. чем больше период, тем больше плотность энергии.

В работе [27] экспериментально изучены фазовые переходы из полосовой ДС в волновую ДС при изменении температуры. В работе [28] вычислено магнитостатическое давление решетки полосовых доменов и развита термодинамическая теория, позволяющая описать спонтанные фазовые переходы в полосовой ДС. Но в работах [26–28] не учитывалась роль доменных границ в фазовых переходах ДС. Доменные границы, благодаря своей структуре, очень чувствительны к изменению температуры или магнитного поля.

Цель настоящей работы — изучить влияние температуры и магнитного поля на решетку жестких полосовых доменов, на домены и доменные границы.

Актуальность этой работы в том, что исследования, проведенные в ней, могут быть использованы при создании устройств транспортировки магнитомаркированных микробиологических частиц. Эти устройства можно использовать для сортировки при разных температурах химических частиц по их размерам.

2. СПОНТАННЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В РЕШЕТКЕ ПОЛОСОВЫХ ДОМЕНОВ

В работе исследовалась пленка состава $(TmBi)_3(FeGa)_5O_{12}$, выращенная методом жидкофазной эпитаксии на гадолиний-галлиевой подложке. Ориентация оси легкого намагничивания пленки перпендикулярна развитой поверхности образца и коллинеарна кристаллографическому направлению $\langle 111 \rangle$, т. е. это пленка с перпендикулярной анизотропией. Характеристики пленки: температура Нееля $T_N = 437$ K, температура магнитной компенсации $T_c = 120$ K, толщина пленки $h = 8.4$ мкм. Пленка имеет при комнатной температуре фактор качества $Q > 5$. При такой величине фактора качества в доменной границе под действием импульсного магнитного поля, перпендикулярного плоскости пленки, создаются вертикальные блоховские линии [22]. Благодаря магнитооптическому эффекту Фарадея наблюдается ДС.

Для измерения поля коллапса на пленку действуют полем смещения ($H > 0$). Под действием поля ширина полосового домена с антипараллельной полю намагниченностью уменьшается, и при достижении критической величины поля, равной полю коллапса H_c полосовой ДС, полосовой домен исчезает. Диаметр d ЦМД при воздействии поля $H > 0$ уменьшается, и при $d = 3$ мкм (для пленок толщиной 4–10 мкм) решетка ЦМД коллапсирует. Это происходит при поле коллапса H_c решетки ЦМД. При коллапсе равновесной решетки ЦМД исчезает каждый центральный домен гексагональной упаковки. При дальнейшем увеличении поля коллапсируют и ЦМД. Соотношение между величинами полей коллапса ДС: поле H_c полосовой ДС меньше поля H_c решетки ЦМД, которое, в свою очередь, меньше поля H_c ЦМД.

Температура Нееля T_N определяется визуально: несколько раз определяется температура, при которой исчезает ДС. Кроме того, T_N можно уточнить, экстраполируя кривую $H_c(T)$ на ось температур. Период P полосовой ДС определяется визуально с помощью мерной шкалы. Толщина пленки h измеряется методом оптической интерференции.

Наиболее распространенный метод определения характеристической длины пленки l был получен путем минимизации энергии полосовой ДС в размагниченном состоянии по толщине пленки [29]:

$$\frac{l}{h} = \frac{(P/h)^2}{\pi^3} \times \times \left\{ \sum_n \frac{1}{n^3} \left[1 - \exp\left(-\frac{2\pi nh}{P}\right)\left(1+\frac{2\pi nh}{P}\right)\right]\right\}, \quad (2)$$

где n — нечетные числа. Величина намагниченности насыщения $4\pi M_s$ определяется из соотношения, полученного в работе [30]:

$$\frac{H_c}{4\pi M_s} = 1 + \frac{3l}{4h} - \left(\frac{3l}{h}\right)^{1/2}. \quad (3)$$

Поверхностная плотность энергии доменных границ $\sigma = 4\pi M_s^2 l$.

Погрешности вычислений величин l, $4\pi M_s$ и σ зависят от погрешности измерений P, H_c и h.

При погрешности измерений $\Delta P = \pm 0.7$ мкм, $\Delta H_c = \pm 4$ Э и $\Delta h = \pm 0.4$ мкм погрешности измеряемых величин составляют $\Delta l = \pm 0.1$ мкм, $\Delta 4\pi M_s = = \pm 4 \cdot 10^{-4}$ Тл и $\Delta\sigma = \pm 5 \cdot 10^{-3}$ Дж/м^2.

Пленка имеет сильную одноосную анизотропию, вследствие чего в широком температурном интервале при $T > T_c$ наблюдается осевая фаза, т. е. создаются ЦМД. Особенности жесткой полосовой ДС при изменении магнитного поля или температуры мы исследуем таким же образом, как исследовали в этой же пленке особенности жесткой решетки ЦМД [23]. Решетка полосовой ДС формируется монополярным импульсным магнитным полем,

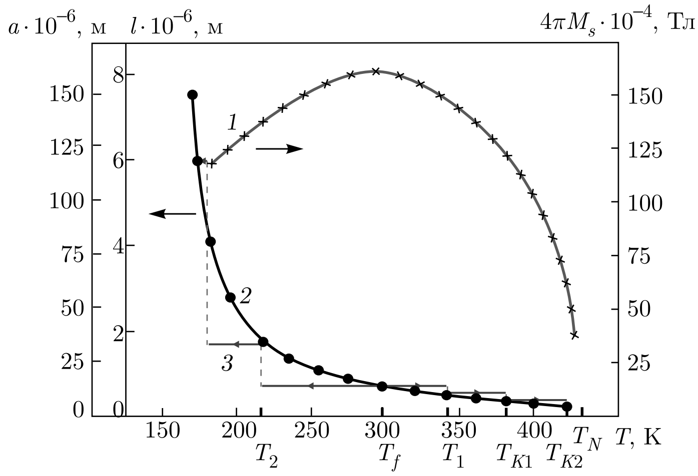


Рис. 1. Температурные зависимости параметров пленки: *1* – намагниченности насыщения $4\pi M_s$; *2* – характеристической длины l; *3* – периода решетки ЦМД; T_f – температура формирования равновесной решетки ЦМД; T_1–T_2 – температурный интервал устойчивости неравновесной решетки ЦМД; T_{K1}, T_{K2} – температуры фазовых переходов, где $T_{K2} = 0.98T_N$

перпендикулярным плоскости пленки, в отсутствие поля смещения. Частота и длительность импульса подбираются экспериментально. Затем поле выключается. Действием импульсного магнитного поля в пленке с перпендикулярной анизотропией создается такое количество доменов, при котором магнитостатическая энергия ДС пленки оказывается минимальной. Такая решетка полосовой ДС является равновесной при температуре формирования [25]. В эксперименте в качестве критерия равновесности применяются два фактора: 1) решетка сохраняется неограниченное время при температуре формирования; 2) ее можно вновь создать с теми же параметрами (шириной домена и периодом решетки). На рис. 1 приведены температурные зависимости магнитных характеристик пленки (намагниченности насыщения $4\pi M_s$ и характеристической длины l), а также периода неравновесной решетки ЦМД. Это дает возможность сравнить особенности решетки полосовой ДС и решетки ЦМД и выявить в них подобия и различия. На рис. 2 приведены температурные зависимости поля коллапса ЦМД и периода полосовой ДС.

2.1. Формирование равновесной решетки полосовой доменной структуры

При формировании равновесной решетки полосовых доменов необходимо выбрать величину напряженности импульсного магнитного поля, по-

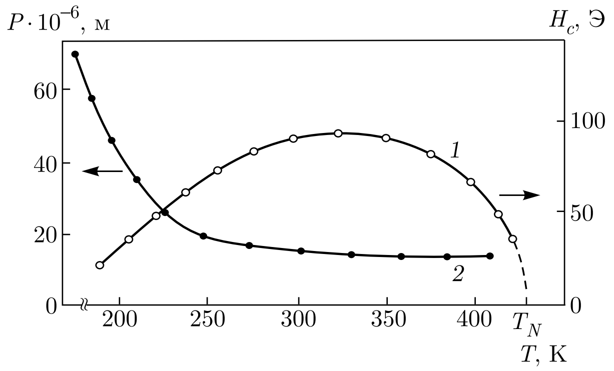


Рис. 2. Температурные зависимости поля коллапса ЦМД (*1*) и периода полосовой ДС (*2*)

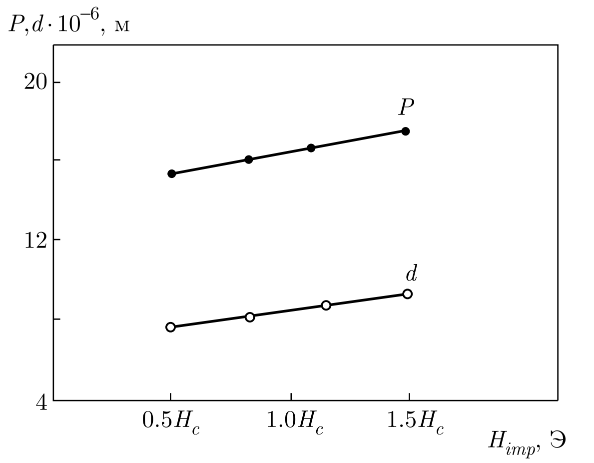


Рис. 3. Зависимости периода решетки P и ширины домена d от напряженности импульсного магнитного поля, формирующего ДС при $T = 300$ К

скольку с увеличением напряженности поля увеличивается и период решетки (рис. 3). Для начала применим поле, равное $0.5H_c$, где H_c — поле коллапса ЦМД при данной температуре (см. рис. 2 и рис. 4*а*). Формируя ДС при разных температурах, получаем температурную зависимость периода равновесной решетки полосовых доменов. Она подобна температурной зависимости характеристической длины пленки (см. рис. 1, кривая *2* и рис. 5, кривая *1*). Решетка полосовой ДС формируется в широком температурном интервале от $T_{K2} = 0.98T_N$ до T_2 (рис. 5, кривая *1*). При $T \geqslant 0.98T_N$ равновесная ДС не формируется [23], при этой температуре в ДС наблюдается простая блоховская стенка [25]. Вблизи T_2 период равновесной полосовой ДС значительно больше толщины пленки (рис. 5, кривая *1*), а следовательно, увеличивается ширина доменной границы. Поэтому блоховская доменная граница переходит в более выгодное энергетическое состояние, т. е. в границу Нееля.

Как было уже сказано, при формировании решетки полосовых доменов с увеличением напряженности импульсного поля увеличивается период решетки полосовых доменов (рис. 3). Таким образом, увеличивая напряженность импульсного поля, мы можем получить температурные зависимости целого ряда равновесных решеток полосовой ДС с разными периодами. Но существует предельная величина напряженности импульсного поля, при которой еще можно создать решетку полосовой ДС: $H = 1.5H_c$ (рис. 3, рис. 4*б*). При этой напряженности мы получаем при 300 К решетку полосовой ДС с периодом $P = 1.75$ мкм (см. рис. 4*б* и рис. 5, точка L). Это неустойчивая полосовая ДС, которая существует только в присутствии импульсного магнитного поля. После выключения поля она переходит в равновесную волновую ДС (рис. 4*в*, рис. 5). В некотором роде этот процесс перехода из полосовой в волновую ДС можно назвать индуцированным фазовым переходом первого рода. Поскольку в этом случае решетку полосовых доменов мы создавали импульсным полем большой напряженности, ДС получила большую энергию, в ее доменной границе создано большое количество вертикальных линий Блоха [22]. ДС является термодинамической системой, поэтому она переходит в энергетически более выгодное состояние с меньшей энергией, т. е. происходит фазовый переход из полосовой ДС в волновую. Поскольку этот переход происходит без изменения температуры, т. е. не изменяется ни намагниченность насыщения, ни характеристическая длина пленки, период ДС и количество вертикальных линий Блоха в доменной границе сохраняются. Вертикальные блоховские линии плотно распределяются в синусоидальной границе волновой ДС подобно размещению вертикальных линий Блоха в круглых границах ЦМД [22].

Повторяя процесс формирования волновой ДС из полосовой ДС при разных температурах, получаем температурную зависимость периода равновесной волновой ДС (рис. 5, кривая *2*). При $T > 300$ К волновая ДС формируется до $T_{K2} = 0.98T_N$. При температурах $T < 300$ К формирование волновой ДС происходит иначе. В интервале температур 270–250 К период ДС, длина волны и амплитуда волновой ДС увеличиваются, т. е. система переходит в более энергетически выгодное состояние, так как энергия волновой ДС уменьшается с увеличением длины волны и амплитуды [28] (рис. 6, 7). В работе [28] приведены теоретические кривые зависимости плот-

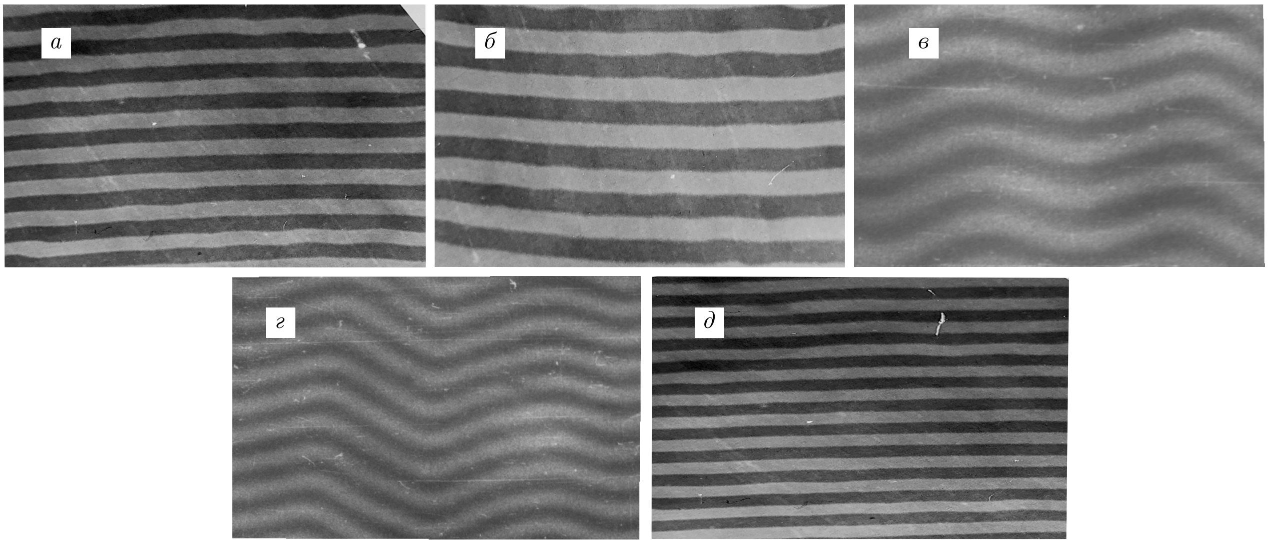


Рис. 4. Виды доменных структур пленки при $T = 300$ К: *а* – решетка полосовой ДС, сформированная импульсным полем $H = 0.5H_c$; *б* – решетка полосовой ДС, сформированная полем $H = 1.5H_c$; *в* – волновая ДС после выключения импульсного поля; *г* – волновая ДС в интервале температур T_{K1}–T_{K2}; *д* – решетка полосовой ДС при $T_{K2} = 0.98T_N$

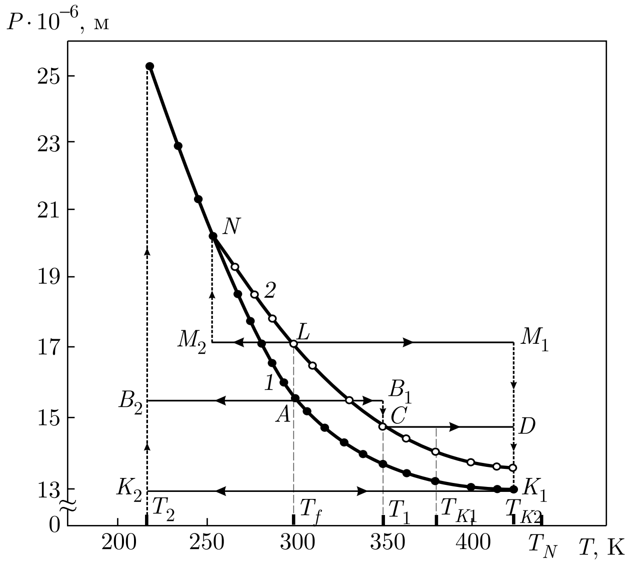


Рис. 5. Температурные зависимости периодов ДС: *1* – равновесная решетка полосовых доменов; *2* – равновесная волновая ДС. T_f – температура формирования решетки полосовой ДС; T_1, T_2, T_{K1}, T_{K2} – температуры фазовых переходов

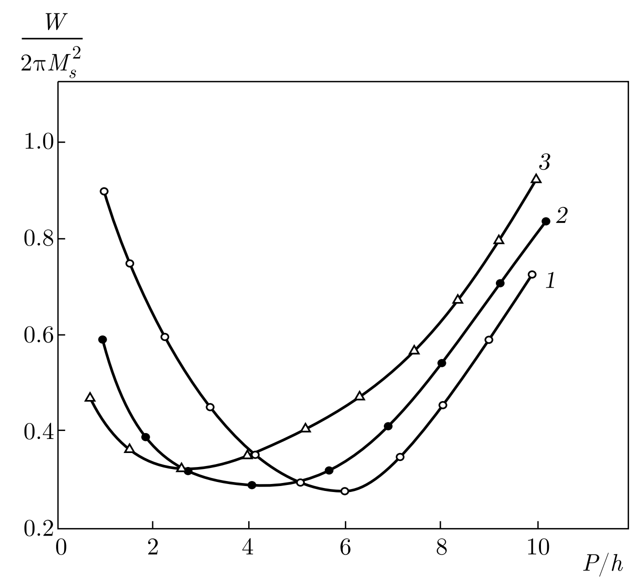


Рис. 6. Зависимость плотности энергии волновой ДС от периода структуры для различных значений λ/h (λ — длина волновой ДС): *1* – $\lambda/h = 4$; *2* – $\lambda/h = 8$; *3* – $\lambda/h = 16$ ($l/h = 0.1$, $A/h = 2.0$) при 300 К [28]

ности энергии волновой ДС от периода структуры, длины волны и амплитуды при 300 К. В нашем случае $P/h = 2$–3 при 300 К (рис. 6, 7).

Поскольку с понижением температуры период ДС и ширина доменной границы увеличиваются, число вертикальных линий Блоха в доменной границе уменьшается путем раскручивания, и при $T = 250$ К формируется полосовая ДС с доменной границей Нееля.

Таким образом, изменяя величину напряженности импульсного магнитного поля при отсутствии внешнего магнитного поля смещения, можно создать целый ряд равновесных жестких решеток по-

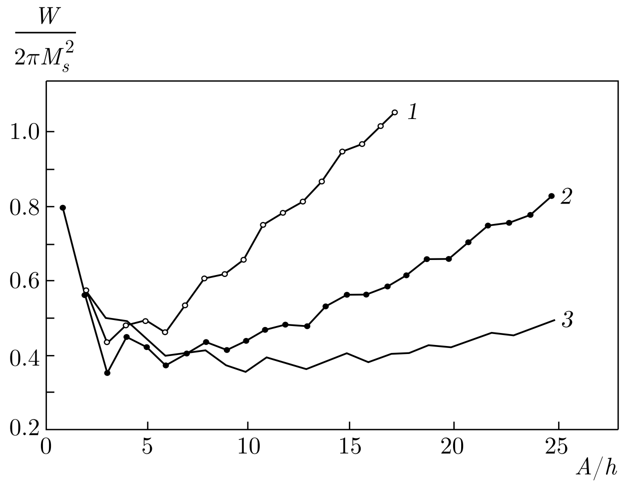


Рис. 7. Плотности энергии размагниченной волновой ДС как функция амплитуды A изгиба доменной границы для различных λ/h: *1* – $\lambda/h = 4$; *2* – $\lambda/h = 8$; *3* – $\lambda/h = 16$ ($l/h = 0.1$, $P/h = 7.0$) при 300 К [28]

лосовой ДС с разными периодами. Это отличает решетку равновесной полосовой ДС от равновесной решетки ЦМД. Гексагональную решетку ЦМД можно создать таким образом только одну и с вполне определенными параметрами [23]. Такое различие объясняется разной геометрией двух сравниваемых ДС.

2.2. Температурные устойчивости решеток полосовых и волновых доменных структур

Рассмотрим решетку полосовой ДС, сформированную импульсным магнитным полем напряженностью $H = 0.5H_c$ при $T_f = 300$ К (см. рис. 4*а* и рис. 5, точка A). Это равновесная решетка при температуре формирования. Если изменять температуру пленки, то решетка полосовой ДС$_1$ (см. ниже разд. 2.3) сохраняется в широком температурном интервале T_1–T_2, хотя является уже неравновесной (рис. 5 отрезок B_1B_2). При T_1 происходит фазовый переход первого рода из полосовой ДС$_1$ в волновую ДС$_1$ с уменьшением периода (см. рис. 4*г*, рис. 5, отрезок B_1C). При этом происходит фазовый переход первого рода и в доменной границе. С уменьшением ширины домена ($d = P/2$) уменьшается и ширина доменной границы, поэтому число вертикальных блоховских линий уменьшается путем аннигиляции. Общая энергия ДС уменьшается. Неравновесная решетка полосовых доменов перешла в равновесную решетку волновой ДС$_1$. При дальнейшем нагревании пленки период волновой ДС$_1$ сохраняется до T_{K2}, но вид ДС, начиная с T_{K1}, изменяется: увеличиваются длина волны и амплитуда. При этом уменьшается энергия волновой ДС (см. рис. 6, 7), а количество вертикальных линий Блоха уменьшается путем аннигиляции. В доменной границе и в волновой ДС происходят фазовые переходы второго рода в интервале температур T_{K1}–T_{K2}. На приведенном выше рис. 1 (кривая *3*) видно, что температурный интервал T_{K1}–T_{K2} совпадает с областью температур, в которой происходит фазовый переход первого рода в решетке ЦМД. Но в решетке ЦМД фазовый переход происходит при определенной температуре, а в волновой ДС фазовый переход растянут по температуре. Это можно объяснить и тем, что в доменной границе волновой ДС нет ограничения, связанного с длиной доменной границы, какой есть в ЦМД. Кроме того, волновая ДС характеризуется еще большей неустойчивостью, чем даже полосовая ДС. Все это связано с геометрией ДС.

При T_{K2} в доменной границе происходит фазовый переход первого рода в простую блоховскую границу. Волновая ДС переходит скачком в решетку полосовых доменов ДС$_2$ (см. рис. 4*д* и рис. 5, отрезок DK_1). Это фазовый переход первого рода. При этом период полосовой ДС$_2$ соответствует периоду равновесной полосовой ДС при T_{K2}.

При охлаждении пленки до T_2 вертикальные блоховские линии в доменной границе решетки полосовой ДС$_1$ исчезают путем раскручивания, и блоховская доменная граница переходит в доменную границу Нееля. Это фазовый переход первого рода в доменной границе. При этом решетка полосовой ДС$_1$ скачком переходит в новую полосовую ДС с большим периодом, т. е. в решетке происходит фазовый переход первого рода.

Решетка полосовой ДС$_2$, полученная при $T_{K2} = 0.98T_N$, сохраняется в широком температурном интервале T_{K2}–T_2 (см. рис. 5, отрезок K_1K_2). Эта решетка имеет минимальный период, максимальную плотность и простую блоховскую границу. Из всех решеток полосовой структуры решетка полосовой ДС$_2$ наиболее устойчива и сохраняется в максимальном температурном интервале. При этом наблюдаются одинаковые особенности решетки полосовой ДС$_2$ и решетки ЦМД, полученной при $T = 0.98T_N$: максимальная плотность упаковки, минимальный период и простая блоховская граница.

Если увеличить температуру формирования T_f полосовой ДС, то увеличивается и температура фазового перехода из полосовой в волновую ДС (рис. 8, отрезки AB, A_1B_1). Нетрудно видеть, что с увеличением температуры формирования уменьшается период полосовой ДС и число вертикальных линий Блоха в ее доменной границе.

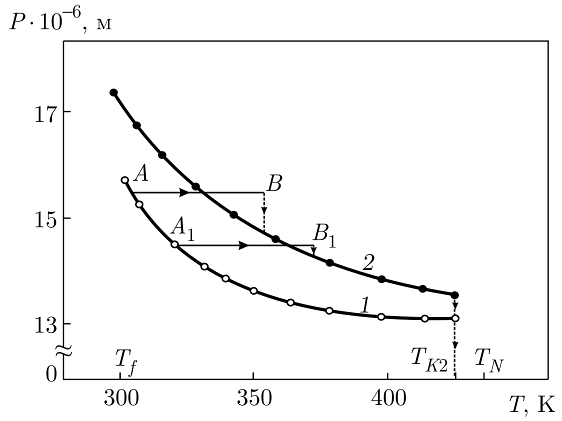


Рис. 8. Температурные зависимости параметров ДС: *1* – равновесная решетка полосовых доменов; *2* – равновесная волновая ДС. Зависимость температуры фазового перехода из полосовой в волновую ДС от температуры формирования решетки полосовой ДС

Из приведенных результатов эксперимента видно, что температурный интервал устойчивости решетки полосовой ДС увеличивается с уменьшением периода и уменьшением количества вертикальных блоховских линий в доменной границе.

При анализе полученных результатов следует учесть, что при формировании ДС количество вертикальных блоховских линий в доменной границе зависит от величины напряженности импульсного магнитного поля и намагниченности насыщения пленки при данной температуре, а их плотность зависит от длины доменной границы. Если в решетке ЦМД длина доменной границы ограничена диаметров ЦМД, то в полосовой ДС такого ограничения нет. Длина полосовых доменов практически безгранична. Мы гипотетически можем считать, что количество вертикальных блоховских линий можно создать большое, но и здесь есть ограничение: ширина домена. При большой ширине домена, а следовательно, большой ширине доменной границы количество вертикальных блоховских линий должно уменьшаться путем раскручивания. Но для этого нужна энергия. Если нет изменения внешних параметров (температуры, а следовательно, и намагниченности), то при большом количестве вертикальных блоховских линий в доменной границе происходит фазовый переход первого рода. Полосовая ДС переходит в волновую ДС, магнитостатическая энергия которой меньше, чем у полосовой ДС, а вертикальные блоховские линии плотно размещаются по изгибам синусоидальной границы волновой ДС.

Таким образом, из экспериментальных результатов видно, что механизм формирования равновесных решеток полосовой и волновой ДС и механизм спонтанных фазовых переходов обусловлены структурой доменных границ и зависимостью магнитостатической энергии ДС от ее периода. Что касается особенностей решетки полосовой ДС и решетки ЦМД, то в их подобии и различиях значительную роль играет геометрия ДС.

2.3. Влияние внешнего магнитного поля на температурную устойчивость решеток полосовой доменной структуры

В работе рассматривается влияние магнитного поля смещения на температурную устойчивость двух видов жестких решеток полосовой ДС. Первая — полосовая ДС$_1$ — формируется импульсным магнитным полем, перпендикулярным плоскости пленки, в отсутствие поля смещения; вторая — полосовая ДС$_2$ — формируется импульсным полем в присутствии поля смещения. Затем импульсное поле выключается. Величина напряженности импульсного поля равна $H = 0.5H_c$. Обе решетки являются равновесными, но при наложении поля смещения полосовая ДС$_1$ оказывается неравновесной, а полосовая ДС$_2$, формируемая при разных полях смещения, является равновесной [23].

Под действием импульсного магнитного поля создаются жесткие доменные границы с большим количеством вертикальных блоховских линий. В жестких доменах имеются две силы (сила отталкивания вертикальных блоховских линий и магнитостатическая сила), которые уравновешиваются сжимающими силами поверхностного натяжения стенки Блоха. Стенка Блоха и поле смещения дают статически устойчивый домен.

При $T = 300$ К и $H = 0$ создана решетка полосовой ДС$_1$. При формировании полосовой ДС$_1$ импульсное поле создает такое количество доменов, при котором общая энергия решетки оказывается минимальной. Плотность упаковки такой решетки $y = d/P = 0.5$, где d — ширина домена. При наложении поля смещения к магнитостатической энергии решетки добавляется зеемановская энергия, плотность которой различна внутри и вне домена, что приводит к изменению ширины домена. Но эти энергии не могут изменить количество доменов, поэтому период P_1 решетки полосовой ДС$_1$ остается постоянным при наложении поля смещения. Таким образом, с увеличением поля ширина домена d_1 с антипараллельной полю намагниченностью уменьшает-

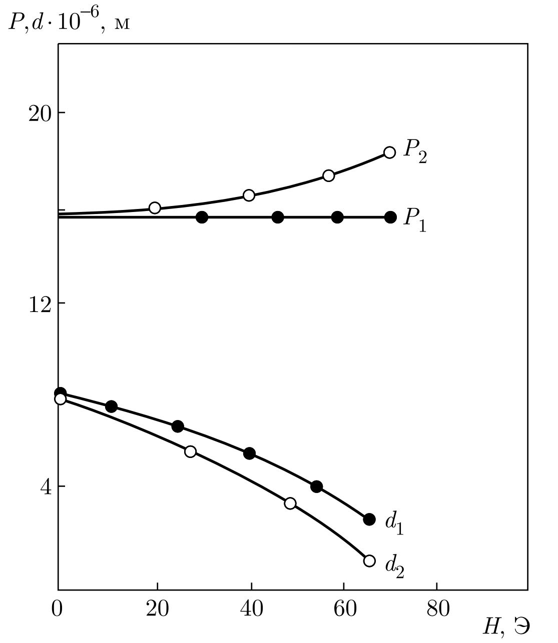


Рис. 9. Полевые зависимости периода P полосовой ДС и ширины d домена: P_1, d_1 – неравновесной полосовой ДС$_1$; P_2, d_2 – равновесной полосовой ДС$_2$ при 300 К

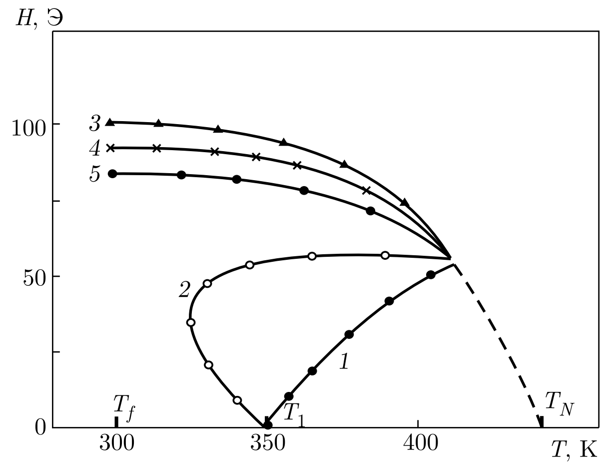


Рис. 10. Влияние магнитного поля смещения на температурную устойчивость решеток полосовой ДС: *1* – неравновесной полосовой ДС$_1$; *2* – равновесной полосовой ДС$_2$ и температурные зависимости поля коллапса: *3* — H_c ЦМД, *4* — H_c решетки ЦМД, *5* — H_c полосового домена

ся, период полосовой ДС$_1$ остается постоянным, а плотность решетки уменьшается (рис. 9).

На формирование решетки полосовой ДС$_2$ в присутствии поля смещения влияние оказывает баланс двух энергий — зеемановской и магнитостатической. С увеличением поля смещения вклад зеемановской энергии в общую энергию решетки растет. Поэтому при формировании равновесной полосовой ДС$_2$ (с минимумом общей энергии) импульсное поле создает меньшее количество доменов, что приводит к увеличению периода решетки P_2. Полевые зависимости ширины домена d_2 и периода P_2 решетки полосовой ДС$_2$ представлены на рис. 9. На рис. 9 видно, что при увеличении магнитного поля смещения в неравновесной решетке полосовой ДС$_1$ период остается постоянным, а ширина домена с антипараллельной полю намагниченностью уменьшается. В равновесной решетке полосовой ДС$_2$ при увеличении поля смещения период увеличивается, а ширина домена уменьшается. Такие же изменения происходят при увеличении магнитного поля смещения в подобных решетках ЦМД. При увеличении поля в неравновесной решетке ЦМД$_1$ период остается постоянным, а диаметр ЦМД уменьшается. В равновесной решетке ЦМД$_2$ с увеличением поля период увеличивается, диаметр ЦМД уменьшается [23]. Схожее влияние поля смещения на решетки ЦМД и решетки полосовой ДС обусловлено одинаковым влиянием магнитостатической и зеемановской энергий.

С увеличением температуры пленки решетка полосовой ДС$_1$, сформированная при нулевом поле смещения, сохраняется в интервале температур T_f–T_1. При T_1 происходит фазовый переход первого рода из полосовой ДС$_1$ в волновую ДС$_1$ с уменьшением периода доменной структуры (см. рис. 4*а,г* и рис. 10). При увеличении поля смещения температурный интервал устойчивости решетки полосовой ДС$_1$ увеличивается (рис. 10, кривая *1*). Максимальный интервал устойчивости решетки полосовой ДС$_1$ наблюдается при поле смещения $H = 50$ Э. При этом поле решетка сохраняется до температурного коллапса.

Полевая зависимость температурной устойчивости полосовой ДС$_2$, формируемой в присутствии поля смещения, представлена на рис. 10 (кривая *2*). Видно, что при поле смещения $0 < H < 0.5H_c$ температурный интервал устойчивости решетки уменьшается. При небольших полях, в которых формируется решетка полосовых доменов, нарушается баланс между магнитостатической и зеемановской энергиями. Решетка оказывается неустойчивой, и происходит фазовый переход первого рода из полосовой ДС$_2$ в волновую ДС$_2$ при температурах, меньших T_1. С увеличением поля до $H \geqslant 50$ Э действие зеемановской энергии увеличивается и температурный интервал устойчивости решетки полосовых доменов растет вплоть до температуры коллапса.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментально изучено влияние температуры и магнитного поля смещения на жесткую решетку полосовых доменов и на доменные границы.

Трудности, связанные с экспериментальными исследованиями свойств жесткой решетки полосовых доменов, обусловлены неустойчивостью полосовой ДС при влиянии внешних факторов. Поэтому при исследовании проводится сравнительная характеристика особенностей решетки полосовой ДС и решетки ЦМД. Наблюдаемые различия в их свойствах объясняются разной геометрией ДС.

Равновесная решетка полосовых доменов формируется монополярным импульсным магнитным полем, перпендикулярным плоскости пленки, при отсутствии поля смещения. Затем импульсное поле выключается. Обнаружено, что период решетки полосовой ДС зависит от величины напряженности импульсного поля. Получен целый ряд равновесных решеток полосовой ДС, сформированных при $T = 300$ К импульсным магнитным полем напряженностью $0.5H_c \leqslant H \leqslant 1.5H_c$. Решетка, сформированная полем напряженностью $H = 1.5H_c$, имеет максимальный период и является неустойчивой. При выключении поля она переходит в равновесную волновую структуру, т. е. происходит индуцированный полем фазовый переход первого рода.

Получены температурные зависимости параметров равновесных решеток полосовой и волновой ДС. Гипотетически можно предположить, что, подобно происходящему в жесткой решетке ЦМД [23], при изменении температуры в доменной границе полосовых доменов происходит фазовый переход первого рода, который вызывает спонтанный фазовый переход первого рода в жесткой решетке полосовых доменов.

Механизмы фазовых переходов в доменной границе при нагревании и охлаждении пленки имеют существенные различия. Число вертикальных блоховских линий в доменной границе уменьшается при нагревании путем аннигиляции, а решетка полосовой ДС переходит в волновую ДС. При охлаждении число вертикальных блоховских линий доменной границы уменьшается путем раскручивания, а решетка полосовых доменов переходит в новую решетку полосовых доменов с большим периодом и доменной границей Нееля.

При $T = 0.98T_N$ происходит фазовый переход первого рода волновой ДС в решетку полосовой ДС с минимальным периодом, максимальной плотностью упаковки и простой блоховской границей. Из всех решеток полосовой ДС эта решетка наиболее устойчива и сохраняется в максимальном температурном интервале.

Изучено влияние магнитного поля смещения на температурную устойчивость двух видов решеток полосовых доменов: полосовая $ДС_1$ формируется импульсным магнитным полем при отсутствии поля смещения; полосовая $ДС_2$ формируется импульсным магнитным полем в присутствии поля смещения. При формировании обе решетки являются равновесными. Но при наложении поля первая решетка является неравновесной, вторая, формируемая в присутствии поля смещения, является равновесной. При постоянной температуре формирования магнитное поле смещения оказывает разное влияние на параметры этих решеток, что сказывается и на их температурной устойчивости.

В первом случае магнитное поле оказывает влияние на уже сформированную с определенным числом доменов решетку. Поле уменьшает ширину домена с антипараллельной магнитному полю намагниченностью и не изменяет периода решетки. Стенка Блоха и магнитное поле дают статически устойчивый домен, что приводит к увеличению температурной устойчивости решетки полосовых доменов. Во втором случае магнитное поле смещения участвует в формировании решетки полосовых доменов. Баланс магнитостатической и зеемановской энергий приводит к уменьшению числа доменов в решетке, т. е. к увеличению периода и уменьшению ширины домена с антипараллельной полю намагниченностью. Температурный интервал устойчивости этой решетки зависит от соотношения магнитостатической и зеемановской энергий. При магнитном поле смещения величиной $H \geqslant 0.5H_c$ (H_c — поле коллапса ЦМД) в доменной границе обеих решеток происходит резкое уменьшение количества вертикальных блоховских линий путем аннигиляции. В результате обе решетки достигают максимального температурного интервала устойчивости.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика. Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1982).

2. C. Koey and U. Enz, Philips Res. Rep. **15**, 7 (1960).

3. А. К. Звездин, В. А. Котов, *Магнитооптика тонких пленок*, Наука, Москва (1988).

4. В. В. Рандошкин, А. Я. Червоненкис, *Прикладная магнитооптика*, Энергоиздат, Москва (1990).

5. А. Эшенфельдер, *Физика и техника цилиндрических магнитных доменов*, Мир, Москва (1983).

6. A. H. Bobek, Bell System Techn. J. **46**, 1901 (1967).

7. Ф. В. Лисовский, Е. Г. Мансветова, Ч. М. Пак, ЖЭТФ **111**, 293 (1997).

8. Г. В. Арзамасцева, Ф. В. Лисовский, Е. Г. Мансветова, М. П. Темирязева, ЖЭТФ **114**, 2089 (1998).

9. Г. В. Арзамасцева, М. Г. Евтихов, Ф. В. Лисовский, Е. Г. Мансветова, М. П. Темирязева, ЖЭТФ **134**, 282 (2008).

10. И. Е. Дикштейн, Ф. В. Лисовский, Е. Г. Мансветова, ЖЭТФ **125**, 1317 (2004).

11. Г. В. Арзамасцева, М. Г. Евтихов, Ф. В. Лисовский, Е. Г. Мансветова, ЖЭТФ **140**, 516 (2011).

12. Е. Г. Галкина, И. Ю. Михайлов, Б. А. Иванов, Письма в ЖЭТФ **93**, 792 (2011).

13. А. М. Калашникова, В. В. Павлов, A. V. Kimel, A. Kirilyuk, Th. Rasing, Р. В. Писарев, ФНТ **38**, 1088 (2012).

14. Я. И. Грановский, А. А. Леонов, Ю. А. Мамалуй, Ю. А. Сирюк, Изв. РАН, сер. физ. **70**, 956 (2006).

15. Ю. А. Мамалуй, Ю. А. Сирюк, А. В. Безус, ФНТ **37**, 150 (2011).

16. Г. В. Арзамасцева, А. М. Балбашов, Ф. В. Лисовский, Е. Г. Мансветова, А. Г. Темирязев, М. П. Темирязева, ЖЭТФ **147**, 793 (2015).

17. A. I. Popov, Z. V. Gareeva, A. K. Zvezdin, T. T. Gareev, A. S. Sergeev, and A. P. Pyatakov, Ferroelectrics **509**, 32 (2017).

18. P. Tierno, A. Soba, T. H. Johansen, and F. Sagues, Appl. Phys. Lett. **93**, 214102 (2008).

19. P. Tierno, F. Sagues, T. H. Johansen, and T. M. Fischer, Phys. Chem. Chem. Phys. **11**, 9615 (2009).

20. А.С. 1341681 СССР, *Способ формирования решетки цилиндрических магнитных доменов в магнитоодноосной пленке.* Ю. А. Мамалуй, Ю. А. Сирюк, Г. С. Ярош (СССР), №4066126; заявл. 05.05.86, опубл. 17.11.87, бюлл. №36.

21. А.С. 1461259 СССР, *Способ формирования равновесной решетки цилиндрических магнитных доменов.* В. А. Заблоцкий Ю. А. Мамалуй, Ю. А. Сирюк, Г. С. Ярош (СССР), №4240061; заявл. 09.03.87 (не публ. в откр. печати).

22. А. Малоземов, Дж. Слонзуски, *Доменные стенки в материалах с цилиндрическими магнитными доменами*, Мир, Москва (1982).

23. Ю. А. Сирюк, А. В. Безус, Е. Д. Бондарь, В. В. Кононенко, ФТТ **61**, 1250 (2019).

24. Ю. А. Сирюк, А. В. Безус, Е. Д. Бондарь, В. В. Смирнов, в *Сб. трудов XX Международного междисциплинарного симпозиума* (*ОМА-20*), Ростов-на-Дону (2017), с. 209.

25. Ю. А. Сирюк, А. В. Безус, ФТТ **55**, 547 (2013).

26. А. Н. Богданов, Д. А. Яблонский, ФТТ **22**, 680 (1980).

27. В. А. Заблоцкий, К. В. Ламонова, Ю. А. Мамалуй, Ю. А. Сирюк, Физика и техника высоких давлений **6**, 34 (1996).

28. В. А. Заблоцкий, Автореф. дисс. на соискание ученой степени доктора физ.-мат. наук: 01.04.11 магнетизм, Донецк (1995).

29. R. W. Shaw, D. E. Hill, R. M. Sandfort, and J. W. Moody, J. Appl. Phys. **44**, 2346 (1973).

30. H. Callen and R. M. Josephs, J. Appl. Phys. **45**, 1977 (1971).

ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 3, стр. 511–523

МАГНИТНЫЕ СВЕРХТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЗОНДОВЫХ АТОМОВ ^{57}Fe В МАНГАНИТАХ $CaCu_xMn_{7-x}O_{12}$ ($0 \leq x \leq 1$)

Я. С. Глазкова [a*], *В. С. Русаков* [a], *А. В. Соболев* [a], *А. М. Гапочка* [a], *Т. В. Губайдулина* [a], *О. С. Волкова* [a,b], *А. Н. Васильев* [a,b,c], *И. А. Пресняков* [a]

[a] *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова 119991, Москва, Россия*

[b] *Уральский федеральный университет 620002, Екатеринбург, Россия*

[c] *Национальный исследовательский Южно-Уральский государственный университет 454080, Челябинск, Россия*

Поступила в редакцию 8 сентября 2020 г.,
после переработки 8 сентября 2020 г.
Принята к публикации 12 октября 2020 г.

Представлены данные магнитных и мессбауэровских измерений на ядрах зондовых атомов ^{57}Fe в структуре замещенных манганитов $CaCu_xMn_{6.96-x}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$ ($0 \leq x \leq 1$), измеренных в магнитоупорядоченной области температур $T \leq T_{N,C}$. На основании полученных результатов проведен анализ обменных взаимодействий и возможных конфигураций магнитного упорядочения катионов с октаэдрической (Mn^{3+}/Mn^{4+}) и квадратной (Cu^{2+}/Mn^{3+}) кислородными координациями. Рассмотрены также причины немонотонного изменения температуры магнитного упорядочения $T_{N,C}(x)$ медь-замещенных манганитов в зависимости от состава x.

DOI: 10.31857/S0044451021030111

1. ВВЕДЕНИЕ

Представленная работа является продолжением опубликованных нами ранее исследований сверхтонких взаимодействий зондовых атомов ^{57}Fe в серии манганитов $CaCu_xMn_{6.96-x}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$ ($0 \leq x \leq 1$), проведенных в парамагнитной ($T > T_{N,C}$) области температур [1]. Было показано, что параметры сверхтонких взаимодействий атомов ^{57}Fe оказываются очень «чувствительными» к особенностям локальной структуры этих манганитов, которые непосредственно связаны с процессами орбитального и зарядового упорядочений в октаэдрической подрешетке марганца. В настоящей публикации представлены результаты мессбауэровского исследования зондовых атомов ^{57}Fe в структуре манганитов тех же медь-содержащих составов, но проведенного в магнитоупорядоченной области температур ($T \leq T_{N,C}$).

Большой интерес к изучению медь-замещенных манганитов $CaCu_xMn_{7-x}O_{12}$ ($0 \leq x \leq 3$) связан с проявляемыми ими необычными и важными для практического применения электрофизическими свойствами [2], а также зависящими от состава (x) сложными магнитными конфигурациями катионов с квадратной $\{Cu^{2+}/Mn^{3+}\}_{sq}$ и октаэдрической $\{Mn^{3+}/Mn^{4+}\}_{oct}$ кислородными координациями [3]. Несмотря на большое число работ, посвященных этим соединениям, основная их часть относится к составам с высоким содержанием меди ($x \geq 1$) [4]. Одним из основных результатов цитируемых исследований является вывод о том, что при формировании магнитной структуры этих соединений наибольшее влияние оказывают конкурирующие друг с другом сильные межподрешеточные $\{Cu\}_{sq}$–O–$\{Mn\}_{oct}$ и внутриподрешеточные $\{Mn\}_{oct}$–O–$\{Mn\}_{oct}$ обменные взаимодействия [5]. Кроме того, предполагается, что для составов $x \geq 1$ магнитные моменты катионов Cu^{2+} выстраиваются антипараллельно относительно момента октаэдрической подрешетки марганца; магнитные моменты катионов Mn^{3+} с квадратной кислородной координацией повернуты отно-

* E-mail: janglaz@bk.ru

сительно моментов атомов $\{Mn^{3+}/Mn^{4+}\}_{oct}$ на угол ($\alpha < 180°$), величина которого зависит от состава манганитов $CaCu_xMn_{7-x}O_{12}$ [3]. Следует, однако, отметить, что в литературе отсутствует какая-либо информация о характере трансформации магнитной структуры от антиферромагнитной ($x = 0$) до ферримагнитной ($x > 0$) для составов с небольшим содержанием меди ($x < 1$).

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Синтез и результаты структурных исследований допированных зондовыми атомами ^{57}Fe (1 ат. % по отношению к атомам Mn в октаэдрической подрешетке) образцов $CaCu_xMn_{6.96-x}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$ ($0 \le x \le 1$) подробно были описаны в предыдущей работе [1]. Рентгеновские дифрактограммы синтезированных образцов показали отсутствие каких-либо посторонних примесных фаз.

Мессбауэровские спектры на ядрах ^{57}Fe измерялись на спектрометре MS-1104Em, работающем в режиме постоянных ускорений. Для обработки и анализа мессбауэровских данных были использованы методы модельной расшифровки и восстановления распределения сверхтонких параметров спектров, которые реализованы в программе SpectrRelax [6,7]. Изомерные сдвиги мессбауэровских спектров ядер ^{57}Fe приведены относительно α-Fe при комнатной температуре.

Измерения магнитной восприимчивости осуществлялись на магнитометре типа SQUID Quantum Design MPMS 1T в интервале температур от 2 К до 300 К в режиме ZFC (охлаждение образца в отсутствие внешнего магнитного поля).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Магнитные измерения

На рис. 1 показаны температурные зависимости магнитной восприимчивости χ и ее обратной величины χ^{-1} для образцов $CaCu_xMn_{6.96-x}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$ составов $x = 0, 0.2, 0.5$ и 0.7. Диапазоны изменения магнитной восприимчивости и характерные особенности профилей кривых $\chi^{-1}(T)$ и $\chi(T)$ практически полностью совпадают с соответствующими зависимостями для тех же составов с медью, не допированных железом. Таким образом, введение в структуру манганитов микроколичеств катионов железа существенно не повлияло на макроскопические магнитные характеристики исследуемых соединений.

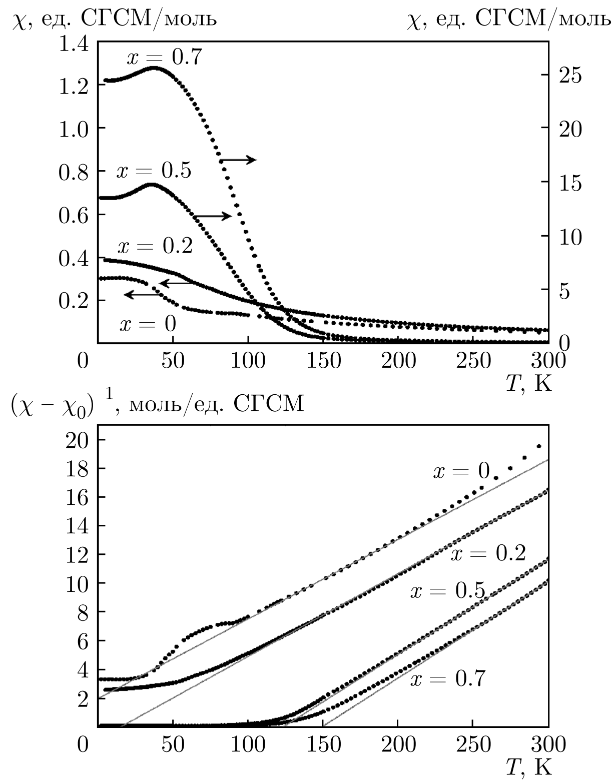


Рис. 1. Температурные зависимости магнитной восприимчивости $\chi(T)$ (*а*) и обратной величины $(\chi-\chi_0)^{-1}(T)$ (*б*) для манганитов $CaCu_xMn_{6.96-x}{}^{57}Fe_xO_{12}$ ($x = 0$, 0.2, 0.5, 0.7). Прямыми линиями показана экстраполяция $(\chi-\chi_0)^{-1}(T \to 0)$ при оценке значений константы Вейсса

Описание экспериментальных зависимостей $\chi^{-1}(T)$ в рамках закона Кюри–Вейсса $\chi = \chi_0 + C/(T+\Theta)$ (рис. 1*б*) позволило оценить значения эффективных моментов $\mu_{eff} \approx 2.83\sqrt{C}$, приходящихся на формульную единицу, и значения констант Вейсса (Θ) (табл. 1). Полученные значения μ_{eff} очень близки к соответствующим величинам, рассчитанным исходя из катионного состава рассматриваемых соединений. Все составы характеризуются положительными значениями Θ, возрастающими по мере увеличения содержания меди. Этот результат свидетельствует о том, что введение в квадратную подрешетку ян-теллеровских катионов Cu^{2+} приводит к усилению ферромагнитных взаимодействий. Из полученных нами зависимостей $\chi(T)$ и $\chi^{-1}(T)$ трудно достоверно определить температуры магнитного упорядочения манганитов (температура Нееля (T_N) — для $x = 0$; температура Кюри (T_C) — для составов $0 < x \le 1$). В том числе поэтому были предприняты низкотемпературные мессбауэровские измерения при $T < T_{N,C}$.

Таблица 1. Результаты обработки температурных зависимостей $\chi^{-1}(T)$ манганитов $CaCu_xMn_{6.96-x}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$ ($x = 0.2, 0.5, 0.7$)

x	Диапазон температур, К	C	Θ, К	$f = \Theta/T_C$	$(\mu_{eff})^{exp}, \mu_B$	$(\mu_{eff})^{\rm calc}, \mu_B*$
0.2	246–297	17.44	13	0.17	11.79	12.37
0.2	198–243	16.42	27	0.36	11.44	12.37
0.5	246–297	15.23	122	1.22	11.05	12
0.7	249–297	15.16	147	1.13	11.00	11.75

Примечание. * Значения рассчитывались в предположении $g = 2\left(\mu_{eff} = g\sqrt{S(S+1)}\mu_B\right)$.

3.2. Мессбауэровские измерения

В мессбауэровских спектрах ядер ^{57}Fe в манганитах $CaCu_xMn_{6.96-x}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$, измеренных в магнитоупорядоченной области температур, наблюдается широкое резонансное поглощение, что свидетельствует о появлении на ядрах зондовых атомов ^{57}Fe непрерывного распределения $p(H_{hf})$ сверхтонких магнитных полей H_{hf}. В качестве примера на рис. 2 и 3 представлены спектры и соответствующие им распределения $p(H_{hf})$ для составов $x = 0.2$ и 0.5 при разных температурах. Как следует из полученных распределений, повышение температуры сначала приводит к уширению $p(H_{hf})$, а затем появлению узкого пика в области нулевых полей $H_{hf} \to 0$, что фактически можно трактовать как начало перехода в немагнитное состояние. При дальнейшем повышении температуры наблюдается увеличение интенсивности «парамагнитного» пика вплоть до полного исчезновения магнитоупорядоченной фазы (широкой области распределения $p(H_{hf})$).

Из анализа температурных зависимостей среднего значения сверхтонкого поля $\langle H_{hf}\rangle$ и дисперсии $D_{p(H)} = \left\langle (H_{hf} - \langle H_{hf}\rangle)^2\right\rangle$ распределения $p(H_{hf})$ (рис. 4) для каждого состава были определены температуры перехода образцов манганитов в магнитоупорядоченное состояние. Полученная зависимость $T_{N,C} = f(x)$ показана на рис. 5, на котором также приведены значения температур магнитного упорядочения для недопированных ^{57}Fe образцов $CaCu_xMn_{7-x}O_{12}$, определенные из магнитных измерений [3, 8]. Отметим, что для составов $0 \le x \le 0.3$ зондовые атомы ^{57}Fe не оказывают заметного влияния на значения T_N и T_C. В то же время, для составов $0.4 \le x \le 1$ введение даже микроколичеств атомов железа приводит к существенному уменьшению значений T_C по сравнению с недопированными образцами.

В соответствии с полученной зависимостью $T_{N,C} = f(x)$ (рис. 5) увеличение содержания меди вызывает сначала постепенное уменьшение ($0 \le \le x \le 0.3$), а затем довольно заметное увеличение ($0.4 \le x \le 1$) значения T_C. Важно также отметить, что минимальное значение $T_C \approx 50$ К приходится как раз на состав $x \approx 0.4$, начиная с которого в парамагнитных спектрах ^{57}Fe присутствует единственная компонента — квадрупольный дублет [1]. Как было показано в нашей предыдущей работе [1], данная компонента соответствует катионам Fe^{3+}, в окружении которых находятся катионы марганца, участвующие в «быстром» электронном перескоке $Mn^{3+} \leftrightarrow Mn^{4+}$ («усредненное» локальное окружение Fe^{3+}). Таким образом, можно предположить, что наблюдаемое немонотонное изменение $T_{N,C} = f(x)$ связано со спецификой динамики электронного перескока $Mn^{3+} \leftrightarrow Mn^{4+}$ в октаэдрической подрешетке для двух областей составов манганитов. Первая область ($0 \le x \le 0.3$) соответствует зарядовому упорядочению, т. е. стабилизации марганца в двух различимых состояниях, Mn^{3+} и Mn^{4+} («замороженный» электронный обмен). Во второй области составов ($0.4 \le x \le 1$) происходит зарядовое разупорядочение, в результате которого все катионы марганца октаэдрической подрешетки имеют одинаковое «усредненное» зарядовое состояние $Mn^{(3+\sigma)+}$ (величина σ зависит от содержания меди в образцах). Далее мы отдельно обсудим особенности сверхтонкой магнитной структуры спектров для манганитов $CaCu_xMn_{6.96-x}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$ с малым ($0 \le x \le 0.3$) и высоким ($0.4 \le x \le 1$) содержанием меди.

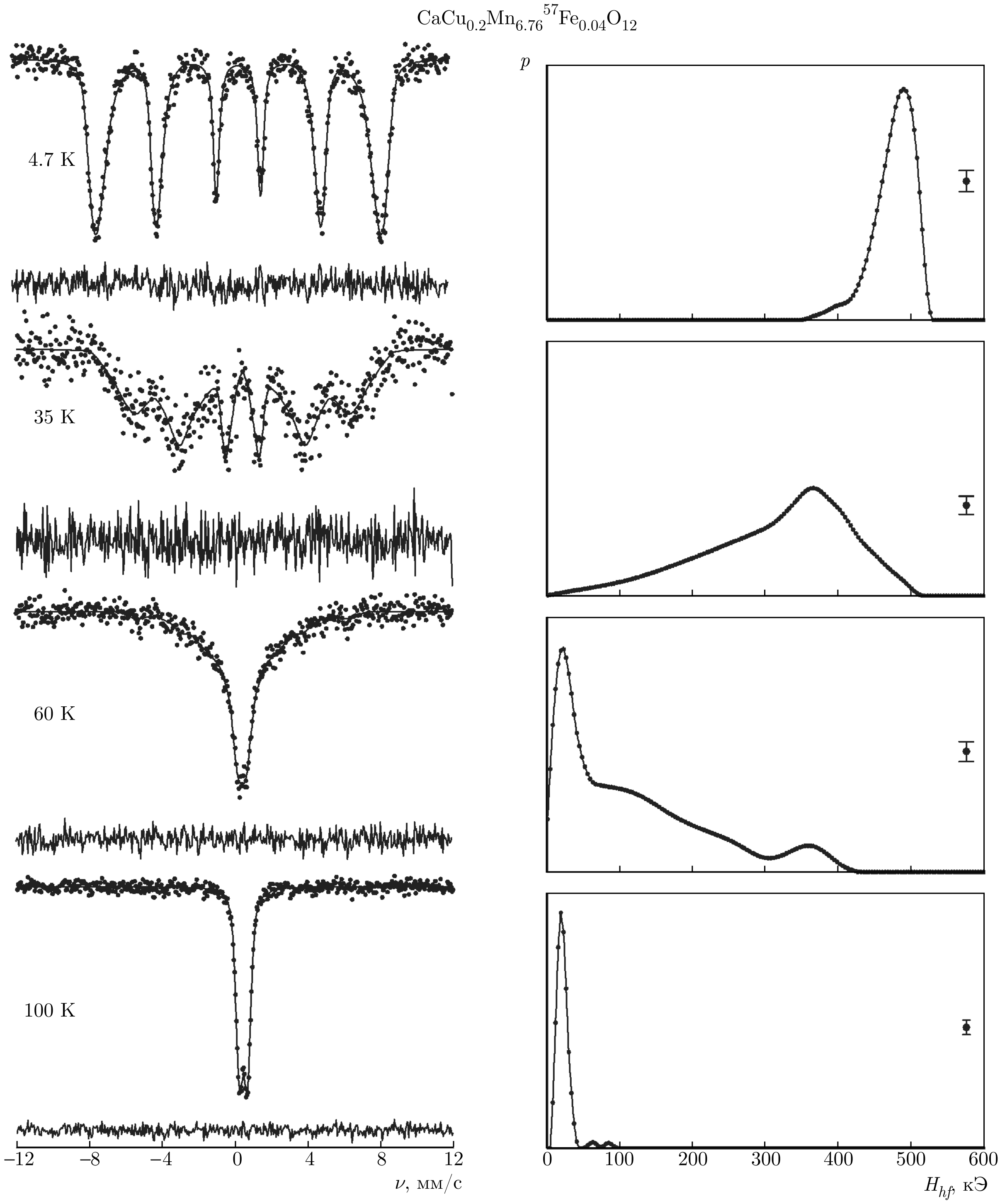


Рис. 2. Мессбауэровские спектры ядер ^{57}Fe в манганите $CaCu_{0.2}Mn_{6.76}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$ (левая панель) и соответствующие им распределения $p(H_{hf})$ сверхтонкого магнитного поля H_{hf} (правая панель)

а) Составы $0 \leq x \leq 0.3$

Анализ распределения $p(H_{hf})$ для манганита $CaMn_{6.96}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$ при $T = 4.6$ K (рис. 6) показывает, что зондовые катионы Fe^{3+} находятся в неэквивалентных магнитных позициях (как минимум, в четырех). Изменение с температурой профиля спектра демонстрирует релаксационный характер, что часто наблюдается в случае примесных ионов Fe^{3+} в

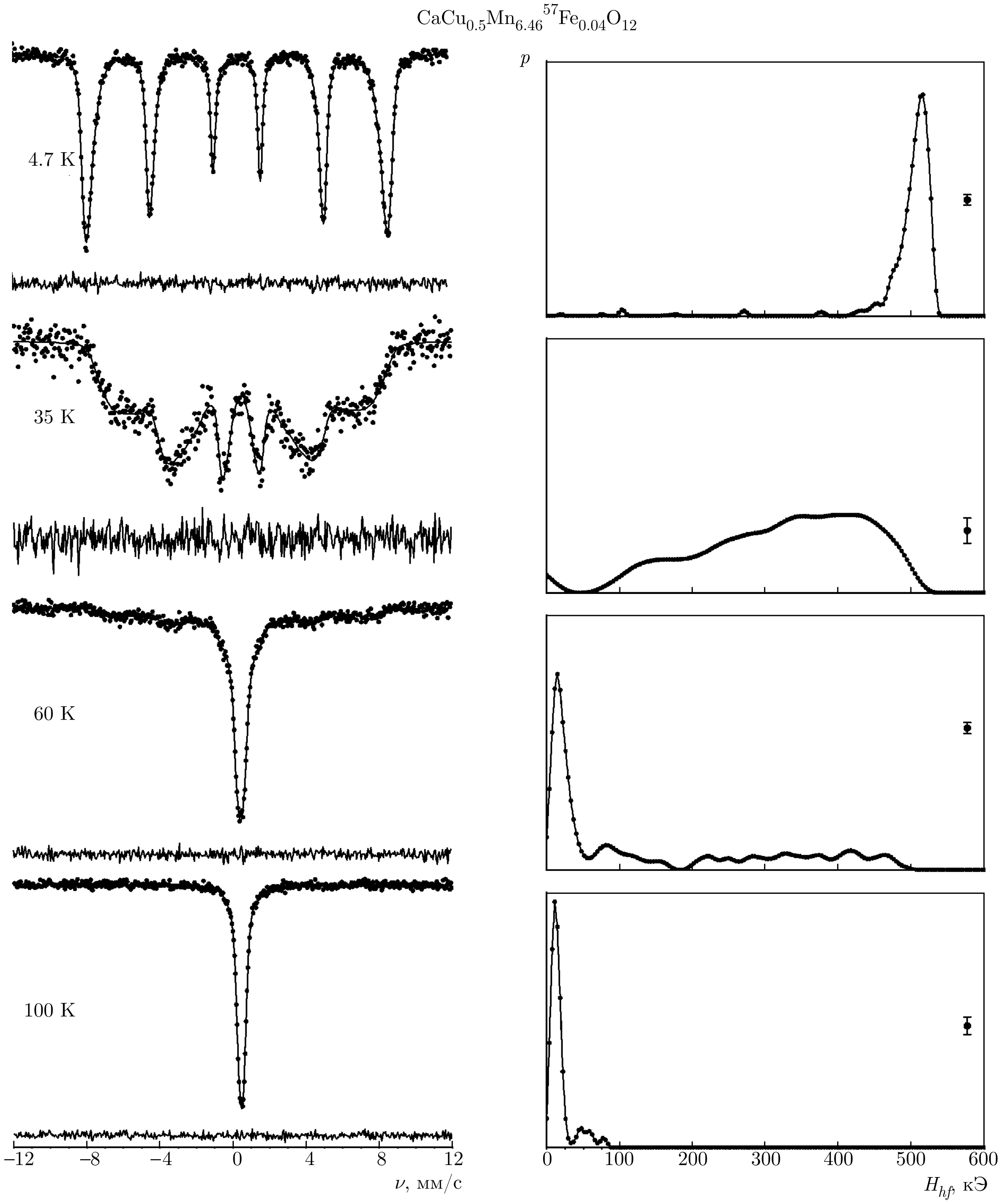


Рис. 3. Мессбауэровские спектры ядер ^{57}Fe в манганите $CaCu_{0.5}Mn_{6.46}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$ (левая панель) и соответствующие им распределения $p(H_{hf})$ сверхтонкого магнитного поля H_{hf} (правая панель)

магнитоупорядоченных матрицах с конкурирующими (фрустрированными) обменными взаимодействиями [9–12]. В магнитной области температур ($T \ll T_N$) на катион Fe^{3+} действует «эффективное молекулярное поле» H_{mol}, пропорциональное сумме обменных интегралов (J_k) с магнитным окружени-

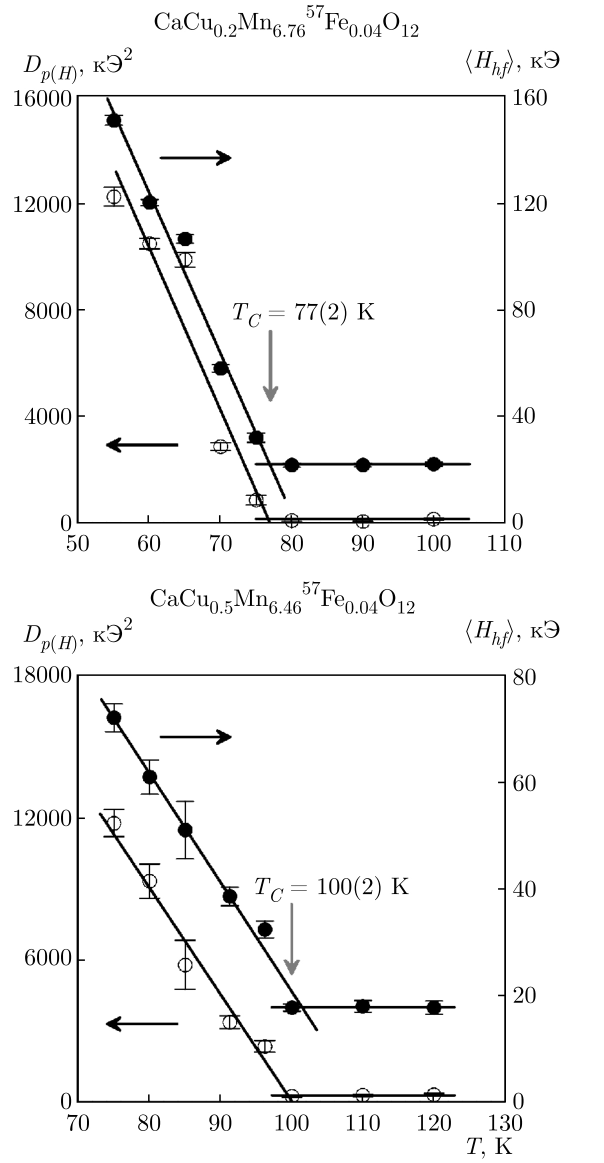


Рис. 4. Температурные зависимости дисперсии $D_{p(H)}$ функции распределения $p(H_{hf})$ и среднего значения сверхтонкого магнитного поля $\langle H_{hf} \rangle$ на ядрах ^{57}Fe в манганитах составов с $x = 0.2$ и 0.5

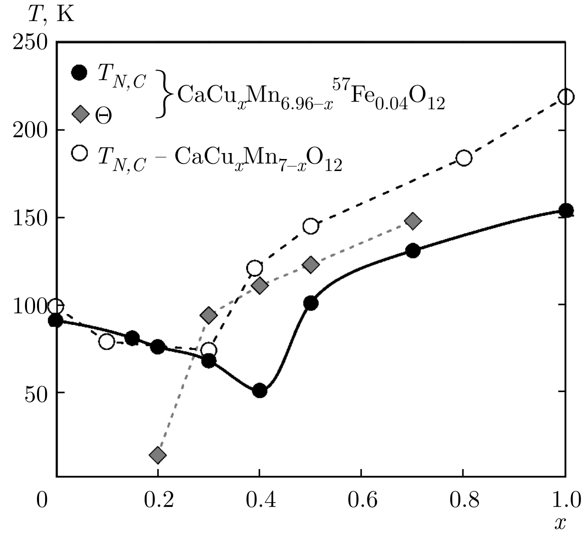


Рис. 5. Зависимости температуры магнитного упорядочения ($T_{N,C}$) и константы Вейсса (Θ) от содержания меди в манганитах $CaCu_xMn_{7-x}O_{12}$ [3–8] и допированных железом образцах $CaCu_xMn_{6.96-x}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$ ($0 \le x \le 1$)

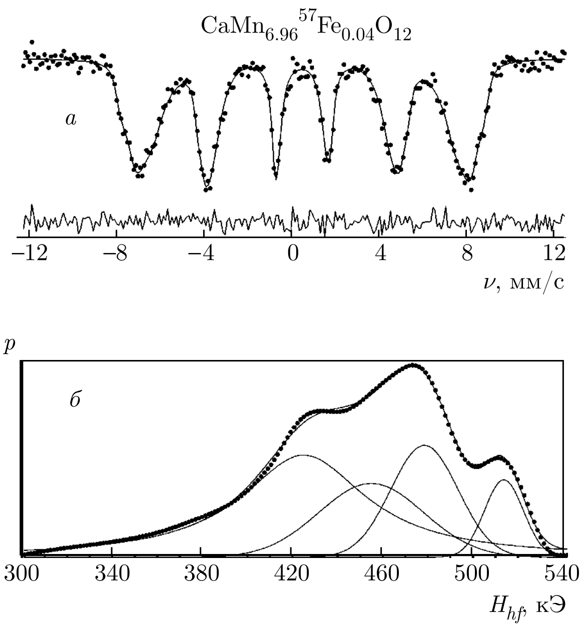


Рис. 6. Мессбауэровский спектр манганита $CaMn_{6.96}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$, измеренный при $T = 4.6$ К (*а*), и соответствующее ему распределение $p(H_{hf})$ сверхтонких магнитных полей H_{hf} (*б*)

ем этого катиона: $H_{mol,\mathrm{Fe}}(T) \propto J_k S_{z,k}(T)$ [13], где $S_{z,k}$ — проекция спина соседнего k-го магнитного соседа. Если обменные интегралы J_k близки друг к другу по величине и противоположны по знаку, то связь примесного иона с его магнитными соседями будет значительно ослабленной, что, как правило, и приводит к релаксационным мессбауэровским спектрам даже при низких температурах [9–12]. В нашем случае подтверждением подобного поведения может служить необычная температурная зависимость приведенного среднего значения сверхтонкого поля $\sigma_{\mathrm{Fe}}(T) = \langle H_{hf}(T) \rangle / \langle H_{hf}(4.6\ \mathrm{K}) \rangle$ (рис. 7), полученного из распределений $p(H_{hf})$. Экспериментальный профиль $\sigma_{\mathrm{Fe}}(T)$ существенно отличается от полученной в работе [14] зависимости приведенной намагниченности $\sigma_{\mathrm{Mn}}(T)$, которая хорошо описыва-

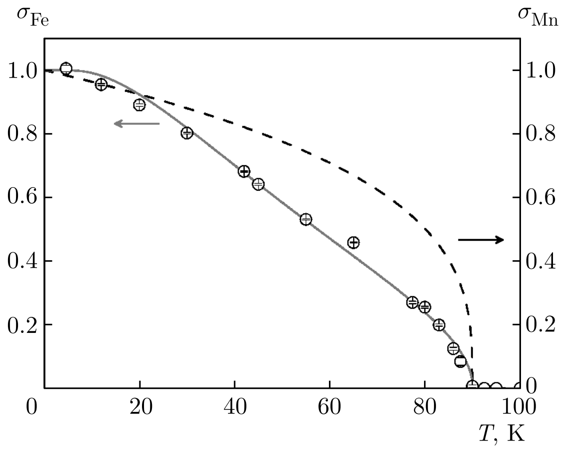


Рис. 7. Температурные зависимости приведенного среднего значения сверхтонкого поля $\sigma_{\mathrm{Fe}}(T) = \langle H_{hf}(T)\rangle / \langle H_{hf}(4.6)\rangle$ на ядрах ^{57}Fe в структуре $\mathrm{CaMn_{6.96}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}}$ (сплошная линия) и приведенной намагниченности (σ_{Mn}) октаэдрической марганцевой подрешетки, которая описывается уравнением $(T–T_N)^\beta$ для $\beta = 0.314$ и $T_N = 90$ К [14] (штриховая линия)

ется степенной функцией $(T–T_N)^\beta$, где $\beta = 0.314$ [14]. Для описания $\sigma_{\mathrm{Fe}}(T)$ мы воспользовались следующим уравнением [13]:

$$\sigma_{\mathrm{Fe}}(T) = \frac{\langle H_{hf}(T)\rangle}{\langle H_{hf}(4.6\ \mathrm{K})\rangle} = \\ = B_S\left(\xi \frac{S_{\mathrm{Fe}}}{\langle S_{\mathrm{Mn}}\rangle + 1}\left(\frac{T_N}{T}\right)\sigma_{\mathrm{Mn}}(T)\right), \quad (1)$$

где $B_S(\ldots)$ — функция Бриллюэна для спина $S_{\mathrm{Fe}} = 5/2$ катионов $\mathrm{Fe}^{3+}(d^5)$; $\langle S_{\mathrm{Mn}}\rangle = 3.5$ — среднее значение спина катионов марганца в октаэдрической подрешетке; $\xi = J_{\mathrm{FeMn}}/J_{\mathrm{MnMn}}$ — варьируемый параметр, равный отношению обменного интеграла катионов железа с соседними катионами марганца (J_{FeMn}) и обменного интеграла между самими катионами марганца (J_{MnMn}).

Полученная в результате описания экспериментальной зависимости $\sigma_{\mathrm{Fe}}(T)$ (рис. 7) небольшая величина параметра $\xi = 0.46(1)$ действительно указывает на ослабление взаимодействия зондовых катионов Fe^{3+} с подрешеткой марганца, что равносильно уменьшению действующего на них молекулярного поля $H_{mol,\mathrm{Fe}} \ll H_{mol,\mathrm{Mn}}$ ($H_{mol,\mathrm{Mn}}$ — молекулярное поле, действующее на катионы марганца). В свою очередь, уменьшение $H_{mol,\mathrm{Fe}}$ приводит к росту заселенности $p(T) \sim \exp(-2\beta_e H_{mol,\mathrm{Fe}}/kT)$ возбужденных состояний катионов Fe^{3+} с различными значениями проекции спина $S_{Z,\mathrm{Fe}}$ на направление $H_{mol,\mathrm{Fe}}$, проявляясь в мессбауэровских спектрах в виде резкой температурной зависимости сверхтонкого магнитного поля $H_{hf}(T)$.

Таблица 2. Сверхтонкие параметры парциальных спектров Fe(i) ядер ^{57}Fe в манганитах $\mathrm{CaCu_{0.7}Mn_{6.26}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}}$ при $T = 4.6$ К

Парциальный спектр	δ, мм/с	ε, мм/с	H_{hf}, кЭ	I, %
Fe(1)	0.48(1)*	0.05(1)*	529.2(1)	19(3)
Fe(2)	0.48(1)*	0.05(1)*	519.1(1)	37(2)
Fe(3)	0.48(1)*	0.05(1)*	506.9(2)	23(1)
Fe(4)	0.48(1)*	0.05(1)*	495.9(1)	12(1)
Fe(5)	0.48(1)*	0.05(1)*	483.7(3)	6(1)
Fe(6)	0.48(1)*	0.05(1)*	468.8(7)	3(1)

Примечание. * При обработке спектров соответствующие параметры принимались равными друг другу.

Аналогичная сверхтонкая магнитная структура с уширенными зеемановскими компонентами, которые не могут быть описаны в виде суперпозиции конечного числа парциальных спектров, наблюдалась нами для других составов $\mathrm{CaCu}_x\mathrm{Mn}_{6.96-x}{}^{57}\mathrm{Fe}_{0.04}\mathrm{O}_{12}$ с малым содержанием меди ($0 \le x \le 0.3$). Детальная модельная расшифровка сверхтонкой магнитной структуры спектров манганита $\mathrm{CaMn_{6.96}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}}$, а также изоструктурных ему соединений $A\mathrm{Mn_7O_{12}}$ (A = Sr, Pb, Cd), допированных ^{57}Fe, — предмет отдельного рассмотрения.

б) Составы $0.4 \le x \le 1$

Мессбауэровский спектр ядер ^{57}Fe образца $\mathrm{CaCu_{0.7}Mn_{6.26}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}}$ ($T = 4.6$ К), являющийся типичным для всех манганитов составов $0.4 \le x \le 1$, представляет собой зеемановскую структуру с уширенными компонентами (рис. 8*а*). Модельная расшифровка показала, что данный спектр может быть описан в виде суперпозиции четырех зеемановских секстетов Fe(i), параметры которых приведены в табл. 2. Максимальное из полученных значений $H_{hf(i)}$ сверхтонкое поле $H_{hf(1)}$ оказывается довольно близким к соответствующим значениям $H_{hf} = 522$–531 кЭ (при $T = 4.2$ К) для ферромагнитных манганитов $\mathrm{La}_{1-x}\mathrm{A}_x\mathrm{Mn_{0.99}{}^{57}Fe_{0.01}O_3}$ (A = Ca, Sr; $x = 0.17$ [15], 0.25 [16, 17], 0.30 [18], 0.33 [19]), обладающих при $T < T_C$ металлическим типом проводимости. Как было показано в [15–19], высокая проводимость этих манганитов связана с участием разновалент-

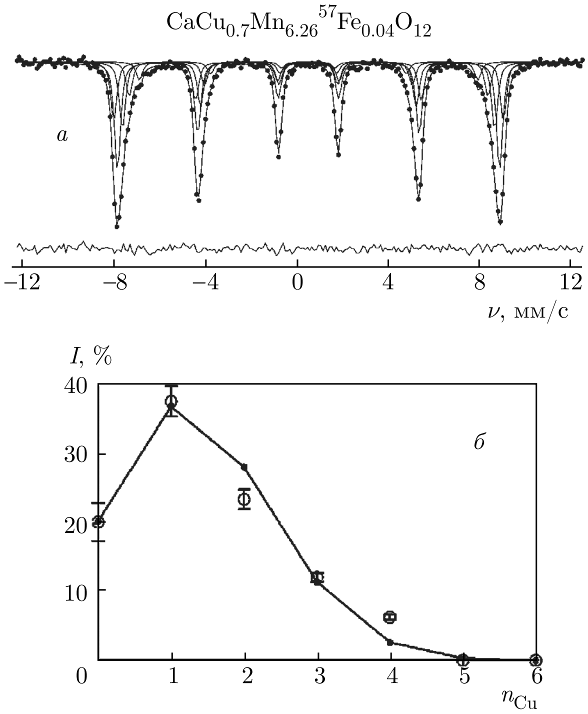


Рис. 8. Модельная расшифровка мессбауэровского спектра ядер ^{57}Fe в образце $CaCu_{0.7}Mn_{6.26}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$, измеренного при $T = 4.6$ K (*a*); относительные интенсивности (I) парциальных спектров $Fe(i)$ в зависимости от числа катионов Cu^{2+} в ближайшем катионном окружении зондовых катионов железа (*б*). Точки, соединенные сплошной линией, — биномиальное распределение

ных катионов марганца в «быстром» электронном перескоке $Mn^{3+} \leftrightarrow Mn^{4+}$ (двойной обмен Зинера). Важно отметить, что для всех этих составов измерения мессбауэровских спектров во внешнем магнитном поле [16, 19] показали антиферромагнитное упорядочение магнитных моментов зондовых катионов Fe^{3+} относительно намагниченности подрешетки марганца. Согласно опубликованным нами ранее [1] результатам измерения спектров манганитов $CaCu_xMn_{6.96-x}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$, в парамагнитной области температур, начиная с состава $x = 0.4$, зондовые катионы Fe^{3+} «чувствуют» в своем локальном окружении из октаэдрической подрешетки лишь усредненное валентное состояние катионов $Mn^{(3+\sigma)+}$. Это означает, что магнитное окружение атомов ^{57}Fe также должно быть однородным. Присутствие же в спектрах нескольких зеемановских секстетов с практически эквидистантными значениями сверхтонких полей $H_{hf(i)}$ ($H_{hf} = H_{hf(i)} - H_{hf(i-1)} \approx 11$ кЭ) связано с образованием в окружении железа разных конфигураций $\{(6-n)Mn^{3+}; nCu^{2+}\}_{sq}$ из катионов меди и марганца, принадлежащих подрешетке с квадратным кислородным окружением. Экспериментальные значения парциальных вкладов (I_i) зеемановских секстетов $Fe(i)$ в общий экспериментальный спектр хорошо описываются биномиальным распределением (рис. 8*б*):

$$P(n,y) = \left[\frac{6!}{n!(6-n)!}\right] y^n (1-y)^{6-n}, \qquad (2)$$

где $y(= x/3)$ — мольная доля катионов Cu^{2+} в квадратной подрешетке. Полученный результат свидетельствует о статистическом распределении катионов меди и марганца. В рамках данной модели зеемановский секстет с наибольшей величиной $H_{hf(1)} \approx 529$ кЭ соответствует позиции катионов Fe^{3+}, имеющих в своем ближайшем окружении только марганец, т. е. локальной конфигурации $\{6Mn^{3+}; 0Cu^{2+}\}_{sq}$. Замещение одного катиона Mn^{3+} на Cu^{2+} приводит к уменьшению сверхтонкого поля H_{hf}, в среднем, на величину $\Delta H_{hf} \approx 11$ кЭ (табл. 2).

Для того чтобы получить информацию о характере обменных взаимодействий между зондовыми катионами Fe^{3+} и окружающими их катионами Cu^{2+} и Mn^{3+} в квадратной кислородной координации, нами была предпринята попытка оценки вклада этих катионов в экспериментальную величину H_{hf} на ядрах ^{57}Fe. Для этого мы воспользовались результатами ранее проведенных мессбауэровских измерений на ядрах диамагнитных зондовых атомов ^{119}Sn в манганите $CaCu_3Mn_{3.96}{}^{119}Sn_{0.04}O_{12}$ [20]. В цитируемой работе было показано, что парциальный вклад в величину H_{hf} на ядрах олова от катиона Cu^{2+} с квадратной кислородной координацией составляет $h_{Sn} \approx 22$ кЭ [20]. Воспользовавшись этим значением, можно оценить аналогичный вклад от катиона Cu^{2+} в сверхтонкое поле H_{hf} на ядрах $^{57}Fe^{3+}$ в исследуемых медь-замещенных манганитах:

$$h_{Fe}^{(Cu)} \approx$$
$$\approx h_{Sn}^{(Cu)} \frac{-\sum\limits_{n=1}^{3} s_{ns}\varphi_{ns,Fe}(0) + b_{4s,Fe}\varphi_{4s,Fe}(0)}{-\sum\limits_{n=1}^{4} s_{ns}\varphi_{ns,Sn}(0) + b_{5s,Sn}\varphi_{5s,Sn}(0)} \times$$
$$\times \left(\frac{\cos\vartheta'}{\cos\vartheta}\right)^2, \quad (3)$$

где $\varphi_{ns}(0)$ — значения волновых функций ns-орбиталей на ядрах катионов Sn^{4+} и Fe^{3+}; s_{ns} — парные интегралы перекрывания ns-орбиталей катионов металлов и $2p_\sigma$-орбиталей анионов кислорода

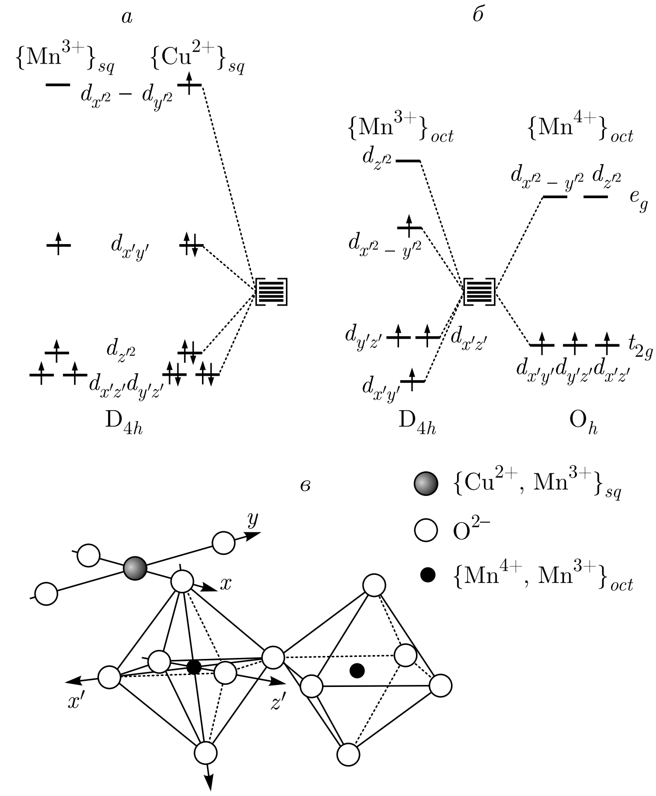


Рис. 9. Схематическое изображение одноэлектронных энергий $3d$-орбиталей катионов Cu^{2+}, Mn^{3+} и Mn^{4+} в кислородном окружении квадратной $\{Cu^{2+}, Mn^{3+}\}_{sq}$ (*а*) и октаэдрической $\{Mn^{4+}, Mn^{3+}\}_{oct}$ (*б*) координациями. *в*) Сочленение кислородных полиэдров квадратной и октаэдрической подрешеток

(O^{2-}); $b_{5s,\mathrm{Sn}}$ и $b_{4s,\mathrm{Fe}}$ — парные интегралы виртуального электронного переноса $2p^6(O^{2-}) \to ns^0$ для катионов Sn^{4+} и Fe^{3+}; ϑ и ϑ' — углы обменных связей соответственно Cu–O–Sn и Cu–O–Fe. В наших более ранних работах [20–22] было показано, что для оксидных фаз, в которых примесные катионы Sn^{4+} и Fe^{3+} занимают позиции с октаэдрической кислородной координацией, значения интегралов переноса составляют $b_{5s,\mathrm{Sn}} \approx 0.16$ и $b_{4s,\mathrm{Fe}} \approx 0.17$. Подстановка этих значений, а также значений волновых функций $\varphi_{ns}(0)$ для Sn^{4+} и Fe^{3+}, взятых из [23–25], в уравнение (3) дает оценочное значение $h_{\mathrm{Fe}}^{(\mathrm{Cu})} \approx \pm 5$ кЭ, которое заметно отличается от $\Delta H_{hf} = 11$ кЭ (табл. 2).

Ключевым моментом при объяснении различия экспериментального (ΔH_{hf}) и оценочного ($h_{\mathrm{Fe}}^{(\mathrm{Cu})}$) значений парциальных вкладов в H_{hf} служит предположение о взаимной ориентации магнитных моментов ($\boldsymbol{\mu}_i$) катионов Cu^{2+} ($\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{Cu}}$) и Mn^{3+} ($\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{Mn}}$) из «квадратной» подрешетки и зондовых катионов железа Fe^{3+} ($\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{Fe}}$), находящихся в октаэдрической кислородной координации. Если допустить, что оба магнитных момента $\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{Cu}}$ и $\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{Mn}}$ направлены антипараллельно относительно $\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{Fe}}$, то наблюдаемое соотношение $\Delta H_{hf} \approx 2h_{\mathrm{Fe}}^{(\mathrm{Cu})}$ можно объяснить лишь более высоким парциальным вкладом ($h_{\mathrm{Fe}}^{(\mathrm{Mn})}$) от катионов Mn^{3+} в H_{hf} по сравнению с рассчитанным нами вкладом $h_{\mathrm{Fe}}^{(\mathrm{Cu})} \approx \frac{1}{2}h_{\mathrm{Fe}}^{(\mathrm{Mn})}$. Однако данная ситуация маловероятна из-за специфики электронного строения ян-теллеровских катионов $Mn^{3+}(d^4)$ и $Cu^{2+}(d^9)$ в кристаллическом поле с квадратной точечной симметрией D_{4h} (рис. 9). Согласно схеме на рис. 9*а*, в случае катионов Cu^{2+} магнитоактивной (т. е. наполовину заполненной) является $d_{x^2-y^2}$-орбиталь, образующая прочные σ-связи с $2p_\sigma$-орбиталями ионов O^{2-}, через которые осуществляются сверхобменные взаимодействия $\{\mathrm{Cu}\}_{sq}$–O–$\{\mathrm{Fe/Mn}\}_{oct}$ (рис. 9*б*). Для катионов Mn^{3+} магнитоактивными являются d_{xz}-, d_{yz}-, d_{xy}-орбитали, которые образуют слабые π-связи с $2p_\pi$-орбиталями кислорода (рис. 9*а*). Орбиталь d_{z^2} также заполнена наполовину, но поскольку ее электронная плотность сконцентрирована вдоль локальной оси C_4, перпендикулярной плоскости квадратов (MnO_4), она не может эффективно участвовать в сверхобменных связях $\{\mathrm{Mn}\}_{sq}$–O–$\{\mathrm{Fe}\}_{oct}$ (рис. 9*б*). Поскольку π-связи Mn–O намного слабее σ-связей Cu–O, логично предположить, что обменные взаимодействия с участием катионов Mn^{3+}, даже если и оказываются соизмеримыми по силе, никак не могут превышать взаимодействия с участием катионов Cu^{2+} той же подрешетки. Поскольку в основе механизмов индуцирования полей $h_{\mathrm{Fe}}^{(\mathrm{Mn})}$ и $h_{\mathrm{Fe}}^{(\mathrm{Cu})}$ лежат те же представления о сверхобменных взаимодействиях $\{\mathrm{Mn/Cu}\}_{sq}$-O-$\{\mathrm{Fe}\}_{oct}$, становится очевидной ошибочность исходного допущения о противоположной взаимной ориентации магнитных моментов катионов квадратной ($\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{Cu/Mn}}$) и октаэдрической ($\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{Fe}}$) подрешеток.

Если допустить, что для рассматриваемой серии составов твердых растворов $0 < x \le 1$ магнитные моменты ($\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{Cu}}$) катионов Cu^{2+} ориентируются ферромагнитно, а катионов Mn^{3+} — антиферромагнитно относительно магнитных моментов ($\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{Fe}}$), то индуцируемые катионами Fe^{3+} парциальные вклады $h_{\mathrm{Fe}}^{(\mathrm{Mn})}(> 0)$ и $h_{\mathrm{Fe}}^{(\mathrm{Cu})}(< 0)$ должны иметь противоположные знаки (рис. 10). В этом случае замещение катионов Mn^{3+} на катионы Cu^{2+} в «квадратной» подрешетке будет приводить к уменьшению поля H_{hf} на величину:

$$\Delta H_{hf} \approx |h_{\mathrm{Fe}}^{(\mathrm{Cu})}| + |h_{\mathrm{Fe}}^{(\mathrm{Mn})}|.$$

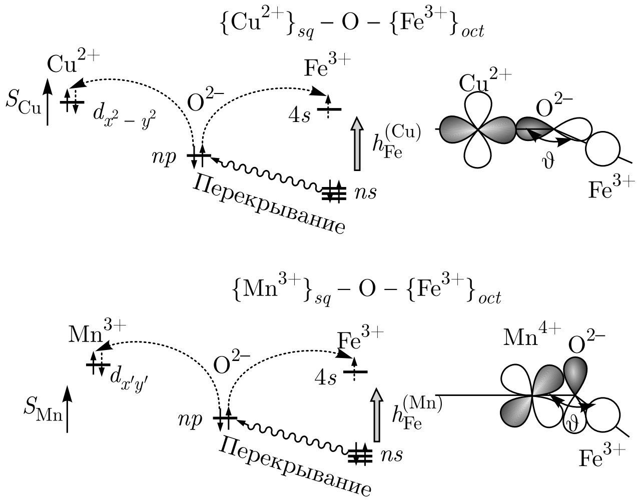


Рис. 10. Схематическое представление индуцирования сверхтонкого магнитного поля H_{hf} на ядрах ^{57}Fe катионами меди $h_{Fe}^{(Cu)}$ и марганца $h_{Fe}^{(Mn)}$ «квадратной» подрешетки

Подстановка в данное выражение значений $\Delta H_{hf} = 11$ кЭ и $h_{Fe}^{(Cu)} = -5$ кЭ, дает оценку величины вклада марганцевой подрешетки $h_{Fe}^{(Mn)} = 6$ кЭ. На первый взгляд может показаться неожиданным, что вклад $|h_{Fe}^{(Cu)}|$, обусловленный σ-связями орбиталей $d_{x^2-y^2}$(Cu) и p_σ(O), соизмерим по величине с соответствующим вкладом $|h_{Fe}^{(Mn)}|$, возникающим за счет значительно более слабого π-перекрывания орбиталей $d_{xz,yz}$(Mn) и p_π(O) (рис. 10). Причиной этого может являться разная угловая зависимость этих вкладов: $h_{Fe}^{(Cu)} \propto \cos^2\vartheta$ и $h_{Fe}^{(Mn)} \propto \sin^2\vartheta$ [20]. Поскольку угол обменных связей $\{Mn/Cu\}_{sq}$–O–$\{Fe\}_{oct}$ составляет $\vartheta \approx 107$–$109°$, то, несмотря на существенное различие параметров связей Cu–O и Mn–O [20], сами вклады $|h_{Fe}^{(Cu)}|$ и $|h_{Fe}^{(Mn)}|$ оказываются близкими друг другу по величине.

Согласно правилам Канамори – Гуденафа – Андерсона (КГА) [26], магнитные взаимодействия обоих ян-теллеровских катионов Cu^{2+} и Mn^{3+} с высокоспиновыми катионами Fe^{3+}, имеющими ровно наполовину заполненные 3d-орбитали, должны носить антиферромагнитный характер. Однако наши расчеты и экспериментальные данные свидетельствуют о том, что только катионы $\{Mn^{3+}\}_{sq}$ образуют с катионами $\{Fe^{3+}\}_{oct}$ антиферромагнитные связи, в то время как $\{Cu^{2+}\}_{sq}$ с более сильными σ-связями Cu–O выстраивают свои магнитные моменты $\boldsymbol{\mu}_{Cu}$ параллельно магнитным моментам зондов $\boldsymbol{\mu}_{Fe}$ (рис. 10). Причина такого, на первый взгляд, неожиданного поведения становится понятной, если учесть межподрешеточные $\{Cu\}_{sq}$–O–$\{Mn\}_{oct}$ и внутриподрешеточные $\{Fe\}_{oct}$–O–$\{Mn\}_{oct}$ обменные взаимодействия. Как мы уже отмечали, проведенные ранее мессбауэровские измерения во внешнем магнитном поле легированных ^{57}Fe манганитов $La_{1-x}(Ca,Sr)_xMnO_3$ [15–19] показали, что моменты $\boldsymbol{\mu}_{Fe}$ выстраиваются антипараллельно намагниченности октаэдрической марганцевой подрешетки. На основании этих результатов мы можем предположить, что и в случае $CaCu_xMn_{7-x}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$ магнитные моменты катионов Fe^{3+} ориентируются антипараллельно подрешетке $\{Mn^{3+}/Mn^{4+}\}_{oct}$. В этом случае магнитные моменты $\boldsymbol{\mu}_{Cu}$ также будут антипараллельны намагниченности октаэдрической подрешетки марганца.

3.3. Магнитные взаимодействия в системе $\mathbf{CaCu_xMn_{7-x}O_{12}}$ $(0 \le x \le 1)$

Из представленной в предыдущем разделе схемы обменного взаимодействия зондовых катионов Fe^{3+} со своим магнитным окружением следует, что: (i) магнитные моменты катионов $\{Mn^{3+}\}_{sq}$ имеют то же направление, что и подрешетка катионов с октаэдрическим кислородным окружением $\{Mn^{3+}/Mn^{4+}\}_{oct}$; (ii) моменты $\boldsymbol{\mu}_{Cu}$ антипараллельны той же подрешетке $\{Mn^{3+}/Mn^{4+}\}_{oct}$; (iii) магнитные моменты ян-теллеровских катионов $\{Mn^{3+}\}_{sq}$ и $\{Cu^{2+}\}_{sq}$ направлены антиферромагнитно по отношению друг к другу. Интересно, что предложенная нами взаимная ориентация магнитных моментов согласуется с результатами расчетов *ab initio* для двух крайних представителей медь-замещенных твердых растворов $CaMn_7O_{12}$ [27, 28] и $CaCu_3Mn_4O_{12}$ [29]. Было показано [27–29], что в соответствии с правилами КГА [26] основной вклад в ферромагнитное взаимодействие между катионами Mn^{3+} октаэдрической и квадратной подрешеток связан со спиновым переносом между наполовину заполненными $d_{x^2-y^2}$-орбиталями катионов $\{Mn^{3+}\}_{oct}$ и пустыми орбиталями той же симметрии катионов $\{Mn^{3+}\}_{sq}$ (рис. 11). В то же время, сильное антиферромагнитное взаимодействие между катионами подрешеток $\{Mn^{3+}\}_{oct}$ и $\{Cu^{2+}\}_{sq}$ обусловлено спиновым переносом между наполовину заполненными $d_{x^2-y^2}$-орбиталями обоих переходных металлов (рис. 11).

Согласно результатам измерения магнитной восприимчивости исследуемых составов (рис. 1*б*), увеличение содержания меди приводит к росту положительной величины константы Вейсса Θ, т. е. усилению ферромагнитных взаимодействий. Данный вы-

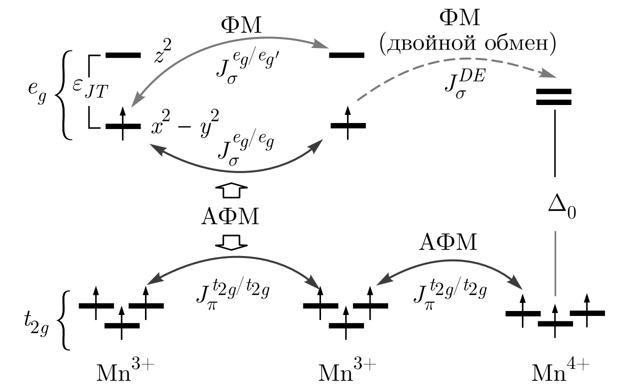


Рис. 11. Схема, поясняющая происхождение различных вкладов (ФМ — ферромагнитные и АФМ — антиферромагнитные) в обменные взаимодействия между катионами марганца в октаэдрической подрешетке

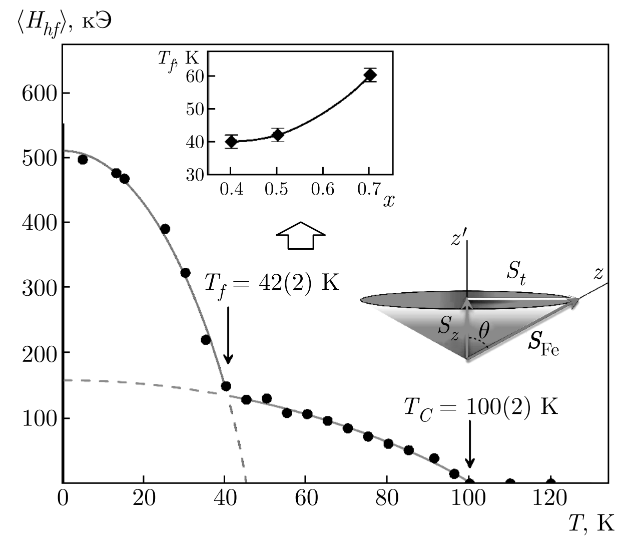


Рис. 12. Температурная зависимость среднего значения сверхтонкого поля $\langle H_{hf}\rangle$ на ядрах ^{57}Fe в манганите $CaCu_{0.5}Mn_{6.46}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$. На вставке вверху показано изменение температуры T_f при увеличении содержания меди в образцах $CaCu_xMn_{6.96-x}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$. Вставка справа схематично демонстрирует вклад поперечной (S_t) и продольной (S_z) составляющих электронного спина ($\boldsymbol{S}_{Fe}$) катионов Fe^{3+} (z — ось квантования). При $T < T_f$ (красная область) происходит «замораживание» составляющей $S_t(t)$ и $H_{hf} \propto S_{Fe}$; при $T > T_f$ (зеленая область) — быстрая прецессия составляющей $\langle S_t(t)\rangle = 0$, следовательно, $H_{hf}(T) \propto S_z(T)$

вод согласуется с отмечавшимся в наших предыдущих исследованиях [1] постепенным увеличением степени делокализации e_g-электронов в подрешетке $\{Mn^{3+}\}_{oct}$ с последующим переходом в режим быстрого электронного перескока $Mn^{3+} \leftrightarrow Mn^{4+}$ (для составов $x \le 0.3$). Косвенным подтверждением того, что при $x \ge 0.4$ основной ферромагнитный вклад связан с включением механизма двойного обмена Зинера, является наблюдаемое нами именно для этих составов значительное понижение температуры магнитного упорядочения (рис. 5). Появление в кристалле примесных центров Fe^{3+}, способных рассеивать свободные носители заряда, может приводить к образованию областей с пониженной подвижностью электронов. Это, в свою очередь, ослабляет ферромагнитный вклад, связанный с двойным электронным обменом, проявляясь, в частности, в заметном понижении температуры магнитного упорядочения (T_C). Для составов ($x \le 0.3$) с преимущественно локализованными зарядами Mn^{3+}/Mn^{4+} введение небольшого количества легирующих атомов ^{57}Fe не должно заметным образом ослабить обменные взаимодействия в октаэдрической подрешетке, а значит, существенно повлиять на значение T_C (рис. 5).

Наконец, следует обратить внимание на немонотонное изменение с составом температуры магнитного упорядочения манганитов (рис. 5). Мы предполагаем, что одной из основных причин такой немонотонной зависимости $T_C = f(x)$ является конкуренция различных по знаку и величине вкладов в обменные взаимодействия между разновалентными катионами марганца октаэдрической подрешетки.

Прежде всего отметим, что при гетеровалентном замещении $Cu^{2+} \to Mn^{3+}$ в октаэдрической подрешетке образуется эквивалентное количество катионов Mn^{4+}. Увеличение же концентрации ионов Mn^{4+} приводит к росту числа обменных связей $Mn^{3+}(\uparrow)$–O–$Mn^{4+}(\uparrow)$, в которых ферромагнитный (ФМ) обмен ($J_\sigma^{e_g/e'_g}$) реализуется за счет перекрывания пустых $e_g(d_{x^2-y^2}/d_{z^2})$-орбиталей и наполовину заполненных $d_{x^2-y^2}$-орбиталей соответственно катионов Mn^{4+} и Mn^{3+} (рис. 11). Ферромагнитный вклад конкурирует с сильным антиферромагнитным (АФМ) обменом ($J_\pi^{t_{2g}/t_{2g}}$) с участием наполовину заполненных t_{2g}-орбиталей катионов Mn^{4+} и Mn^{3+} (рис. 11). Видимо, для составов $x \le 0.3$ преобладает АФМ-вклад, влияние которого ослабевает по мере увеличения содержания меди, что проявляется в виде уменьшения T_C (рис. 5). Как уже отмечалось, увеличение T_C для образцов составов $0.4 \le x \le 1$ обусловлено включением механизма двойного обмена Зинера (J_σ^{DE}), влияние которого заметно усиливается при увеличении степени делокализации e_g-электронов катионов Mn^{3+} (уменьшение энергии ян-теллеровского расщепления ε_{JT} (рис. 11); см. детали в работе [1]).

В заключение отметим, что для составов манганитов ($0.5 \le x \le 0.7$) с наиболее высокими значениями параметров фрустрации $f = \Theta/T_C$ (табл. 1) на температурных зависимостях среднего сверхтонкого поля $\langle H_{hf}(T)\rangle$ на ядрах ^{57}Fe отчетливо виден характерный излом при $T_f < T_C$ (рис. 12). При увеличении содержания меди значение точки T_f смещается в область более высоких температур (верхняя вставка на рис. 12). Ранее подобные зависимости наблюдались для фрустрированных магнитных систем, проявляющих свойства «возвратных» спиновых стекол (*reentrant spin-glass*) [30–34]. В цитируемых работах было высказано предположение, что переход в область температур $T < T_f$ обусловлен «замораживанием» поперечной составляющей (S_t) электронного спина катионов Fe^{3+} ($\boldsymbol{S}_{\rm Fe}$) (правая вставка на рис. 12), что приводит к более резкому возрастанию экспериментальной зависимости $\langle H_{hf}(T)\rangle$ при понижении температуры измерения [30–34]. Следует, однако, отметить, что вопрос о том, в какой степени данная модель применима для зондовых атомов ^{57}Fe в $CaCu_xMn_{7-x}O_{12}$ требует дальнейшего более всестороннего экспериментального подтверждения и детального анализа.

4. ВЫВОДЫ

Проведено исследование магнитных сверхтонких взаимодействий на ядрах зондовых атомов ^{57}Fe в системе твердых растворов $CaCu_xMn_{6.96-x}{}^{57}Fe_{0.04}O_{12}$ ($0 \le x \le 1$). На основании сравнительного анализа результатов магнитных измерений и данных мессбауэровских спектров были определены температуры ($T_{N,C}$) перехода образцов в магнитоупорядоченное состояние, а также константы Вейсса (Θ). Для всей исследуемой серии составов увеличение содержания меди приводит к росту положительной величины Θ, т. е. к усилению ферромагнитных взаимодействий. Напротив, изменение $T_{N,C} = f(x)$ демонстрирует немонотонный характер. Для первой группы составов ($0 \le x \le 0.3$) происходит уменьшение, а для второй группы ($0.4 \le x \le 1$) — увеличение значений T_C по мере увеличения содержания меди. Показано, что причина такого немонотонного изменения T_C может быть связана с конкуренцией различных по знаку вкладов в обменные взаимодействия между разновалентными катионами марганца в октаэдрической подрешетке. Полуколичественный анализ значений парциальных вкладов в величину сверхтонкого поля H_{hf} на ядрах ^{57}Fe от катионов Mn^{3+} и Cu^{2+} позволил установить, что магнитные моменты $\boldsymbol{\mu}_{\rm Mn}$ катионов $\{Mn^{3+}\}_{sq}$ имеют то же направление, что и моменты катионов $\{Mn^{3+}/Mn^{4+}\}_{oct}$ с октаэдрическим кислородным окружением; магнитные моменты $\boldsymbol{\mu}_{\rm Cu}$ антипараллельны моментам катионов $\{Mn^{3+}/Mn^{4+}\}_{oct}$. Полученные данные показывают, что из-за различия электронного строения ян-теллеровских ионов Cu^{2+} и Mn^{3+}, а также геометрических параметров связей $\{Cu,Mn\}_{sq}$–O–$\{Mn\}_{oct}$, взаимодействие между разными подрешетками имеет неоднородный и, возможно, фрустрированный характер.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-33-20214). Магнитные измерения образцов выполнены при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-02-00015-а) и Российского научного фонда (грант № 19-42-02010). Работа частично поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации в рамках Закона Правительства РФ № 211 (договоры №№ 02.A03.21.0006, 02.A03.21.0011).

ЛИТЕРАТУРА

1. Я. С. Глазкова, В. С. Русаков, А. В. Соболев и др., ЖЭТФ **156**, 1115 (2019).
2. А. Н. Васильев, О. С. Волкова, ФНТ **33**, 1181 (2007).
3. W. Sławiński, R. Przeniosło, I. Sosnowska, and M. Bieringer, J. Phys.: Condens. Matter **22**, 186001 (2010).
4. J. Sánchez-Benítez, J. A. Alonso, M. J. Martínez-Lope et al., Chem. Mater. **15**, 2193 (2003).
5. O. Volkova, E. Goodilin, A. Vasiliev et al., Письма в ЖЭТФ **82**, 724 (2005).
6. M. E. Matsnev and V. S. Rusakov, AIP Conf. Proc. **1489**, 178 (2012).
7. M. E. Matsnev and V. S. Rusakov, AIP Conf. Proc. **1622**, 40 (2014).
8. I. O. Troyanchuk, L. A. Bashkirov, L. V. Balyko et al., Phys. Stat. Sol. (A) **89**, 601 (1985).
9. W. Yi, Y. Kumagai, N. A. Spaldin et al., Inorg. Chem. **53**, 9800 (2014).
10. I. A. Presniakov, V. S. Rusakov, T. V. Gubaidulina et al., Phys. Rev. B **76**, 214407 (2007).

11. W. Yi, A. J. Princep, Y. Guo et al., Inorg. Chem. **54**, 8012 (2015).

12. W. Yi, Y. Matsushita, Y. Katsuya et al., Dalton Trans. **44**, 10785 (2015).

13. V. Jaccarino, L. R. Walker, and G. K. Wertheim, Phys. Rev. Lett. **13**, 752 (1964).

14. R. Przeniosło, I. Sosnowska, E. Suard, and T. Hansen, Appl. Phys. A **74** [Suppl.], S1731 (2002).

15. A. Tkachuk, K. Rogacki, D. E. Brown et al., Phys. Rev. B **57**, 8509 (1998).

16. B. Hannoyer, G. Marest, J. M. Greneche et al., Phys. Rev. B **61**, 9613 (2000).

17. M. Pissas, G. Kallias, E. Devlin et al., J. Appl. Phys. **81**, 5770 (1997).

18. F. Studer, N. Nguyen, O. Toulemonde, and A. Ducouret, Int. J. Inorg. Mater. **2**, 671 (2000).

19. A. Simopoulos, M. Pissas, G. Kallias et al., Phys. Rev. B **59**, 1263 (1999).

20. I. A. Presniakov, V. S. Rusakov, G. Demazeau et al., Phys. Rev. B **85**, 024406 (2012).

21. A. V. Sobolev, I. A. Presnyakov, V. S. Rusakov et al., Izv. Akad. Nauk: Ser. Fiz. **69**, 1514 (2005).

22. A. V. Sobolev, I. A. Presnyakov, K. V. Pokholok et al., Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. **71**, 1314 (2007).

23. J. K. Lees and P. A. Flinn, J. Chem. Phys. **48**, 882 (1968).

24. R. E. Watson, Phys. Rev. **111**, 1108 (1958).

25. E. Clementi, IBM J. Res. Develop. **9**, 2 (1965).

26. D. Khomskii, *Transition Metal Compounds*, Cambridge (2014).

27. X. Z. Lu, M.-H. Whangbo, S. Dong et al., Phys. Rev. Lett. **108**, 187204 (2012).

28. N. J. Perks, R. D. Johnson, C. Martin et al., Nat. Commun. **3**, 1277 (2012).

29. R. Weht and W. E. Pickett, Phys. Rev. B **65**, 014415 (2001).

30. M. M. Abd-Elmeguid, H. Micklitz, R. A. Brand, and W. Keune, Phys. Rev. B **33**, 7833 (1986).

31. S. Chillal, M. Thede, F. J. Litterst et al., Phys. Rev. B **87**, 220403(R) (2013).

32. A. Kuprin, D. Wiarda, and D. H. Ryan, Phys. Rev. B **61**, 1267 (2000).

33. R. A. Brand, J. Lauer, and W. Keune, Phys. Rev. B **31**, 1630 (1985).

34. T. Sato, T. Ando, T. Ogawa et al., Phys. Rev. B **64**, 184432 (2001).

ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 3, стр. 524–532

ВЫСОКОСКОРОСТНАЯ ДЕФОРМАЦИЯ ТИТАНА В УДАРНЫХ ВОЛНАХ ПРИ НОРМАЛЬНОЙ И ПОВЫШЕННОЙ ТЕМПЕРАТУРАХ

Г. И. Канель[*], *А. С. Савиных*[**], *Г. В. Гаркушин*[***], *С. В. Разоренов*[****]

Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия

Институт проблем химической физики Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 6 ноября 2020 г.,
после переработки 6 ноября 2020 г.
Принята к публикации 23 ноября 2020 г.

Проведены измерения упругопластического ударного сжатия, разгрузки, а также ступенчатого ударного сжатия титана при комнатной температуре и в окрестности $600\,^{\circ}\mathrm{C}$. Определены зависимости динамического предела текучести от температуры и давления ударного сжатия, получены зависимости скорости деформации в ударных волнах в диапазоне 10^5–10^7 с$^{-1}$ от величины сдвигового напряжения и температуры. В противоположность данным для металлов со структурой ГЦК обнаружено уменьшение предела текучести титана за ударной волной. Обсуждается возможное объяснение уменьшения предела текучести уменьшением напряжения пластического течения по мере роста двойников и их обратимостью.

DOI: 10.31857/S0044451021030123

1. ВВЕДЕНИЕ

В исследованиях последних лет было экспериментально обнаружено явление аномального термического упрочнения металлов, т. е. возрастание напряжения пластического течения с увеличением температуры при высоких скоростях деформации [1–5]. Этот эффект был обнаружен в экспериментах с ударными волнами при субмикросекундных длительностях действия нагрузки и скоростях деформации больших примерно 10^4 с$^{-1}$. Его проявление иллюстрируется на рис. 1, где представлены результаты измерений профилей скорости свободной тыльной поверхности пластин стали [6], меди [7] и титана [8] в процессе выхода на нее упругопластических волн ударного сжатия при нормальной и повышенных температурах. На представленных волновых профилях регистрируется упругий предвестник с напряжением сжатия за его фронтом, равным динамическому пределу упругости в этих условиях HEL (Hugoniot elastic limit), и следующая за ним пластическая ударная волна. Аномальное поведение проявляется в росте динамического предела упругости при увеличении температуры испытаний, а также в увеличении времени возрастания параметров в пластической ударной волне, т. е. времени релаксации напряжений или характерной вязкости материала. Видно, что динамический предел упругости стали [6] с увеличением температуры понижается, т. е. ее поведение (как и других металлов с объемно-центрированной кубической структурой [4]) подобно имеющему место в обычных условиях. С увеличением температуры сокращается также время релаксации напряжений в пластической ударной волне. В опытах с медью [7] и другими металлами с гранецентрированной кубической (ГЦК) структурой [4], напротив, динамический предел упругости и время релаксации напряжений в пластической ударной волне с увеличением температуры аномально возрастают. В случае титана скорость сжатия в пластической ударной волне с увеличением температуры остается практически неизменной. Амплитуда упругого предвестника в титане при нагреве немного увеличивается, но этот рост почти полностью определяется уменьшением модуля сдвига [8].

[*] E-mail: kanel@ficp.ac.ru
[**] E-mail: savas@ficp.ac.ru
[***] E-mail: garkushin@ficp.ac.ru
[****] E-mail: razsv@ficp.ac.ru

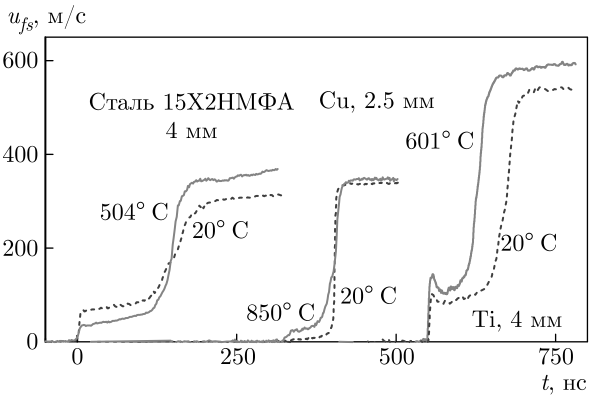


Рис. 1. Профили скорости свободной тыльной поверхности образцов стали [6], меди [7] и титана [8] в процессе выхода на нее упругопластических волн ударного сжатия при нормальной и повышенных температурах. Значения температуры и толщины образцов указаны у профилей

Аномальное термическое упрочнение связывается со сменой преобладающих механизмов торможения дислокаций при переходе от низкоскоростного деформирования к высокоскоростному. В частности, при высоких скоростях деформации доминирующим механизмом торможения дислокаций становится фононная вязкость или фононное трение, а роль тепловых флуктуаций в движении дислокаций уменьшается. Поскольку фононная вязкость пропорциональна температуре, увеличение последней должно сопровождаться увеличением напряжения пластического течения при высоких скоростях деформации. Это обстоятельство уже учитывается при развитии физической теории пластичности и построении определяющих соотношений и моделей высокоскоростной деформации (см., например, [9–13]), но ряд аспектов явления остается еще неясным. Обсуждаются и другие интерпретации аномального термического упрочнения, но недостаток экспериментальных данных затрудняет достижение более определенных заключений. В частности, остается пока неясным, как изменяется напряжение высокоскоростного пластического течения при нормальной и повышенных температурах с возрастанием величины деформации. Неопределенность вызвана тем, что деформация сопровождается размножением дислокаций, что, с одной стороны, должно облегчать пластическую деформацию, а с другой — приводить к деформационному упрочнению вследствие их взаимной блокировки. В экспериментах с ударными волнами начальные значения напряжения течения в упругом предвестнике относятся практически к нулевой пластической деформации, а в пластических ударных волнах с измеримым временем возрастания деформация меньше 5 %.

Для расширения диапазона пластических деформаций в работах [7, 14–16] предложены и опробованы постановки экспериментов, доступные для регистрации и анализа температурных эффектов, а также обеспечивающие включение в рассмотрение квазиупругой части разгрузки из ударно-сжатого состояния и организацию ступенчатого ударного сжатия. В экспериментах с ГЦК-металлами (алюминием и медью) найдено, что, в то время как при комнатной температуре напряжение течения монотонно возрастает с увеличением давления ударного сжатия, при высоких температурах даже небольшая пластическая деформация в ударной волне сопровождается резким уменьшением напряжения течения и уменьшением или даже исчезновением эффекта аномального термического упрочнения. Уменьшение эффекта аномального термического упрочнения трактуется как результат более интенсивного размножения дислокаций при высоких температурах.

В данной работе аналогичная серия ударно-волновых экспериментов выполнена для технически чистого титана ВТ1-0. В отличие от алюминия и меди пластическое деформирование титана сопряжено с интенсивным двойникованием [17], тем более интенсивным, чем выше скорость деформации. Упругопластические и прочностные свойства титана в условиях ударно-волнового нагружения исследовались в работах [8, 18–23], в том числе при повышенных температурах в [8, 19, 21]. Аномальное термическое упрочнение регистрировалось в высокочистом титане, имеющем в нормальных условиях низкий предел текучести, а для более твердых сплавов имеет место убывание динамического предела текучести с увеличением температуры, тем более быстрое, чем выше предел текучести сплава в нормальных условиях [3].

Для прояснения основных аспектов представляемой работы на рис. 2 представлен пример измеренного профиля импульса сжатия в титане в сопоставлении с волновым профилем, полученным в результате численного моделирования этого же эксперимента. Расчет проведен конечно-разностным методом в лагранжевых координатах с использованием модели идеального упругопластического тела (т. е. без учета упрочнения и релаксации напряжений) и в предположении неограниченной прочности материала на растяжение. Помимо расщепления волны сжатия на упругий предвестник и пластическую ударную волну оба волновых профиля демонст-

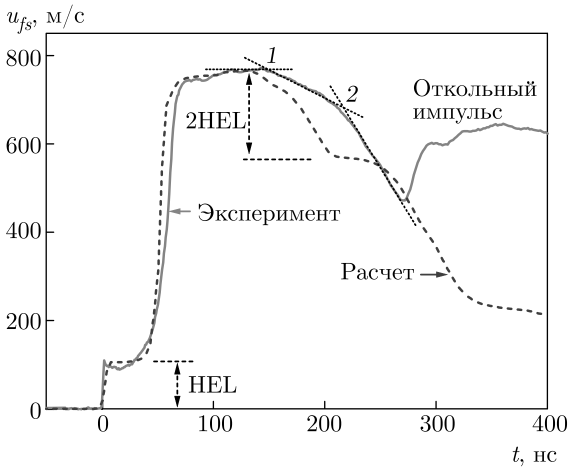


Рис. 2. Измеренный (сплошная линия) и рассчитанный (штриховая линия) профили скорости свободной поверхности титановой пластины толщиной 2.28 мм при ударе медной пластиной толщиной 0.46 мм со скоростью 645 м/с. Расчет в рамках модели идеального упругопластического тела

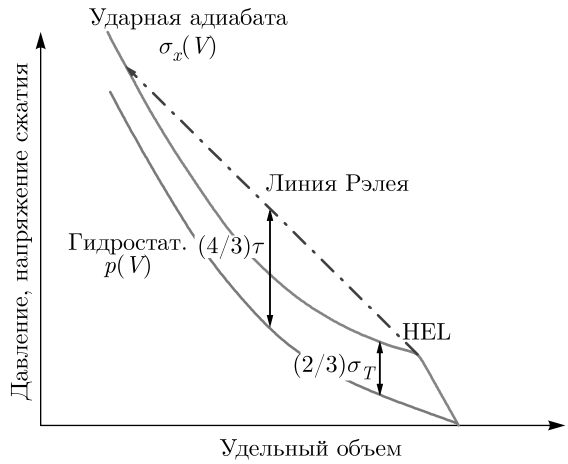


Рис. 3. К пояснению определения сдвиговых напряжений в ударной волне

рируют упругопластический характер волны разрежения. В модельном упругопластическом материале девиаторная компонента напряжения в упругой волне разрежения сначала уменьшается до нуля, а по мере дальнейшей разгрузки достигает значения 2/3 предела текучести с обратным знаком. В результате амплитуда упругой части волны разрежения равна удвоенному значению динамического предела упругости HEL. Определение предела текучести ударно-сжатого материала в таком случае не представляло бы затруднений. Скорость распространения возмущений в упругой части волны в упругопластическом материале равна продольной скорости звука $c_l = \sqrt{(K+4G/3)\rho}$, а после достижения предела текучести уменьшается до объемной скорости $c_b = \sqrt{K/\rho}$. Здесь K и G — соответственно модуль объемной упругости и модуль сдвига, ρ — плотность. Перегиб на начальном участке расчетной упругой волны разрежения связан с упругопластическими свойствами медного ударника. Второй подъем скорости на измеренном волновом профиле образовался в результате релаксации растягивающих напряжений при откольном разрушении внутри пластины, которое не учитывалось при расчете.

На измеренном волновом профиле четкого выделения в волне разрежения упругого предвестника конечной амплитуды не наблюдается. Вместо этого формируется так называемая квазиупругая волна разгрузки, в которой скорость распространения возмущения плавно уменьшается от c_l до c_b. В этом случае определение предела текучести ударно-сжатого материала уже не столь очевидно. В работах [7, 15, 16] предложен и реализован упрощенный способ оценки, который основан на приближении простой волны и включает аппроксимацию квазиупругой части волны прямой линией *1–2*, как показано на рис. 2, предположение о постоянстве коэффициента Пуассона и линейное соотношение между скоростью звука в лагранжевых координатах и массовой скоростью. Последнее следует из совпадения ударной адиабаты и римановой изэнтропы в координатах давление — массовая скорость.

Вторым источником информации является непосредственно пластическая ударная волна. Полная скорость деформации $\dot{\varepsilon}_x$ в стационарной ударной волне определяется из профиля скорости свободной поверхности $u_{fs}(t)$ как $\dot{\varepsilon}_x = \dot{u}_{fs}/2U_S$, где U_S — скорость ударной волны. Максимальная скорость сдвиговой деформации при одноосном сжатии $\dot{\gamma} = \dot{\varepsilon}_x/2$ есть сумма упругой компоненты $\dot{\gamma}_e = \dot{\tau}/2G$ и скорости пластической деформации сдвига $\dot{\gamma}_p$:

$$\dot{\gamma}_p = \frac{\dot{\varepsilon}_x}{2} - \frac{\dot{\tau}}{2G}. \qquad (1)$$

Определение сдвиговых напряжений в ударной волне иллюстрируется на рис. 3. В стационарной плоской волне изменение состояния вещества происходит вдоль линии Рэлея, представляющей собой прямую линию $\sigma_x = -\rho_0^2 U_S^2 (V - V_0)$, соединяющую состояния перед волной и за ней. Девиаторная компонента напряжения в волне представляет собой разность между напряжением σ_x на линии Рэлея и давлением p на ударной адиабате вещества при той же степени сжатия [24, 25]. При этом напряжение сдвига $\tau = (3/4)(\sigma_x - p)$ по мере сжатия проходит через максимум в некоторой промежуточной точке. В точке максимума $\dot{\tau} = 0$ и $\dot{\gamma}_p = \dot{\varepsilon}_x/2$. Сама ударная адиабата твердого тела отклоняется вверх от соответствующей кривой всестороннего сжатия на 2/3 предела текучести σ_T [26], как это показано на рис. 3.

2. МАТЕРИАЛ И ПОСТАНОВКА ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Образцы для экспериментов вырезались из прутка титана ВТ1-0 диаметром 40 мм. Согласно марочнику сталей и сплавов титан ВТ1-0 аналогичен титану Grade 2 США и содержит до 0.18 % Fe, до 0.07 % C, до 0.1 % Si, до 0.12 % O и до 0.3 % прочих примесей при содержании титана не менее 99.24 %. Поскольку измерения проводились при нормальной температуре и с предварительным нагревом, перед разделением на образцы заготовка подвергалась отжигу в вакууме при температуре 700 °C, которая достигалась в течение 70 мин, чтобы снять деформационное упрочнение и быть уверенными, что материал имеет одну и ту же структуру при комнатной и повышенных температурах. После выдержки в течение одного часа заготовки охлаждались вместе с печью. Отожженная заготовка разрезалась электроэрозионным способом на плоские дискообразные образцы толщиной 2.25 ± 0.06 мм. Твердость образцов после отжига по Роквеллу составляла 99.6 HRF. Перед проведением измерений поверхности образцов шлифовались, полировались и протравливались для удаления поверхностных дефектов и обеспечения необходимой отражательной способности. При обработке экспериментальных данных при комнатной температуре использовались ударная адиабата титана в виде U_S [км/с] $= 4.94 + 1.15u_p$, построенная для диапазона малых скоростей по данным работ [27,28], продольная скорость звука $c_l = 6.21$ км/с и плотность $\rho_0 = 4.53$ г/см^3. При температуре 600 °C использовались ударная адиабата $U_S = 4.71 + 1.15u_p$, плотность $\rho_0 = 4.49$ г/см^3 и продольная скорость звука $c_l = 5.68$ км/с. Высокотемпературные значения продольной и объемной (первый член в выражении для ударной адиабаты) скоростей звука взяты из работ [21,29]. Оценки показали, что возможные вариации коэффициента при массовой скорости не оказывают большого влияния на результаты обработки волновых профилей.

Ударно-волновые эксперименты проведены на пневматической ствольной установке — газовой пушке калибром 50 мм. Однократное ударное сжатие реализовывалось ударом медной пластины-ударника толщиной 0.465 ± 0.005 мм, разогнанной до скорости 345 ± 5 м/с или 645 ± 10 м/с. Соотношение толщин ударника и образца выбрано таким малым для того, чтобы параметры волны разрежения, регистрируемой на профиле скорости свободной поверхности, определялись свойствами образца, а вклад материала ударника был незначителен. Для того чтобы исключить прогиб ударника в процессе разгона, он наклеивался на диск из полиметилметакрилата толщиной 5 мм, располагаемый на торце метаемого пустотелого алюминиевого или магниевого цилиндрического снаряда.

Ступенчатое ударное сжатие проводилось с применением ударника, составленного из медной основы толщиной 5.5 мм и, со стороны образца, прокладки из алюминия толщиной 0.705 ± 0.015 мм. Ступенчатое ударное сжатие реализовывалось в результате многократных отражений ударной волны в прокладке между образцом и медной основой составного ударника. Толщина прокладки выбиралась такой, чтобы, с одной стороны, вторая волна не могла догнать первую на расстоянии, меньшем толщины образца, а с другой стороны, результат отражения первой волны сжатия от свободной поверхности не мог приводить к существенным искажениям второй волны. Скорость удара в этих опытах составляла 330 ± 10 м/с или 550 ± 10 м/с.

В опытах при высокой температуре использовались резистивные нагреватели, устанавливаемые у тыльной поверхности образца. Температура контролировалась двумя термопарами хромель–алюмель. В экспериментах регистрировалась скорость свободной тыльной поверхности образца как функция времени, $u_{fs}(t)$, в процессе выхода на поверхность волн сжатия. Измерения проводились с использованием лазерного доплеровского интерферометрического измерителя скорости VISAR [30] с наносекундным временным разрешением.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗМЕРЕНИЙ

На рис. 4, 5 представлены профили скорости свободной поверхности титановых образцов, измеренные в условиях однократного ударного сжатия при комнатной температуре и при 605–613 °C, а на рис. 6 и 7 — результаты опытов по ступенчатому ударному сжатию при нормальной и повышенной температурах.

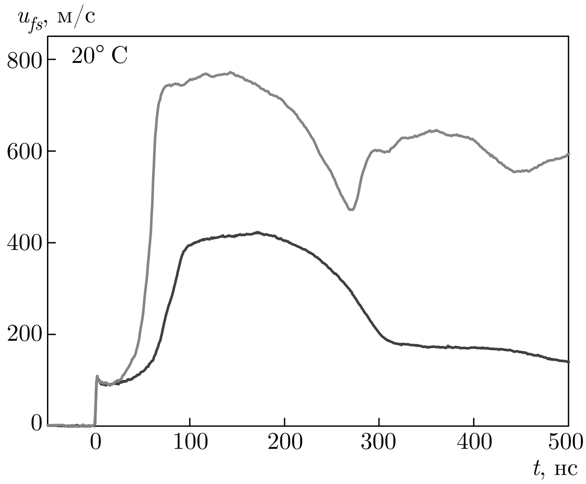


Рис. 4. Профили скорости свободной поверхности образцов титана ВТ1-0 толщиной 2.3 ± 0.02 мм после удара медной пластиной 0.467 ± 0.004 мм со скоростью 345 м/с (нижняя кривая) и 645 м/с (верхняя кривая)

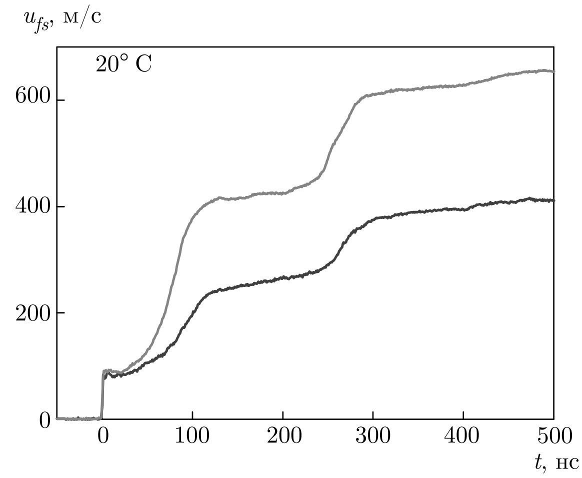


Рис. 6. Результаты измерений профилей скорости свободной поверхности титановых пластин при ступенчатом ударном сжатии в опытах при комнатной температуре

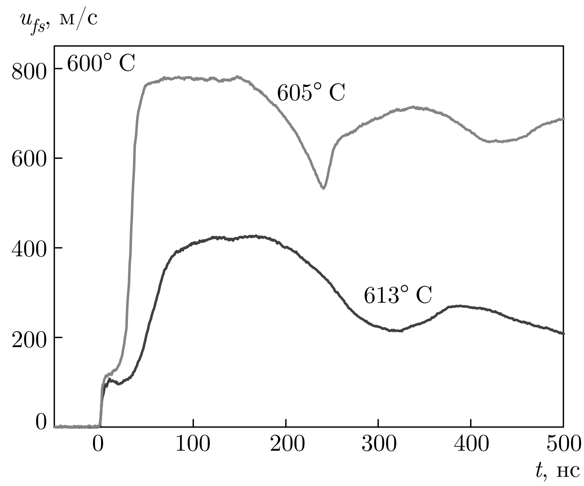


Рис. 5. Результаты опытов с однократным ударным сжатием титана ВТ1-0 при температуре $609 \pm 4\,^\circ$C

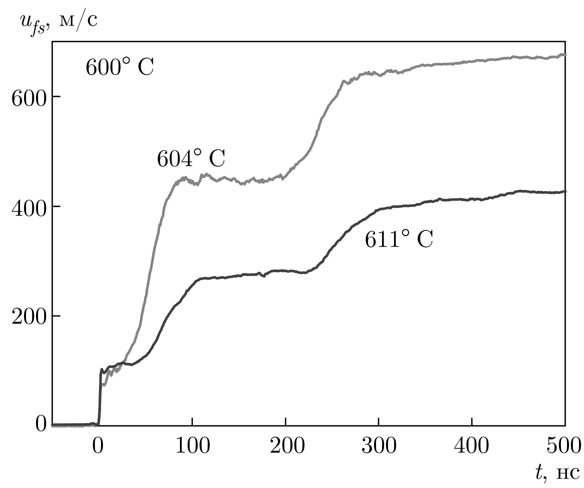


Рис. 7. Результаты экспериментов со ступенчатым ударным сжатием при температуре 604–611 °C

При непосредственном сопоставлении волновых профилей каких-либо явных отличий в них в зависимости от температуры не видно. С увеличением температуры несколько уменьшился временной интервал между упругой и пластической волнами как результат уменьшения разности между продольной и объемной скоростями звука. Несколько уменьшилась также величина откольной прочности, которая пропорциональна декременту скорости перед выходом на поверхность откольного импульса [5]. Амплитуда и форма упругого предвестника изменились незначительно. Скорость поверхности в упругом предвестнике u_{HEL} при комнатной температуре составляет 90–92 м/с. На фронтальном пике она достигает 108 м/с, но этот пик не вполне воспроизводим и в расчет не принимался. Соответственно, динамический предел упругости $\sigma_{HEL} = \rho_0 c_l u_{HEL}/2$ при комнатной температуре равен 1.28 ГПа, а динамический предел текучести $\sigma_T = (3/2)\sigma_{HEL}(1 - c_b^2/c_l^2) = 0.7$ ГПа. При температуре в районе 600 °C $u_{HEL} = 106 \pm 5$ м/с, $\sigma_{HEL} = 1.35 \pm 0.06$ ГПа, $\sigma_T = 0.65 \pm 0.03$ ГПа. Иными словами, динамический предел текучести в этом температурном диапазоне остается неизменным.

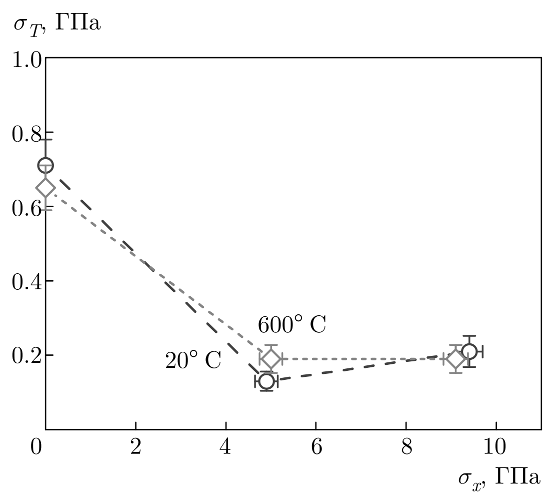


Рис. 8. Результаты оценки предела текучести титана в упругом предвестнике и в ударно-сжатом состоянии при нормальной (кружки) и повышенной (ромбы) температурах

4. РЕЗУЛЬТАТЫ АНАЛИЗА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

На рис. 8 значения пределов текучести в упругом предвестнике сопоставлены со значениями напряжения пластического течения в волне разгрузки, полученными из анализа ее квазиупругой части. Разность величин сдвиговых напряжений, соответствующих значениям массовой скорости на фронте квазиупругой волны разгрузки, u_{p1} (точка 1 на рис. 2), и в ее конце, u_{p2} (точка *2*), в приближении простой волны описывается соотношением [31]

$$\tau(u_{p1}) - \tau(u_{p2}) = \frac{3}{4}\rho_0 \int\limits_{u_{p2}}^{u_{p1}} \left[a^2(u_p) - a_b^2(u_p)\right] \frac{du_p}{a(u_p)}. \quad (2)$$

Здесь ρ_0 — плотность вещества в исходном состоянии при нулевом давлении, скорость распространения возмущений в квазиупругой волне a берется в координатах Лагранжа (т. е. отнесена к начальной плотности материала ρ_0), a_b — объемная скорость звука также в координатах Лагранжа. Так как при разгрузке из ударно-сжатого состояния сдвиговое напряжение переходит через нуль и выходит на напряжение пластического течения с обратным знаком, соотношение (2) фактически определяет предел текучести ударно-сжатого материала.

В описываемых простых оценках зависимости $a_b(u_p)$ и $a(u_p)$ представлены линейными соотношениями [5, 32]:

$$a_b = c_0 + 2bu_p, \quad a = c_e + 2b_e u_p, \quad (3)$$

где c_0, b — коэффициенты линейного выражения для ударной адиабаты, связывающего скорость ударной волны U_S и массовую скорость: $U_S = c_0 + bu_p$; c_e, b_e — коэффициенты линейной аппроксимации зависимости лагранжевой скорости возмущений в квазиупругой волне разгрузки, уменьшающейся от продольной скорости звука на фронте в точке *1* до объемной скорости звука в конце в точке *2*. При таких допущениях соотношение (2) принимает вид

$$\tau(u_{p1}) - \tau(u_{p2}) = \frac{3}{4}\rho_0 \int\limits_{u_{p2}}^{u_{p1}} \frac{(c_x + 2b_x u_p)^2 - (c_0 + 2bu_p)^2}{c_x + 2b_x u_p}\, du_p. \quad (4)$$

Скорость фронта волны разрежения, равная продольной скорости звука в координатах Лагранжа, a_l, определялась в предположении постоянства коэффициента Пуассона как $a_l(u_{p1}) = a_b(u_{p1})c_l/c_0$ [5, 32].

Результаты оценок, приведенные на рис. 8, демонстрируют значительное уменьшение предела текучести за ударной волной в титане. Впрочем, из сопоставления волновых профилей на рис. 2 и без дополнительного анализа видно, что изменение девиаторной компоненты напряжения при разгрузке из ударно-сжатого состояния намного меньше, чем в случае неизменного предела текучести. Различие между напряжениями пластического течения титана при нормальной и повышенной температурах после ударного сжатия остается незначительным.

На рис. 9 суммированы результаты оценки скорости сжатия в пластической ударной волне в зависимости от нормального напряжения сжатия за ударной волной при нормальной и повышенной температурах. На график нанесены результаты данной работы, полученные в опытах с однократным и ступенчатым ударным сжатием образцов толщиной 2.3 мм, а также данные предыдущих [33] измерений на образцах толщиной 4 мм. Из данных опытов со ступенчатым ударным сжатием взяты параметры только первой пластической ударной волны. Все точки на графике, за исключением одной нижней, в пределах погрешности соответствуют полученной ранее [33] единой зависимости

$$\dot{\varepsilon}_x = -dV/dt = 2700(\sigma_{shock}/\sigma_0)^{3.43}\ \text{с}^{-1}. \quad (5)$$

Отклонение нижней точки от общей зависимости означает, что расстояние в 2.3 мм недостаточно для установления стационарности пластической

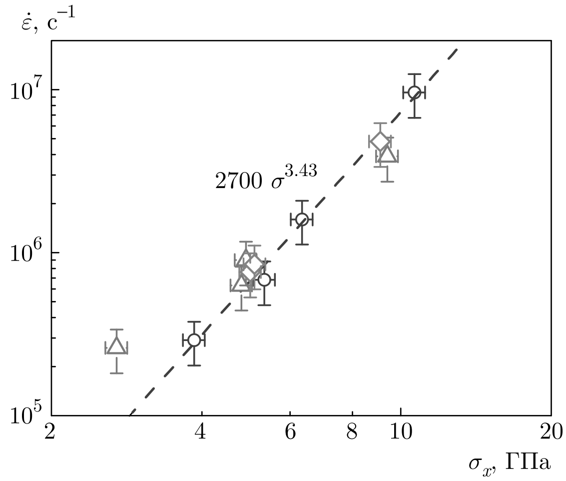


Рис. 9. Зависимость скорости сжатия титана в пластической ударной волне от конечного напряжения сжатия за волной. Кружки — данные работы [5], полученные на образцах толщиной 4 мм; треугольники — результаты данных измерений при комнатной температуре, ромбы — результаты обсуждаемых измерений при 600 °C

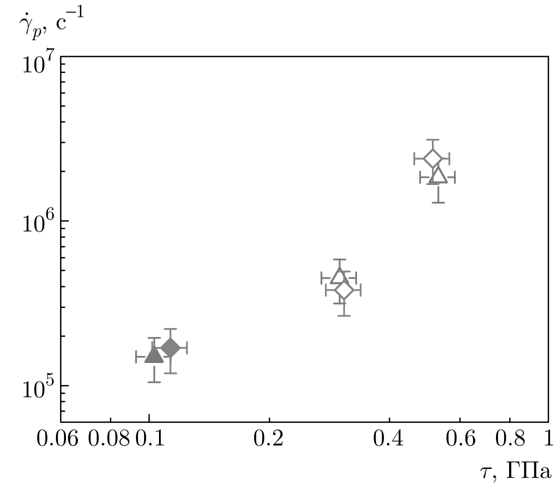


Рис. 10. Результаты оценки соотношения между скоростью пластического сдвига и величиной сдвигового напряжения в ударной волне в титане при 20 °C (зеленые треугольники) и 600 °C (красные ромбы). Светлыми символами показаны параметры в первой пластической ударной волне однократного или ступенчатого сжатия, закрашенными — параметры во второй пластической ударной волне ступенчатого сжатия

ударной волны. Отметим еще раз, что высокотемпературные точки на рис. 9 лежат на общей зависимости.

Для физической интерпретации и дальнейшего использования результатов измерений сжатия вещества в ударных волнах необходимо их представить в виде зависимостей скорости пластического сдвига от величины сдвигового напряжения. Соответствующий способ интерпретации волновых профилей пояснен во Введении и на рис. 3. Для ударной адиабаты в виде $U_S = c_0 + bu$ величина отклонения линии Рэлея, описывающей изменение состояния в стационарной ударной волне, от ударной адиабаты без учета предела текучести выражается как

$$\rho_0 U_S^2 \left(1 - \frac{V}{V_0}\right) - p = \rho_0 U_S^2 \varepsilon_x - \frac{\rho_0 c_0^2 \varepsilon_x}{(1 - b\varepsilon_x)^2}. \qquad (6)$$

В данной работе величина напряжения сдвига, соответствующая максимальной скорости сжатия, оценивалась как его значение в точке максимального отклонения линии Рэлея от «гидростатической» (без учета вклада девиаторных компонент напряжения) ударной адиабаты τ_{max} плюс средняя величина сдвигового напряжения перед волной и за ней. Сдвиговое напряжение перед волной определено по значению напряжения сжатия в упругом предвестнике, сдвиговое напряжение за волной определено как 1/2 величины предела текучести, полученной из анализа квазиупругой разгрузки. При максимальном отклонении скорость пластической деформации сдвига определяется как $\dot{\gamma}_p = \dot{\varepsilon}_x/2$.

Найденные таким образом значения скорости пластической деформации и напряжения сдвига в средней части ударной волны суммированы на рис. 10. Анализ ступенчатого ударного сжатия проведен на основе предположения о совпадении (или зеркальной симметрии) ударных адиабат для падающих и отраженных волн в координатах давление–массовая скорость [5, 7]. Точки, описывающие состояния во второй волне на рис. 10, соответствуют опытам при скорости удара 550 ± 10 м/с. При меньшей скорости ударная волна в проведенных экспериментах явно не достигала стационарности, что следует, в частности, из графика на рис. 9.

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ

Предел текучести титана ВТ1-0 в стандартных условиях составляет примерно 380 МПа и возрастает до 530 МПа при увеличении скорости деформации до 10^3 c^{-1} [34]. Согласно данным предыдущих измерений [23] скорость пластической деформации титана в упругом предвестнике на расстоянии 2.3 мм составляет примерно 10^4 c^{-1}, т. е. полученное значение динамического предела текучести при комнатной температуре $\sigma_T = 710$ МПа вполне согласуется с имеющимися данными. С увеличением температуры до 600 °C предел текучести титана ВТ1-0 при низкоскоростной деформации уменьшается более чем втрое — до 120 МПа, в то время как по результатам обсуждаемых измерений его уменьшение в субмикросекундном диапазоне длительностей нагрузки не выходит за пределы погрешности измерений. Иными словами, аномальная зависимость напряжения высокоскоростного пластического течения от температуры для титана имеет место.

Неожиданным оказалось резкое уменьшение предела текучести непосредственно за ударной волной. Это следует из анализа квазиупругой разгрузки, но видно также непосредственно из сопоставления волновых профилей на рис. 2. При этом высокотемпературный предел текучести ударно-сжатого титана, найденный равным 190 МПа, все же значительно превышает его значение при низкоскоростной деформации (примерно 120 МПа). В аналогичных опытах с алюминием [16] и медью [7] при комнатной температуре получено монотонное возрастание предела текучести ударно-сжатого материала с увеличением давления ударного сжатия. Можно было бы связать уменьшение предела текучести с эффектом Баушингера, но, судя по данным испытаний титана при циклических нагрузках [35], а также по результатам оценки вклада предварительного ударно-волнового упрочнения [20], эффект Баушингера не должен быть столь значительным.

С учетом низкой теплопроводности титана и склонности более твердых титановых сплавов к локализации деформации в полосах адиабатического сдвига полученные здесь результаты дают основание вернуться к обсуждавшимся ранее [36] гетерогенным механизмам пластичности металлов с образованием локальных микросдвигов, в которых материал в адиабатических условиях высокоскоростной деформации разогревается вплоть до плавления. Такой механизм пластичности позволил бы также объяснить и практическое отсутствие влияния температуры на напряжение пластического течения в ударных волнах, демонстрируемое данными на рис. 10. Однако металлографический анализ образцов титана после высокоскоростной деформации [17] и после ударно-волнового воздействия [18, 22] не выявил признаков локального плавления в полосах сдвига, но продемонстрировал интенсивное двойникование в этих условиях. Поскольку двойникование в титане может до некоторой степени быть обратимым [37], можно предположить, что образовавшиеся двойники обеспечивают подвижность структуры материала в той же мере, что и прослойки расплава. Отметим, что обратимое двойникование непосредственно в процессе ударного сжатия и последующей разгрузки наблюдалось в экспериментах с магнием [38], также имеющим гексагональную плотноупакованную кристаллическую структуру.

Интенсивность двойникования тем выше, чем выше скорость деформации [17] и, следовательно, больше величина действующих напряжений, что, очевидно, объясняется наличием некоего порогового напряжения, необходимого для инициирования двойникования. С точки зрения механики твердого тела двойник подобен трещине второго типа — трещине сдвига. Это означает, что концентрация напряжений в кончике двойника, вызывающих его рост, тем выше, чем больше длина двойника. Иными словами, для того, чтобы началась пластическая деформация путем двойникования, требуется гораздо большее напряжение, чем для ее продолжения — по крайней мере на начальном этапе, пока взаимодействие двойников не стало препятствовать их росту. В проведенных экспериментах деформация сжатия не превышала 7.2 %. Релаксация напряжений по мере роста двойников может быть одной из причин формирования пика на фронте упругого предвестника в титане.

Таким образом, впервые получены экспериментальные данные о напряжении пластического течения титана в процессе ударного сжатия со скоростью до 10^7 с$^{-1}$ и при разгрузке из ударно-сжатого состояния. В противоположность данным для металлов со структурой ГЦК обнаружено уменьшение предела текучести титана за ударной волной. Наиболее вероятным объяснением уменьшения предела текучести представляется уменьшение напряжения пластического течения по мере роста двойников и их обратимость.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-02-00416А). Эксперименты проведены с использованием оборудования Московского регионального взрывного центра коллективного пользования Российской академии наук.

ЛИТЕРАТУРА

1. G. I. Kanel, S. V. Razorenov, K. Baumung et al., J. Appl. Phys. **90**, 136 (2001).

2. G. I. Kanel, S. V. Razorenov, and V. E. Fortov, J. Phys.: Condens. Matter **14**, S10076 (2004).

3. Г. И. Канель, В. Е. Фортов, С. В. Разоренов, УФН **177**, 809 (2007).

4. Г. И. Канель, Е. Б. Зарецкий, С. В. Разоренов и др., УФН **187**, 525 (2017).

5. Г. И. Канель, *Ударные волны в физике твердого тела*, Физматлит, Москва (2018).

6. Г. И. Канель, Г. В. Гаркушин, А. С. Савиных и др., ЖТФ **90**, 441 (2020).

7. G. I. Kanel, A. S. Savinykh, G. V. Garkushin et al., J. Appl. Phys. **128**, 115901 (2020).

8. G. I. Kanel, S. V. Razorenov, and G. V. Garkushin, J. Appl. Phys. **119**, 185903 (2016).

9. M. A. Meyers, D. J. Benson, O. Vohringer et al., Mater. Sci. Eng. A **322**, 194 (2002).

10. T. V. Popova, A. E. Mayer, K. V. Khishchenko et al., J. Appl. Phys. **123**, 235902 (2018).

11. R. A. Austin, J. Appl. Phys. **123**, 035103 (2018).

12. B. Gurrutxaga-Lerma, J. Verschueren, A. P. Sutton et al., Int. Mater. Rev., 1743 (2020), DOI: 10.1080/09506608.2020.1749781.

13. Songlin Yao, Xiaoyang Pei, Zhanli Liu et al., Mechanics Mater. **140**, 103211 (2020).

14. G. I. Kanel, A. S. Savinykh, G. V. Garkushin et al., J. Appl. Phys. **126**, 075901 (2019).

15. Г. И. Канель, А. С. Савиных, Докл. РАН. Физика, технич. науки **490**, 29 (2020).

16. G. I. Kanel, A. S. Savinykh, G. V. Garkushin et al., J. Appl. Phys. **127**, 035901 (2020).

17. D. R. Chichili, K. T. Ramesh, and K. J. Hemker, Acta Mater. **46**, 1025 (1998).

18. B. Herrmann, A. Venkert, G. Kimmel et al., AIP Conf. Proc. **620**, 623 (2002).

19. Г. И. Канель, С. В. Разоренов, Е. Б. Зарецкий и др., ФТТ **45**, 625 (2003).

20. С. В. Разоренов, А. С. Савиных, Е. Б. Зарецкий и др., ФТТ **47**, 639 (2005).

21. E. B. Zaretsky, J. Appl. Phys. **104**, 123505 (2008).

22. R. L. Whelchel, D. S. Mehoke, K. A. Iyer et al., J. Appl. Phys. **119**, 115901 (2016).

23. Г. И. Канель, Г. В. Гаркушин, А. С. Савиных и др., ЖЭТФ **154**, 392 (2018).

24. J. W. Swegle and D. E. Grady, J. Appl. Phys. **58**, 692 (1985).

25. G. R. Cowan, Trans. Metal. Soc. AIME **233**, 1120 (1965).

26. G .R. Fowles, J. Appl. Phys. **32**, 1475 (1961).

27. J. M. Walsh, M. H. Rice, R. G. Mcqueen et al., Phys. Rev. **108**, 196 (1957).

28. *LASL Shock Hugoniot Data*, ed. by S. P. Marsh, Univ. California Press, Berkeley (1980).

29. H. Ogi, S. Kai, H. Ledbetter et al., Acta Mater. **52**, 2075 (2004).

30. L. M. Barker and R. E. Hollenbach, J. Appl. Phys. **43**, 4669 (1972).

31. J. L. Brown, C. S. Alexander, J. R. Asay et al., J. Appl. Phys. **114**, 223518 (2013).

32. А. А. Воробьев, А. Н. Дремин, Г. И. Канель, ПМТФ **5**, 94 (1974).

33. Г. И. Канель, С. В. Разоренов, Г. В. Гаркушин и др., ФТТ **58**, 1153 (2016).

34. J. M. Yuan and V. P. W. Shim, Int. J. Sol. Struct. **39**, 213 (2002).

35. S. Sinha and N. P. Gurao, Mater. Sci. Eng. A **691**, 100 (2017).

36. D. E. Grady and J. R. Asay, J. Appl. Phys. **53**, 7350 (1982).

37. T. Hama, H. Nagao, A. Kobuki et al., Mater. Sci. Eng. A **620**, 390 (2014).

38. C. L. Williams, C. Kale, S. A. Turnage et al., Phys. Rev. Mater. **4**, 083603 (2020).

ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 3, стр. 533–540

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЦЕПНОГО ИЗОТЕРМИЧЕСКОГО ПЛАМЕНИ В СЛУЧАЙНОЙ СРЕДЕ

С. Н. Медведев [a*], *В. И. Оселедец* [a,b**], *В. С. Посвянский* [a]

[a] *Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук 119991, Москва, Россия*

[b] *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова 119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 8 ноября 2020 г.,
после переработки 17 ноября 2020 г.
Принята к публикации 18 ноября 2020 г.

Исследованы зависимости турбулентной скорости пламени в случайном потоке от турбулентной интенсивности в рамках модели нелинейности Колмогорова – Петровского – Пискунова в одномерном случае. В работе показано, что для статической случайной среды турбулентная скорость убывает и стремится к нулю с ростом турбулентной интенсивности. Это объясняется тем, что скорость случайного потока является градиентом случайного потенциала, что приводит к ловушкам и замедлению диффузии. Видимо, это общий факт: случайное градиентное поле скоростей в двумерном и трехмерном случаях должно давать тот же эффект. Возможно, что это верно не только для нелинейности Колмогорова – Петровского – Пискунова. Аналитически показано, что введение случайного поля скоростей ненулевого среднего значения, ускоряющего движение пламени, позволяет пламени легче преодолевать барьеры. Для динамической среды в некоторых областях масштабов по пространству и времени возможен начальный рост скорости при росте турбулентности. Рассмотрен пример двумерного случайного бездивергентного поля, для которого численный счет показал рост турбулентной скорости пламени.

DOI: 10.31857/S0044451021030135

1. ВВЕДЕНИЕ

Бегущие волны появляются в различных приложениях, таких как химическая кинетика, горение, биология, процессы переноса в пористых средах. Все они могут возникать как решения нелинейных уравнений в частных производных. Важная задача — учет случайной среды и ее влияния на характеристики бегущих волн, в частности, на зависимость скорости волны от статистики случайной среды.

При численных расчетах турбулентного горения часто используется метод «синтетической» турбулентности, когда турбулентное поле скоростей моделируется, например, гауссовым однородным случайным полем и добавлением в уравнения реакция–диффузия членов первого порядка со случайными коэффициентами, что отвечает конвективному переносу потоком со случайной скоростью. Тогда скорость турбулентного пламени зависит от статистики этого случайного поля. Одна из важных задач теории турбулентного горения — выяснить, как турбулентная скорость горения зависит от статистики турбулентного конвективного потока. Отметим, что в обзоре [1] по турбулентному горению предварительно перемешанных смесей рассмотрены в том числе нерешенные фундаментальные задачи, имеющие практический интерес. В этом обзоре говорится о необходимости изучения идеализированных моделей, для того чтобы уточнить теорию и, возможно, добиться лучшего согласия с экспериментами.

Мы будем изучать такую зависимость в рамках одномерной модели с нелинейностью Колмогорова – Петровского – Пискунова (КПП) из их знаменитой работы [2], поскольку в этом случае есть строгие результаты и эффективный вариационный принцип для вычисления турбулентной скорости горения.

Краткий обзор строгих результатов

В одномерном случае уравнение реакция–диффузия, которое возникает в теории горения, имеет вид

* E-mail: medvsn@gmail.com
** E-mail: oseled@gmail.com

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u), \tag{1}$$

где u — относительная концентрация, k — безразмерный коэффициент диффузии. Здесь и далее по тексту все уравнения записаны в безразмерном виде. Так, если $f(u) = u(1-u)$, что соответствует кинетической реакции второго порядка, то уравнение (1) описывает процесс распространения цепного изотермического пламени [3].

Это уравнение впервые было выписано Фишером [4] в 1937 г. независимо от Колмогорова, Петровского, Пискунова [2]. Фишер изучал распространение мутантного гена в популяции. Он исследовал стационарную задачу и провел тот же анализ, что и в работе [2]. В работе [2] изначально рассматривалась двумерная и одномерная постановки задачи. Пример из работы [2],

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u(1-u)^2, \tag{2}$$

имеет биологическую трактовку и отвечает распространению доминантного гена в популяции. Также это уравнение может быть представлено для описания распространения цепного изотермического пламени. Для этих примеров нелинейность $f(u)$ удовлетворяет условиям КПП [2]:

$$\begin{gathered} f(0) = f(1) = 0, \quad f(u) > 0, \quad 0 < u < 1, \\ \max_{0\le u\le 1} f'(u) = f'(0)\ . \end{gathered} \tag{3}$$

Сейчас такую нелинейность называют КПП-нелинейностью.

В работе [2] было доказано, что при $c \ge 2\sqrt{kf'(0)}$ и КПП-нелинейности уравнение (1) имеет решение в виде бегущей волны $u(t,x) = g(x+ct)$. Для случая

$$\begin{aligned} &u(0,x) = 1, \quad x \ge 0, \\ &u(0,x) = 0, \quad x < 0 \end{aligned} \tag{3$'$}$$

в работе [2] было доказано, что такое решение $u(t,x)$ при больших t сближается с решением вида $g(x + c_{min}t)$, где $c_{min} = 2\sqrt{kf'(0)}$. Величина c_{min} и есть «истинная», или ламинарная скорость пламени, если думать о нелинейности $f(u)$ как о скорости химической реакции.

При учете синтетической турбулентности вида $\delta v(t,x)$ уравнение (1) заменяется на уравнение

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \delta v(t,x)\frac{\partial u}{\partial x} + f(u) \tag{4}$$

с начальным условием (3$'$). Здесь $v(t,x)$ — случайное поле, а δ — ненулевой параметр. В этом случае скорость распространения фронта будет зависеть от параметра δ. Турбулентная скорость по определению равна

$$c^*(\delta) = \lim_{t\to\infty}\frac{E|x(t)|}{t}, \quad u(t,x(t)) = \frac{1}{2}, \tag{5}$$

где $x(t)$ — положение фронта, E — математическое ожидание, т. е. усреднение по реализациям поля v.

Мы предположили, что $v(t,x)$ — однородное эргодическое поле и $v(t,-x)$ имеет то же распределение в пространстве реализаций, что и $v(t,x)$. Это условие отвечает изотропной турбулентности.

Предложенное определение годится для более общих нелинейностей, а не только для КПП-случая. Случай $v(t,x) = v(x)$ рассматривался в работе Нолина и Ксина [5]. В этой работе сформулирован вариационный принцип для вычисления турбулентной скорости для КПП-нелинейности. Нолен и Ксин использовали вероятностный подход Фрейдлина [6]. Они дали другое определение турбулентной скорости. Можно показать, что в нашем случае оба определения совпадают.

Если $X(t)$ — диффузионный процесс с производящим оператором

$$k\frac{\partial^2}{\partial x^2} + v(x)\frac{\partial}{\partial x}$$

и T_1 — время первого достижения значения 1 процессом $X(t)$, $X(0) = 0$, то определим функцию

$$\mu(\lambda) = -E_v\left[\ln E_X[\exp(-\lambda T_1)]\right]\ , \tag{6}$$

где E_X — усреднение, связанное с процессом $X(t)$ при фиксированной реализации поля $v(x)$, а E_v — усреднение по реализациям поля $v(x)$.

Выпишем вариационный принцип для турбулентной скорости:

$$c^*(\delta) = \min_{\lambda>0}\frac{\lambda + f'(0)}{\mu(\lambda)}\ . \tag{7}$$

В эту формулу нелинейность входит только через $f'(0)$. Это уникальное свойство КПП-нелинейности.

Нолен и Ксин [5] доказали вариационный принцип при довольно слабых условиях для $v(x)$. Но не все эти условия выполняются для случая, когда $v(x)$ — процесс Орнштейна – Уленбека (ОУ). Именно для него был проведен наш численный счет.

Автокорреляционная функция ОУ равна

$$K(x) = e^{-\theta|x|},$$

где $1/\theta$ — пространственный масштаб корреляции. Можно показать, что вариационный принцип верен и для процесса ОУ. В работе [5] дана оценка скорости для больших δ:

$$0 < \frac{A}{\delta} \le c^*(\delta) \le \frac{1}{\delta^\rho}, \quad 0 < \rho < 1\ , \tag{8}$$

где A — положительная константа, ρ — любое. Из выражения (8) следует, что $c^*(\delta) \to 0$ с ростом турбулентной интенсивности δ. Без сомнения эти оценки верны и для процесса ОУ.

Мы рассмотрели также случай, когда $v(x) = -W'(x)$ — белый гауссов шум, $W(x)$ — стандартный винеровский процесс. Тут возникает задача о диффузионном процессе с производящим оператором L, отвечающим линейному оператору из правой части уравнения реакция–диффузия. Оператор L в форме Феллера [7] записывается в следующем виде:

$$Lu = k \exp\left[\left(\frac{\delta}{k}W\right)\frac{d}{dx}\exp\left(-\frac{\delta}{k}W\right)\frac{d}{dx}\right] u. \qquad (9)$$

В этой ситуации диффузионный процесс строится как диффузия в броуновском потенциале, и функцию $\mu(\lambda)$ можно вычислить явно, используя лемму японского математика Котани (см., например, работу [8]). В итоге получается почти явная формула для случая броуновского потенциала:

$$c^*(\delta) = \min_{x>0}\left(kx + \frac{f'(0)}{x}\right)\frac{K_0\left(4x/\overline{\delta}^2\right)}{K_1\left(4x/\overline{\delta}^2\right)}\ , \qquad (10)$$

где $\overline{\delta} = \delta/k$, K_i — модифицированная функция Бесселя индекса i. Численный счет показал хорошее согласие с этой формулой.

При введении постоянного смещения $ka/2$ в конвективной составляющей, т. е. при замене белого шума $\delta v(x)$ на $\delta v(x) + ka/2$, формула для турбулентной скорости приобретет вид

$$c^*(\delta) = \min_{x>0}\left(kx + \frac{f'(0)}{x}\right)\frac{K_\nu\left(4x/\overline{\delta}^2\right)}{K_{1-\nu}\left(4x/\overline{\delta}^2\right)}\ , \qquad (11)$$

где $\nu = a/\overline{\delta}^2$, K_ν — модифицированная функция Бесселя индекса ν. Для фиксированного значения $\nu = q$ турбулентная скорость не зависит от δ при $q = 0.5$ и равна ламинарной, а при $q > 0.5$ турбулентная скорость растет с ростом δ и убывает при $q < 0.5$. Заметим, что к пульсационной скорости $\delta v(x)$ здесь добавлена средняя скорость $ka/2 = q\delta^2/2k$, которая быстро растет с ростом δ, что позволяет пламени быстрее преодолевать броуновские ловушки.

Мы рассмотрели также случай динамического поля ОУ, т. е. однородного гауссова поля $v(t,x)$ со средним значением $E[v(t,x)] = 0$ и ковариационной функцией $(4/\tau\theta)\exp(-\tau|t| - \theta|x|)$, где $1/\tau$ — временной масштаб корреляции.

Можно показать, что при ограничении поля ОУ на решетку, оно удовлетворяет регрессионному соотношению поля Хабиби [9], которое используется при обработке изображений.

Обнаружены три типа поведения скорости $c^*(\delta)$: убывающее (как в статике); возрастающее, а затем убывающее; возрастающее. Возможен ли здесь рост до бесконечности осталось невыясненным. В работе [10] рассматривали одномерную модель турбулентного высокотемпературного горения, распространяющегося в динамическом поле синтетической турбулентности. В работе получено ускорение пламени с ростом интенсивности турбулентности.

Уменьшение скорости пламени в статическом одномерном случае связано с тем, что поле скорости — градиентное поле, и большое значение δ дает более глубокие ловушки. Такая картина должна иметь место и в многомерном случае для градиентных полей. Это предположение подтверждает наш численный счет для двумерного поля $\nabla\Psi(x,y)$, где $\Psi(x,y)$ — скалярное двумерное поле ОУ.

Нами было рассмотрено поле вида $(-\partial\Psi/\partial y, \partial\Psi/\partial x)$ с нулевой дивергенцией по скорости. В двумерном поле синтетической турбулентности счет показал рост турбулентной скорости. Такая постановка задачи вызывает большой физический интерес, так как дополнительное условие бездивергентного поля определяет выполнение уравнения неразрывности в несжимаемых средах. Этот пример приведен для КПП-нелинейности, но скорее всего будет верен и для других нелинейностей. Главным критерием является бездивергентное поле. Этот аспект заслуживает дальнейших исследований. В работах, например [11, 12], рассмотрены двумерные постановки распространения турбулентного пламени в водородно-воздушных и метано-воздушных смесях с учетом детальной химической кинетики в поле «синтетической» турбулентности и получено качественное согласие с экспериментальными данными.

2. ОРГАНИЗАЦИЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Все расчеты проводились только для случая $f(u) = u(1-u)$. Для численного решения системы уравнений использовали программный пакет OpenFOAM (ver. 6) [13]. Рассматривалась эйлерова система с равномерной сеткой. Система записана в неявном виде, источниковые члены линеаризованы. Расчетная область определена пространством $[0, L_x]$. Начальные условия имеют вид

$$u(0,x) = \begin{cases} 1, & L_x - L^* < x \le L_x, \\ 0, & 0 \le x \le L_x - L^*, \end{cases} \tag{12}$$

где L^* — положение фронта пламени в начальный момент. Согласно постановке задачи, пламя движется «налево». Граничные условия:

$$u(0) = 0, \quad \frac{\partial u(L_x)}{\partial x} = 0\ . \tag{13}$$

Расчеты проведены для размера ячейки $\Delta x = 0.125$ или $\Delta x = 0.25$ в соответствии со сходимостью задачи. Численные схемы определены вторым порядком точности по времени и пространству. Шаг по времени подбирался в соответствии с условием Куранта для диффузионного и конвективного членов. Для всех значений параметров проводили от 50 до 100 реализаций в зависимости от разброса результатов.

Роль ловушек (барьеров) хорошо видна на рис. 1. На этом рисунке представлено движение фронта $x(t)$ для уравнения (4) в области $x \in [0, 2000]$. При этом $v(t,x) = 0$ всюду, а на отрезке $x \in [1000, 1100]$ заданы значения $v(x) = -1$, $\delta = \delta_b$. Значения δ_b выбирали от 0 до 5. Волна движется справа налево. Сначала фронт движется со скоростью $c^* = -2$, но как только фронт достигает точки $x = 1100$, волна встречает барьер и фронт останавливается (попадает в ловушку). В случае, когда скорость потока в ловушке $|\delta_b v(x)| < 2$, фронт продолжает движение с меньшей скоростью, а если $|\delta_b v(x)| \ge 2$, то фронт некоторое время стоит на месте, а затем, благодаря диффузии и КПП-нелинейности, возобновляет движение. При этом волна, как бы наверстывая упущенное, начинает двигаться с большей скоростью, а затем снова выходит на величину $c^* = -2$.

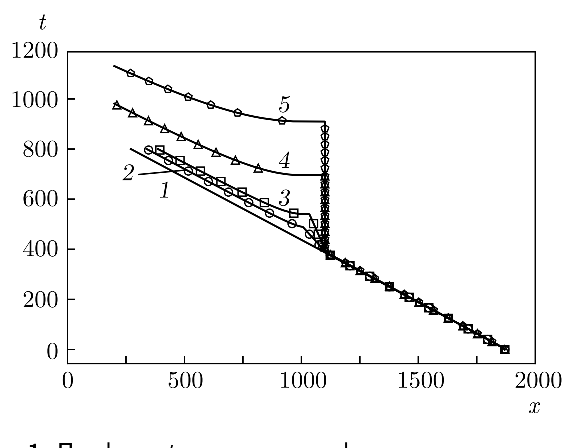


Рис. 1. Профили t–x положения фронта пламени в зависимости от времени при расчете области $x \in [0, 2000]$. В расчетной области определен один скачок скорости $v(x)$ шириной 100 (на отрезке $[1000, 1100]$) и величиной δ_b. Во всем остальном поле x скорость $\delta v(x) = 0$. Представлены кривые: *1* — $\delta_b = 0$; *2* — $\delta_b = 1$; *3* — $\delta_b = 1.5$; *4* — $\delta_b = 3$; *5* — $\delta_b = 5$

Стохастическая форма уравнения КПП в форме Феллера

Начальная форма уравнения КПП (4) со стохастической частью в конвективном члене может быть заменена на форму без конвективной составляющей [7]:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k \exp\left(\frac{\delta}{k} W\right) \frac{\partial}{\partial x} \left[\exp\left(-\frac{\delta}{k} W\right) \frac{\partial u}{\partial x}\right] + f(u). \tag{14}$$

Представленная форма записи является аналогом первоначального уравнения с различием в знаке в конвективном члене. Белый шум выражается производной винеровского процесса, который описывается уравнением

$$W(x) = -\int\limits_0^x v(\xi)\, d\xi\ . \tag{15}$$

При генерации случайного поля задаем поле по следующему алгоритму:

$$W_i = W_{i-1} + dW_i, \quad dW \in N(0, \Delta x)\ , \tag{16}$$

где dW — гауссова случайная величина с параметрами 0 и Δx, а первый элемент равен $W_0 = dW_0$, т. е. на расстоянии x для поля будет справедливо правило $W(x) \in N(0, x)$.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

3.1. Расчеты КПП для белого шума

Проведены численные расчеты распространения фронта пламени в статическом поле ОУ. На рис. 2 приведены данные аналитического решения по формуле (10) и два варианта численной реализации: по уравнению (4) и в форме Феллера (14). Проведено по 50 реализаций для каждого значения δ. Усреднение проводится по оценочной средней скорости для каждой реализации. Для значений $\delta > 1.0$ пламя на некоторое время останавливается в части реализаций и продолжительное время находится в одном положении. По результатам расчетов видно, что форма записи (14) дает лучшее согласие с аналитической кривой при бóльших значениях амплитуды δ. Но так же, как и в случае с использованием уравнения (4), при больших значениях δ пламя останавливается в процессе счета. Обе результирующие

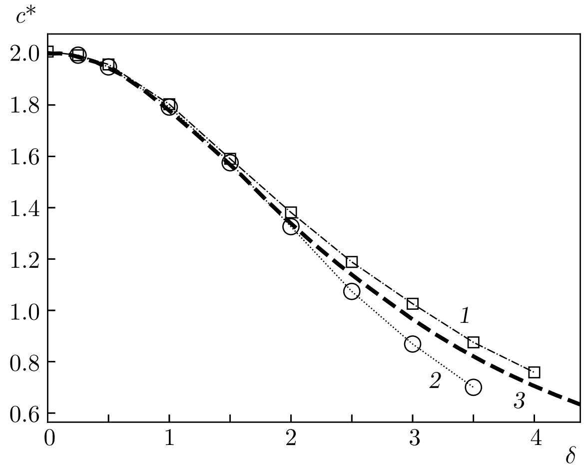


Рис. 2. Среднее значение скорости в зависимости от амплитуды возмущений δ. Сравнение расчета по уравнению (14) с полем винеровского процесса (кривая *1*, значения отмечены квадратами) и расчета по уравнению (4) в поле белого шума (кривая *2* со значениями, отмеченными кружками). При больших δ наблюдаются различия в поведении кривых. Штриховая кривая *3* — аналитическое решение (10) уравнения КПП в поле белого шума

кривые дают хорошее согласие с аналитическим решением для $\delta < 2.5$.

3.2. Расчеты КПП для поля ОУ

Далее проведены расчеты для стохастического поля ОУ. Процесс ОУ удовлетворяет уравнению

$$v_i = r_x v_{i-1} + \sigma\sqrt{(1-r_x^2)}\xi_i \ , \qquad (17)$$

где $r_x = \exp(-\theta\Delta x)$, переменная θ определена обратным интегральным масштабом по пространству, σ — дисперсия и ξ_i — нормальное гауссово распределение со средним 0 и дисперсией 1. Для первого элемента в пространственной сетке (индекс $i = 0$) определено решение

$$v_0 \in N(0, \sigma^2) \ . \qquad (18)$$

Значение дисперсии σ подбирается из условия, что интеграл ковариационной функции должен быть равен 1. Тогда

$$\sigma = \sqrt{\frac{\theta}{2}} \ . \qquad (19)$$

Проведено сравнение средних значений скоростей при различных значениях амплитуды возмущений $\delta\sqrt{\theta/2}$ для поля ОУ при разных значениях $\theta = 0.01$, 1, 100 (рис. 3). При первых двух значениях θ решение приближается к аналитическому решению задачи с белым шумом. Стоит отметить, что во всех рассмотренных вариантах скорость уменьшается.

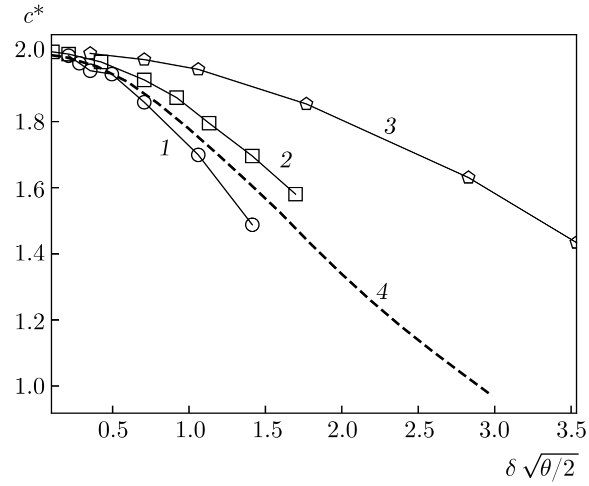


Рис. 3. Среднее значение скорости в зависимости от амплитуды возмущений $\delta\sqrt{\theta/2}$. Расчеты проведены для поля ОУ с различными значениями θ. Кривая *1* — $\theta = 0.01$, кривая *2* — $\theta = 1$, кривая *3* — $\theta = 100$. Штриховая кривая *4* — аналитическое решение с белым шумом

3.3. Определение системы КПП для поля ОУ в динамическом поле

Рассмотрим однородное гауссово поле $v(t,x)$ со средним 0 и ковариационной функцией $\sigma^2\exp(-\tau|t| - \theta|x|)$. Для этого поля справедливо регрессионное соотношение Хабиби [9] на решетке:

$$v_{i,j} = r_x v_{i-1,j} + r_t v_{i,j-1} - r_x r_t v_{i-1,j-1} + \\ + \sigma\sqrt{(1-r_x^2)(1-r_t^2)}\,\xi_{i,j} \ , \qquad (20)$$

где $r_t = \exp(-\tau\Delta t)$ и $r_x = \exp(-\theta\Delta x)$ — переменные корреляционной зависимости по времени и пространству. Переменные θ и τ определены обратными интегральными масштабами соответственно по пространству и времени. При генерации поля обход начинается с угла и идет сначала по пространству, затем переходит на следующий временной слой. Граничные элементы для $v_{i,j}$ определены по зависимостям

$$v_{i,j} = \begin{cases} r_t v_{0,j-1} + \sigma\sqrt{(1-r_t^2)}\xi_{0,j}, & i = 0, \\ r_x v_{i-1,0} + \sigma\sqrt{(1-r_x^2)}\xi_{i,0}, & j = 0, \\ \xi_{0,0}, & i = j = 0 \ . \end{cases} \qquad (21)$$

Дисперсия динамического поля ОУ определяется формулой

$$\sigma^2 = \frac{1}{4}\,\tau\theta. \qquad (22)$$

На рис. 4 показаны расчетные кривые для динамического поля ОУ с интегральными значения-

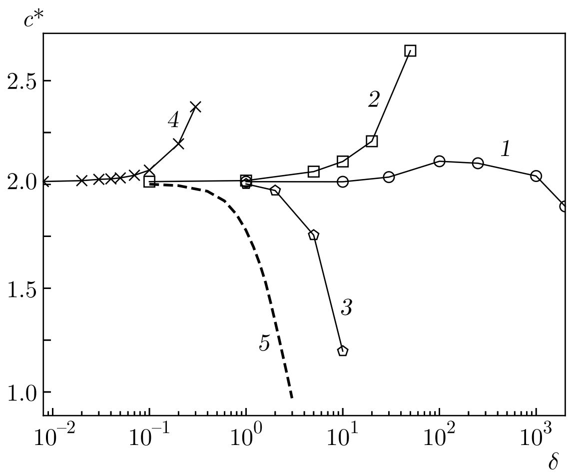


Рис. 4. Зависимости скорости фронта пламени в динамическом поле ОУ по уравнению (4). Размеры расчетных областей $L_x = 2000$ или $L_x = 6000$ в зависимости от амплитуды δ. Рассмотрены следующие комбинации: $\tau = 0.01$, $\theta = 0.01$ (кривая *1*); $\tau = 100$, $\theta = 0.01$ (*2*); $\tau = 0.01$, $\theta = 100$ (*3*) и $\tau = 100$, $\theta = 100$ (*4*); кривая *5* — аналитическое решение задачи (10) в статическом поле

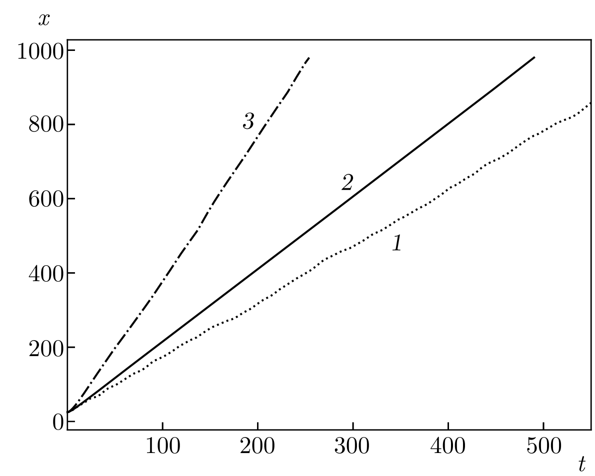


Рис. 5. Профили x–t положения фронта пламени в зависимости от времени при распространении пламени в двумерной постановке. Рассмотрены три варианта: кривая *1* — градиентное поле с параметрами $\theta = 0.01$, $\delta = 100$ дает среднюю скорость пламени 1.5; кривая *2* — градиентное поле с $\theta = 100$, $\delta = 0.2$ имеет результирующую скорость 1.95; кривая *3* — безградиентное поле с $\theta = 0.01$, $\delta = 100$ со скоростью 3.4

ми τ и θ. При больших значениях $\tau = 100$ скорость пламени c^* растет с увеличением амплитуды δ. При $\tau = 0.01$ скорость снижается: для $\theta = 100$ скорость убывает монотонно с увеличением δ, а для $\theta = 0.01$ наблюдается начальный рост до значений $\delta \approx 100$ с последующим уменьшением при увеличении δ. Для последней кривой проблема расчетов состояла в том, что положение фронта пламени сильно отклонялось от средней траектории движения, что требовало увеличения количества реализаций и увеличения размеров расчетной области L_x. Основным отличием динамического поля от статического, где скорость фронта замедляется ловушками, состоит в том, что в динамическом поле эти ловушки движутся, т. е. локально меняется закон диффузии. Мы предполагаем, что этот фактор приводит к росту скорости пламени при определенных комбинациях интегральных масштабов. Сменится ли рост скорости ее уменьшением при больших интенсивностях осталось невыясненным.

3.4. Двумерные расчеты

Для проверки предположения, что градиентные случайные поля могут только замедлять скорость распространения пламени, были проведены двумерные расчеты. Общую форму уравнения КПП (4) расширили для многомерного случая:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k\Delta u + \delta \mathbf{v}(x,y)\nabla u + f(u) \ . \tag{23}$$

Функция скорости $\mathbf{v}(x,y)$ выражается градиентами потенциала $\mathbf{v} = \nabla\Psi = (\partial\Psi/\partial x;\ \partial\Psi/\partial y)$. Скаляр Ψ генерируется аналогично динамическому полю по модели Хабиби в уравнениях (20)–(22), только вместо времени используется вторая пространственная координата. Модель изотропна, т. е. характерный размер возмущений по осям одинаков и выражается переменной θ. Также рассмотрен случай бездивергентного поля, когда скорость описывается выражениями $\nabla\mathbf{v} = 0$, $\mathbf{v} = (-\partial\Psi/\partial y;\ \partial\Psi/\partial x)$.

Построено двумерное поле размерами 1000 на 250 со структурированной сеткой размером 0.25. Фронт пламени движется слева направо. На верхних и нижних границах определены условия нулевого градиента для скорости $\mathbf{v}$ и переменной u. На боковых границах условия остались прежними (13). Генерируем поле Ψ с параметрами $\theta = 0.01$, $\delta = 100$. Для анализа результатов на рис. 5 представлены x–t-диаграммы усредненного по y-координате фронта пламени для трех случаев. В градиентном поле скорость фронта убывает и составляет в среднем 1.5 (кривая *1*), а в бездивергентном поле достигает 3.4 (кривая *3*), что на 75 % превышает скорость в невозмущенной среде. Кривая *2* воспроизводит практически ламинарное течение с параметрами $\theta = 100$, $\delta = 0.2$.

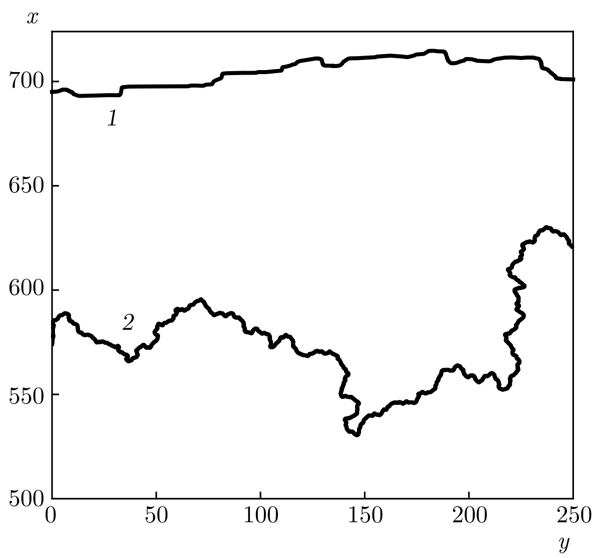


Рис. 6. Профиль фронта горения в градиентном поле (кривая *1*) в момент времени 450 и в бездивергентном поле (кривая *2*) при $t = 150$. Пламя распространяется снизу вверх

На рис. 6 показаны профили фронтов пламени. Кривой *1* представлен профиль фронта в градиентном поле, а кривой *2* — в бездивергентном. В последнем варианте наблюдается сильное развитие поверхности и выделение «языков» пламени. Данная картина развития пламен наиболее похожа на задачи распространения турбулентных пламен, где учитывается множество уравнений: уравнение неразрывности, уравнение сохранения количества движения и уравнение сохранения энергии.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено исследование зависимости турбулентной скорости изотермического пламени в случайном потоке от интенсивности турбулентности для одномерного случая и КПП-нелинейности. Для статической случайной среды турбулентная скорость убывает и стремится к нулю с ростом турбулентной интенсивности. Такое поведение турбулентной скорости получено как для белого шума, так и для процесса ОУ. Мы объясняем это тем, что скорость случайного потока есть градиент случайного потенциала, что приводит к ловушкам и замедлению диффузии.

Аналитически показано, что при наличии спутного потока — добавлении средней скорости к пульсационной $\delta v(x)$ — фронт пламени легче преодолевает ловушки, что приводит к росту скорости. Если рассмотреть поле $\delta v(x) + ka/2$, $q = a/\overline{\delta}^2$, то при $q > 0.5$ скорость растет, при $q < 0.5$ убывает, а при $q = 0.5$ скорость остается постоянной. Такой мощный поток, порядка δ^2, позволяет пламени преодолевать ловушки.

Проведенные численные эксперименты для поля ОУ динамической среды показали, что учет динамического поля $\delta v(t, x)$ может приводить к росту турбулентной скорости. Оказалось, что для динамической среды в некоторых областях масштабов по пространству и времени возможен начальный рост скорости при росте турбулентности. Отметим, что в статическом поле движение частиц замедляется глубокими ловушками. Мы предполагаем, что в динамическом поле глубокие ловушки движутся, меняется закон диффузии, что, возможно, приводит к росту скорости пламени. Сменится ли рост скорости падением при больших интенсивностях осталось невыясненным.

Нами проведен двумерный расчет для статического градиентного поля. Получено, что турбулентная скорость пламени убывает. Видимо, это общий факт для градиентных полей. Случайное градиентное поле скоростей в двумерном и трехмерном случаях должно давать тот же эффект. Возможно, что это верно не только для КПП-нелинейности.

В работе был рассмотрен пример двумерного бездивергентного поля, для которого численный счет показал рост турбулентной скорости. Предполагается, что это имеет место для широкого класса задач.

Финансирование. Работа выполнена частично за счет субсидий, выделенных ИХФ РАН на выполнение государственного задания по темам АААА-А17-117040610346-5 и АААА-А18-118012390045-2.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. D. Ronney, *Modeling in Combustion Science*, Springer, Berlin–Heidelberg (1995).
2. А. Н. Колмогоров, И. Г. Петровский, Н. С. Пискунов, Бюлл. МГУ, сер. А **1**(6), 333 (1937).
3. В. Б. Либрович, Г. М. Махвиладзе, Я. Б. Зельдович и др., *Математическая теория горения и взрыва*, Наука, Москва (1980).
4. R. A. Fisher, Ann. Eugenics **7**(4), 355 (1937).

5. J. Nolen and J. Xin, Discrete and Cont. Dyn. Syst. B **11**(2), 421 (2009).

6. M. Freidlin, *Functional Integration and Partial Differential Equations*, Princeton Univ. Press **109** (1985).

7. В. Феллер, Математика **1**(4), 105 (1957).

8. M. Taleb, Ann. Probability **29**(3), 1173 (2001).

9. A. Habibi, Proc. IEEE **60**(7), 878 (1972).

10. В. Я. Басевич, В. П. Володин, С. М. Когарко и др., Физика горения и взрыва **3**, 44 (1986).

11. В. Я. Басевич, А. А. Беляев, С. М. Фролов и др., Горение и взрыв **10**(1), 4 (2017).

12. В. Я. Басевич, А. А. Беляев, С. М. Фролов и др., Хим. физика **38**(1), 27 (2019).

13. The OpenFOAM Foundation. *OpenFOAM v6 User Guide*.

ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 3, стр. 541–545

ПОВЕРХНОСТНАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ ВАНАДИЯ

И. Н. Хлюстиков [*]

Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук
119334, Москва, Россия

Поступила в редакцию 18 ноября 2020 г.,
после переработки 15 декабря 2020 г.
Принята к публикации 16 декабря 2020 г.

Обнаружено, что в ванадии критическая температура поверхностной сверхпроводимости T_{cs} на 0.04 К превышает критическую температуру сверхпроводимости объема T_{cv}. Незатухающие токи поверхностной сверхпроводимости могут эффективно обеспечить захват магнитного потока. Оценка плотности критического тока поверхностной сверхпроводимости дает величину порядка $j_s = 5 \cdot 10^6$ А/см^2 при $T = T_{cv}$.

DOI: 10.31857/S0044451021030147

1. ВВЕДЕНИЕ

Явление поверхностной сверхпроводимости известно давно, и его теоретическое описание, данное Де Женом [1], можно найти практически во всех посвященных сверхпроводимости книгах. При этом совпадение критических температур объема и поверхности принимается как постулат. Кроме того, нигде не обсуждаются такие вопросы, как возможность захвата магнитного потока токами поверхностной сверхпроводимости и каковы критические значения этих токов.

Исследованиям сверхпроводимости в ванадии посвящено удивительно мало работ. В качестве примера можно указать на работы [2, 3]. Из них известно, что ванадий является сверхпроводником второго рода с параметром Гинзбурга – Ландау 1.8 [2] или 0.78 [3]. Критическая температура T_c ванадия считается равной 5.45 К.

Известны также работы по исследованию сверхпроводящих свойств малых частиц и пленок ванадия, например [4, 5].

Целью настоящей работы являлось магнитометричекое исследование сверхпроводящих свойств ванадия вблизи его критической температуры.

[*] E-mail: KHLY@kapitza.ras.ru

2. ОБРАЗЕЦ И МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЙ

Исследовавшийся образец ванадия был сферической формы. При его изготовлении из исходного монокристалла вначале вырезался кубик, который затем был обточен в вихревой воздушной ячейке, внутренняя поверхность которой была выложена мелкой шкуркой. Поврежденный поверхностный слой удалялся химическим травлением. Диаметр изготовленного образца ванадия составил 1 мм.

Такой форме образцов соответствует точно определенное значение размагничивающего фактора 1/3. Кроме того, сфера очень привлекательна для бесконтактных магнитометрических исследований поверхностной сверхпроводимости. На «экваторе» образца, все точки которого эквивалентны друг другу, внешнее приложенное магнитное поле везде касательно к поверхности шара. Соответственно, вблизи экватора следует ожидать возникновения четко локализованных замкнутых сверхпроводящих контуров, порожденных поверхностной сверхпроводимостью.

Измерения проводились при помощи SQUID-магнитометра [6], который позволяет регистрировать зависимости $M(H)$ (магнитного момента образца от внешнего магнитного поля) при фиксированной температуре, а также зависимости $M(T)$ при фиксированном внешнем поле.

(H, T)-область проведенных исследований была ограничена конечным динамическим диапазоном системы регистрации магнитного момента. Отношение (максимальный регистрируемый сигнал)/(уровень шума) составило порядка 10^7.

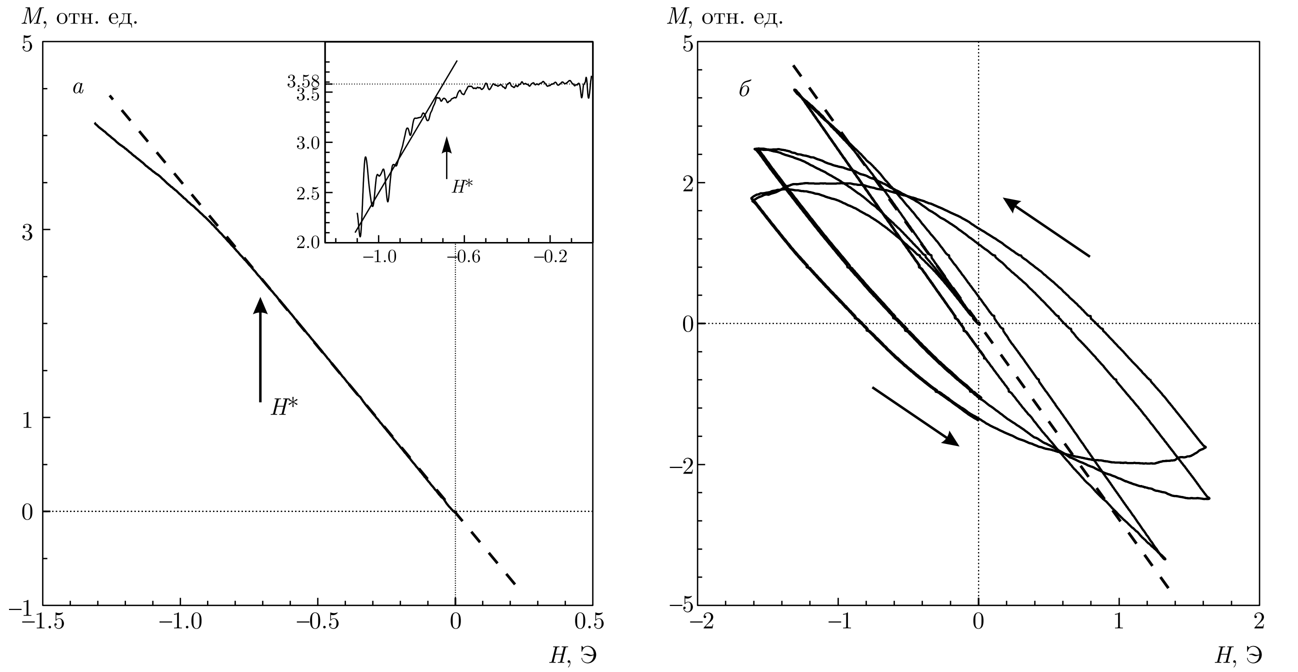


Рис. 1. *а* — Начальная часть записи зависимости $M(H)$ при развертке приложенного к образцу поля от нуля. Температура близка к критической. Штрихи — результат измерений при низких температурах. На врезке — результат численного дифференцирования. *б* — Эволюция петель гистерезиса при приближении к критической температуре. Стрелки — направление обхода петель

Измерения проводились при температурах от 4.2 К до температур, примерно на 1 К превышающих критические температуры ванадия. Температура определялась по показаниям термопары медь–золото, а малые смещения по температуре — по изменению режима нагревателя.

Дополнительная калибровка установки проводилась по магнитному моменту одиночного витка, через который пропускался хорошо контролируемый ток. Виток из медной проволоки 0.01 мм был намотан на кварцевый каркас диаметром 1.6 мм.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗМЕРЕНИЙ

При низких температурах, в пределах доступной области наблюдений -2 Э $< H <$ 2 Э, зависимости $M(H)$ оказались линейными и полностью обратимыми, без каких-либо признаков гистерезиса.

При несколько более высоких температурах, вблизи критической, начальный участок зависимостей $M(H)$ остается точно таким же, как и при низких температурах, полностью обратимым. Однако при дальнейшем увеличении приложенного поля зависимости $M(H)$ отклоняются от линейных, что указывает на то, что магнитное поле начинает проникать в образец (рис. 1*а*). Представленная на рисунке экспериментальная запись и аналогичные ей были сделаны после предварительных нагревов образца до его нормального состояния и охлаждений до выбранной температуры при $H = 0$.

Поскольку размагничивающий фактор образца точно известен, представляется обоснованным связать наблюдаемое поле излома H^* с критическим полем объемной сверхпроводимости $H_{c1} = (3/2)H^*$.

При развертке внешнего поля до величин, превосходящих поле H^*, зависимости $M(H)$ становятся гистерезисными (рис. 1*б*). Обычно подобное поведение зависимостей $M(H)$ связывают с проявлением пиннинга.

В силу жесткой связи между H_{c1} и H^* температурная зависимость критического поля $H^*(T)$ позволяет определить критическую температуру для объема образца T_{cv}, как показано в правой части рис. 2.

На этом же рисунке показаны результаты измерений магнитного момента образца при его охлаждении в постоянном, не изменяющемся магнитном поле и без него. Следует особо подчеркнуть, что в

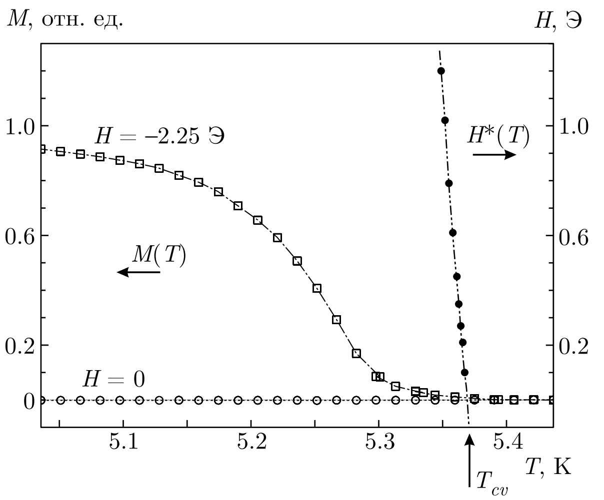


Рис. 2. Температурные зависимости критического поля H^* и магнитного момента образца при его охлаждении в неизменном внешнем поле

обоих случаях никакого заметного магнитного момента не возникает вплоть до температуры T_{cv}. Следовательно, есть все основания утверждать, что при температурах выше T_{cv} никакой сверхпроводимости в объеме образца не существует.

Неожиданный результат появляется при развертке внешнего поля, если температура превышает T_{cv}. Зависимости $M(H)$ остаются гистерезисными. Наличие гистерезиса на зависимостях $M(H)$ однозначно свидетельствует, что и при температурах больших T_{cv} остается возможность захвата образцом магнитного потока. Важно также, что при остановке развертки поля магнитный момент остается неизменным, т. е. индуцированный изменяющимся внешнем полем ток не затухает.

Кроме регистрации частных петель удается показать существование предельной петли, на которую зависимости $M(H)$ выходят при достаточно широком диапазоне развертки прикладываемого поля (рис. 3*а*). Эта предельная петля оказывается одной и той же независимо от того, в нулевом или конечном поле производилось предварительное охлаждение образца.

При увеличении температуры амплитуда наблюдаемой предельной петли гистерезиса, как показано на рис. 3*б*, уменьшается. При этом все ее характерные черты полностью сохраняются.

Принципиальное отличие полученных зависимостей $M(H)$ на предельной петле гистерезиса от похожих зависимостей, обусловленных пиннингом, заключается в том, что экстремальные величины магнитного момента наблюдаются **ДО**, а не **ПОСЛЕ** прохождения внешнего поля через нуль. Еще одной важной чертой предельной петли $M(H)$ является ее симметрия. И верхняя, и нижняя ветви петли четны относительно поля наблюдения экстремума магнитного момента.

Температурные зависимости амплитудной величины магнитного момента на предельной петле гистерезиса представлены на рис. 4. При температурах выше T_{cs} зависимости $M(H)$ становятся линейными и полностью обратимыми. Состояние образца в этих условиях следует считать нормальным. Разность температур T_{cs} и T_{cv} составила 0.04 К.

Зарегистрированные зависимости магнитного момента образца и характерный ромбообразный вид предельной петли гистерезиса однозначно свидетельствуют о существовании в образце при температурах между T_{cv} и T_{cs} тонкого сверхпроводящего контура. Этот контур может располагаться только на поверхности образца. Более того, можно утверждать, что он локализован вблизи «экватора» образца, поскольку нормальная компонента магнитного поля подавляет поверхностную сверхпроводимость. Таким образом, диаметр захватывающего магнитный поток контура равен диаметру образца. Подобный вывод подтверждается также тем, что на начальном этапе записи частной петли, сразу после изменения направления развертки приложенного поля, величина производной dM/dH соизмерима с восприимчивостью образца в заведомо сверхпроводящем состоянии.

Отсюда, используя проведенные калибровки, получается, что критический ток I_c (контурный ток на предельной петле гистерезиса) при T_{cv} может достигать величин 50 мА. Координатная ось в единицах тока также показана в правой части рис. 4.

Смещение экстремальных значений магнитного момента на предельной петле гистерезиса относительно нуля внешнего поля вызывается индуцированным в контуре током. Поле этого тока снаружи образца направлено против разворачиваемого поля, соответственно, нулевые значения на поверхности реализуются раньше, чем внешнее поле становится равным нулю. В проведенных экспериментах смещение максимума M относительно нуля приложенного поля составило примерно 1 Э (см. рис. 3). Это позволяет сделать оценку протяженности сверхпроводящего токонесущего контура вдоль «меридиана». Она составила 0.2 мм (при токе 50 мА поле в 1 Э на поверхности проволоки возникает при ее диаметре 0.2 мм).

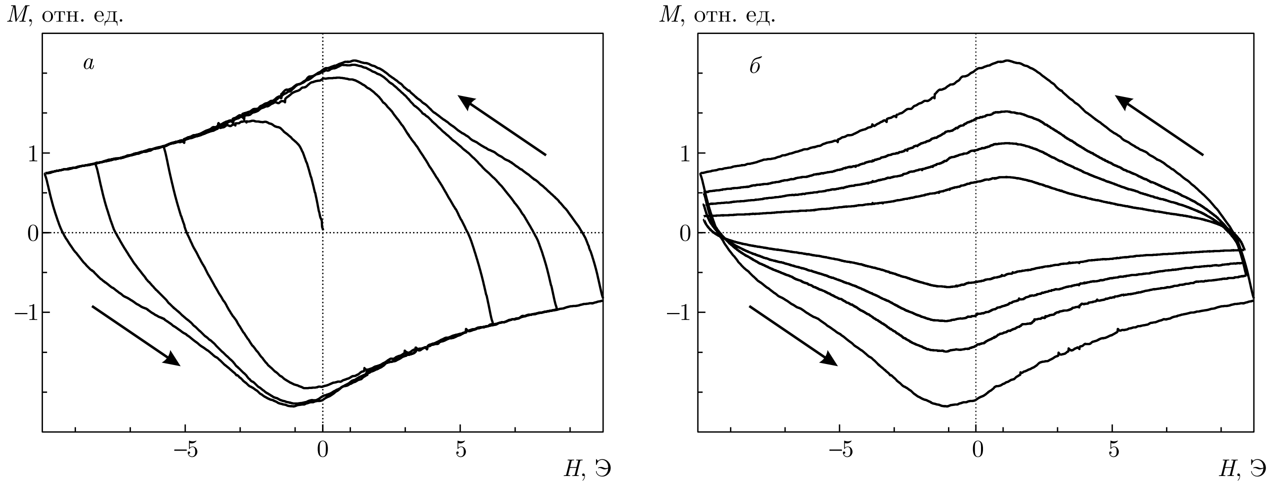


Рис. 3. a — Выход зависимости $M(H)$ на предельную петлю гистерезиса при последовательном увеличении амплитуды развертки поля. Начальная точка – в начале координат. $б$ — Изменение (уменьшение) предельной петли гистерезиса при повышении температуры. Стрелки — направление обхода петель

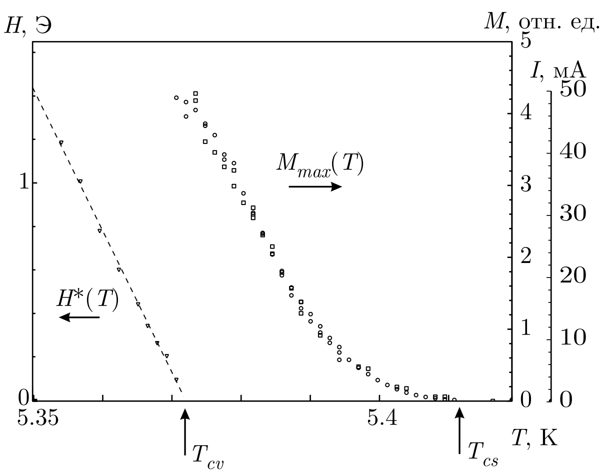


Рис. 4. Температурные зависимости $H^*(T)$ и амплитудной величины магнитного момента на предельной петле гистерезиса

Считая, что наблюдаемые поверхностные токи текут в слое порядка глубины проникновения (500–1000 Å), можно также дать оценку средней плотности протекающего по контуру тока $j_c = 5 \cdot 10^6$ А/см^2 при $T = T_{cv}$. Такая величина плотности тока, превосходящая параметры технических сверхпроводников при самых низких температурах, достигается всего на 1 % ниже критической температуры перехода поверхности образца в сверхпроводящее состояние. Следовательно, характерным масштабом для зарегистрированных контурных токов поверхностной сверхпроводимости являются «токи распаривания».

Следует также отметить, что эта оценка находится в полном согласии с результатами компьютерного моделирования [7].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, полученные экспериментальные результаты показывают, что поверхностную сверхпроводимость никак нельзя считать пренебрежимо малым, «слабым» эффектом. Поверхностная сверхпроводимость заметно экранирует внешнее магнитное поле, а плотность зарегистрированных, возбуждаемых в поверхностном слое, незатухающих электрических токов соизмерима с плотностью «токов распаривания» сверхпроводимости объема.

Кроме того, показано, что существует конечный интервал температур, в котором реализуется только поверхностная сверхпроводимость. При охлаждении сначала при температуре T_{cs} возникает поверхностная сверхпроводимость, и только при дальнейшем охлаждении до температур меньших T_{cv} появляется сверхпроводимость объема. Аналогичная ситуация наблюдалась ранее при исследовании образцов свинца [8].

Полученные экспериментальные результаты показывают, что поверхностную сверхпроводимость следует рассматривать как самостоятельное явление, сверхпроводимость в «двумерной» системе.

Благодарности. Автор благодарен Е. Р. Подоляку, Е. Г. Николаеву и В. И. Марченко за многочисленные чрезвычайно полезные обсуждения результатов этой работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. П. Де Жен, *Сверхпроводимость металлов и сплавов*, Мир, Москва (1968).

2. R. B. Martin and A. C. Rose-Ines, Phys. Lett. **19**, 467 (1965).

3. H. W. Weber, E. Moser, and E. Seidl, Physica B **107**, 295 (1981).

4. Ю. Г. Морозов, ФТТ **22**, 196 (1980).

5. В. М. Кузьменко и др., ЖЭТФ **74**, 2078 (1978).

6. И. Н. Хлюстиков, ПТЭ №6, 167 (1984).

7. Е. Р. Подоляк, ЖЭТФ **153**, 466 (2018).

8. И. Н. Хлюстиков, ЖЭТФ **149**, 378 (2016).

ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 3, стр. 546–552

МАГНИТОТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК $Ni_{49.7}Fe_{17.4}Co_{4.2}Ga_{28.7}$

М. И. Блинов [a*], *В. А. Черненко* [b,c**], *В. Н. Прудников* [a], *И. Р. Асегуинолаза* [b***], *Ж. М. Барандиаран* [b****], *Э. Ладеранта* [d†], *В. В. Ховайло* [e], *А. Б. Грановский* [a,e,f‡]

[a] *Физический факультет Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова*
119991, Москва, Россия

[b] *Университет Страны Басков*
48080, Бильбао, Испания

[c] *Научный фонд Страны Басков*
48009, Бильбао, Испания

[d] *Технологический университет Лапеенранты*
53851, Лаппеенранта, Финляндия

[e] *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»*
119049, Москва, Россия

[f] *Институт теоретических и прикладных проблем электродинамики Российской академии наук*
125412, Москва, Россия

Поступила в редакцию 23 ноября 2020 г.,
после переработки 17 декабря 2020 г.
Принята к публикации 17 декабря 2020 г.

В широком температурном интервале, включающем мартенситный переход, исследованы магнитные и магнитотранспортные свойства тонких пленок сплавов Гейслера $Ni_{49.7}Fe_{17.4}Co_{4.2}Ga_{28.7}$, осажденных на подложках MgO(100). Для данного состава мартенситный переход не сопровождается магнитным фазовым переходом, так как мартенситная и аустенитная фазы являются ферромагнетиками с близкими значениями намагниченности. Сопротивление не испытывает резких изменений при мартенситном переходе. Магнитосопротивление отрицательно, уменьшается по величине при увеличении температуры в диапазоне 100–250 K, соответствующем мартенситному переходу, а затем увеличивается до $-1\,\%$. Полевые зависимости сопротивления Холла имеют характерный вид для однородных ферромагнитных сплавов. Определены коэффициенты нормального и аномального эффектов Холла. Показано, что коэффициент аномального эффекта Холла описывается зависимостью $R_s = \alpha\rho + \beta\rho^2$, где ρ — сопротивление и второй член меньше первого, что указывает на важную роль интерференционного примесного-фононного механизма рассеяния.

DOI: 10.31857/S0044451021030159

1. ВВЕДЕНИЕ

Сплавы Гейслера обладают уникальными многофункциональными и важными для разнообразных практических применений свойствами, что и определяет непрерывно возрастающий интерес к этим системам [1, 2]. Сплавы семейства Ni–Mn–X, где X = Ga, In, Sb, определенного концентрационного состава испытывают мартенситный переход (МП) из высокотемпературной кубической фазы (аустенит) в низкотемпературную фазу с тетрагональными искажениями (мартенсит) при характерной температуре T_M и обратно, при повышении температуры, при температуре T_A, что сопровождается температурным гистерезисом. Этот переход ответствен за

* E-mail: mi.blinov@physics.msu.ru
** V. A. Chernenko
*** I. R. Aseguinolaza
**** J. M. Barandiaran
† E. Lahderanta
‡ E-mail: granov@magn.ru

многие свойства, в частности за гигантские деформации [3], гигантский магнитокалорический эффект [4], гигантский аномальный эффект Холла [5], магнитный эффект памяти формы [6] и др. Недавно в сплавах семейств Ni–Mn–Ga и Ni–Mn–In обнаружены скирмионы [7, 8] и соответствующий им топологический эффект Холла [9]. Принято считать, что МП связан с действием коллективного эффекта Яна – Теллера, при котором выигрыш в энергии за счет понижения симметрии решетки компенсируется проигрышем в энергии электронной подсистемы. Хотя ряд экспериментальных фактов (см., например, работу [10]) и теоретические расчеты (см., например, работу [11]) подтверждают эту концепцию, существуют данные, ей противоречащие. Так, пропорциональный плотности состояний на уровне Ферми электронный вклад в теплоемкость в сплавах Ni–Mn–In незначительно меняется при МП [12], также малы изменения магнитооптического эффекта Керра [13], не найден электронный вклад в магнитокалорический эффект [4]. Это указывает на достаточно сложный и до конца не понятый характер перестройки электронной структуры при МП. Одними из наиболее эффективными зондами-индикаторами фазовых переходов и изменений электронной и магнитной структур являются магнитотранспортные эффекты, такие как магнитосопротивление и эффект Холла. Эти явления, особенно эффект Холла с выделением нормальной и аномальной составляющих, были изучены только для единичных составов сплавов Гейслера, испытывающих ярко выраженный МП. Были выявлены изменение типа носителей при МП [14], перераспределение d-состояний со спинов вдоль и против намагниченности [15], сильные антиферомагнитные корреляции [16]. Изучение аномального эффекта Холла, являющегося центральным в группе спонтанных гальваномагнитных явлений и ярким представителем спин-зависящих явлений переноса, в сплавах Гейслера имеет и самостоятельное значение, так как до сих пор продолжаются дискуссии о роли различных механизмов в формировании этого эффекта [17]. Например, недавно в работе [18] утверждалось, что аномальный эффект Холла в сплавах Ni–Mn–Ga связан с асимметричным рассеянием, тогда как в работах [14–16] показано, что ни асимметричное рассеяние, ни механизм бокового смещения или собственный механизм не позволяют объяснить эксперимент для сплавов на основе Ni–Mn–In и сплава $Ni_{47.3}Mn_{30.6}Ga_{22.1}$.

В настоящей работе в широком интервале температур, включающем область МП, исследованы магнитные свойства, сопротивление, магнитосопротивление, сопротивление Холла тонких пленок $Ni_{49.7}Fe_{17.4}Co_{4.2}Ga_{28.7}$. Выбор данного состава сплавов, принадлежащего к классу магнитных сплавов с эффектом памяти формы, определяется следующими факторами. Во-первых, для этого состава детально исследованы структурные свойства [19, 20]. Во-вторых, МП в этих сплавах выражен не так ярко, как для сплавов Ni–Mn–In или Ni–Mn–Ga, для которых ранее изучались транспортные свойства. Более того, МП в этом сплаве происходит в ферромагнитной фазе, т. е. при МП нет резких изменений намагниченности или сопротивления, и можно сказать, что это пример «скрытого» МП. В-третьих, высокая температура Кюри, обусловленная наличием кобальта, и температурный интервал МП выше азотной температуры позволяют исследовать аномальный эффект Холла в широкой области температур. Нами показано, что поведение магнитосопротивления, сопротивления Холла, коэффициентов нормального и аномального эффектов Холла в пленках Ni–Fe(Co)–Ga кардинально отличается от имеющих место в сплавах Ni–Mn–In и Ni–Mn–Ga.

2. МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЙ И ОБРАЗЦЫ

2.1. Образцы

Поликристаллические пленки сплава Гейслера $Ni_{49.7}Fe_{17.4}Co_{4.2}Ga_{28.7}$ (ат. %) толщиной 1 мкм были получены распылением исходной мишени на подложки MgO(001), нагретые до температуры 773 K. Детали изготовления пленок и их структурные свойства описаны в работах [19, 20]. На основе структурных измерений методами рентгеновского структурного анализа. рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и магнитного кругового дихроизма, ферромагнитного резонанса [19, 20] было получено, что в пленках происходят прямой и обратный МП без изменения типа магнитного упорядочения (т. е. МТ происходит внутри ферромагнитной фазы) и пленки характеризуются тремя ферромагнитными фазами: кубической $L21$-упорядоченной аустенитной, тетрагональной мартенситной и неупорядоченной кубической γ-фазой.

2.2. Магнитные и транспортные измерения

Измерения намагниченности выполнены на вибрационном магнитометре Lake Shore VSM при температуре 80–400 K в магнитных полях до 16 кЭ. Ниже мы определяем намагниченность M как магнитный момент холловского образца в виде полоски размерами 2×6 мм. Магнитное поле прикладывалось перпендикулярно плоскости тонкопленочного образца, т. е. в холловской геометрии.

Магнитотранспортные свойства измерялись стандартным четырехзондовым методом в магнитных полях до 21 кЭ при 80–400 К. Для исключения четных по намагниченности эффектов при определении коэффициентов Холла измерения сопротивления Холла при каждой температуре проводились при двух противоположных направлениях поля и тока.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Намагниченность

Температурные зависимости намагниченности $M(T)$ в магнитных полях 50 Э и 16 кЭ приведены на рис. 1*а* и хорошо коррелируют с результатами предыдущих исследований этих пленок (см. рис. 3 в работе [19]). МП начинается при 250 К (рис. 1*а*), намагниченность изменяется при МП незначительно и монотонно. Завершение МП происходит при $T < 80$ К, что также согласуется с результатами работы [19]. МП проявляется только в слабых магнитных полях. Следует отметить, что величина намагниченности при низких температурах почти в два раза больше при 16 кЭ, чем при 50 Э, что указывает на наличие при низких температурах в слабых полях неколлинеарных структур, обусловленных конкуренцией ферромагнитного и антиферомагнитного обменных взаимодействий.

Полевые зависимости намагниченности представлены на рис. 1*б*. Эти данные используются для определения коэффициентов нормального и аномального эффектов Холла.

3.2. Электрическое сопротивление и магнитосопротивление

На рис. 2 показана температурная зависимость сопротивления при нагреве и охлаждении.

МП очень слабо проявляется в температурной зависимости сопротивления. Расхождение кривых при нагреве и охлаждении происходит приблизительно при 250 К, т. е. при той же температуре, что и в температурной зависимости намагниченности. Отметим две особенности поведения сопротивления. Во-первых, оно мало: меньше, чем 150 мкОм · см при всех температурах, т. е. эти сплавы, несмотря на то

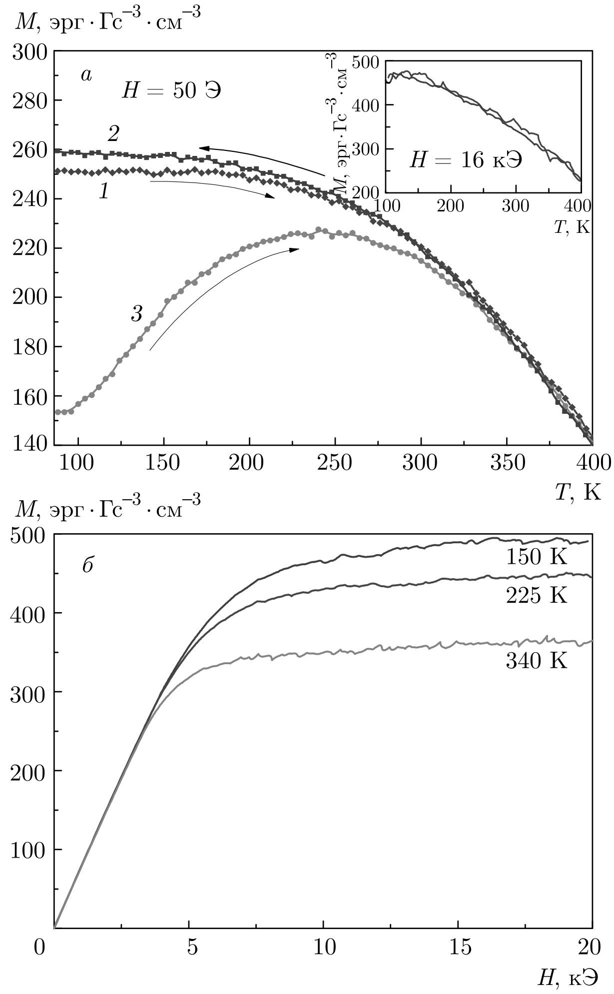


Рис. 1. (В цвете онлайн) Зависимости намагниченности тонких пленок $Ni_{49.7}Fe_{17.4}Co_{4.2}Ga_{28.7}$ от *а*) температуры при нагреве (кривая *1*) и охлаждении (кривая *2*) в магнитном поле 50 Э (на вставке то же при 16 кЭ) и при нагреве после охлаждения в нулевом поле (кривая *3*); *б*) от магнитного поля при температурах 150, 225, 340 К

что они поликристаллические, четырехкомпонентные и многофазные, являются низкорезистивными. Во-вторых, температурный коэффициент сопротивления практически постоянен во всем исследованном интервале температур.

На рис. 3 показана температурная зависимость магнитосопротивления $\mathrm{MR} = (\rho(H) - \rho(H))/\rho(0)$.

Магнитосопротивление отрицательно и меньше 1 %, при повышении температуры сначала уменьшается, а затем выше 250 К увеличивается, демонстрируя широкий минимум. Такое поведение является необычным, так как магнитосопротивление в окрестности структурных фазовых переходов, как правило, имеет четко выраженные экстремумы в той же области, где происходит переход.

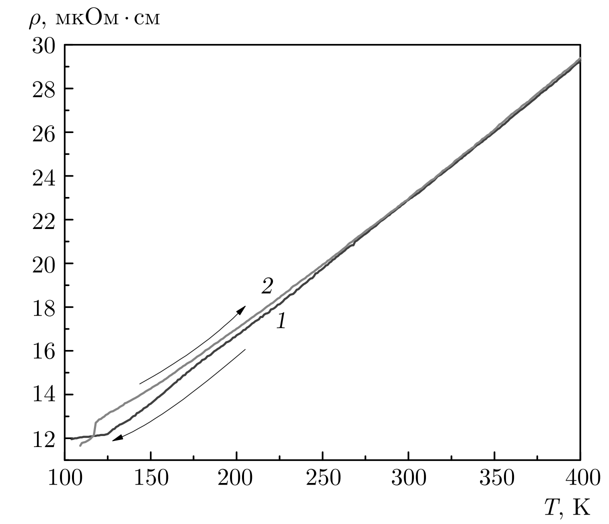


Рис. 2. Температурная зависимость электрического сопротивления пленок $Ni_{49.7}Fe_{17.4}Co_{4.2}Ga_{28.7}$ при нагреве (кривая *1*) и охлаждении (кривая *2*)

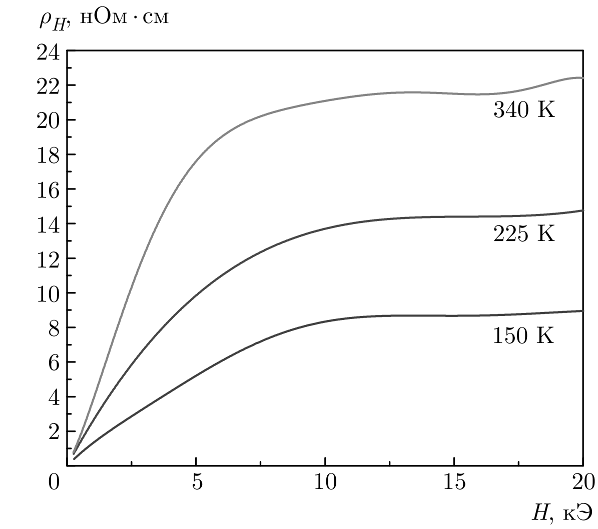


Рис. 4. Полевые зависимости сопротивления Холла пленок $Ni_{49.7}Fe_{17.4}Co_{4.2}Ga_{28.7}$ при 150, 225, 340 K

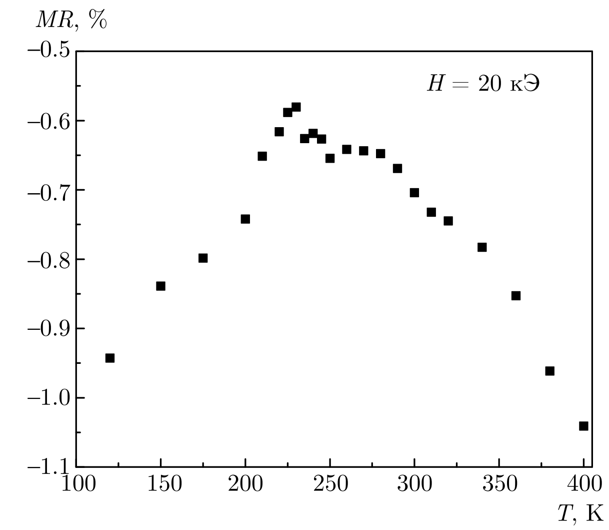


Рис. 3. Температурная зависимость магнитосопротивления пленок $Ni_{49.7}Fe_{17.4}Co_{4.2}Ga_{28.7}$

3.3. Эффект Холла

На рис. 4 показаны полевые зависимости сопротивления Холла ρ_H при температурах 150, 225, 340 K, т. е. в окрестности МП и в аустенитной фазе выше МП. Поведение сопротивления Холла типично скорее для однородных ферромагнетиков, чем для многофазных образцов или сплавов Гейслера с ярко выраженным МП. Сначала сопротивление Холла возрастает при увеличении поля, следуя изменению намагниченности, а затем насыщается в тех же полях, что и намагниченность.

Начнем обсуждение экспериментальных данных с сопротивления. Сопротивление образцов примерно той же величины, что и для кристаллических сплавов на основе Ni и Fe [20]. Сильная температурная зависимость сопротивления, которая определяется рассеянием на фононах и магнитных неоднородностях, близка к линейной. Как хорошо известно, фононный и магнитный вклады в сопротивление ферромагнетиков линейны по температуре в области температур выше дебаевской и ниже температуры Кюри. Для нашего состава температура Кюри составляет около 400 K (см. рис. 1*a*), а температуру Дебая по аналогии с данными для сплавов Ni_2MnGa и Ni_2MnIn (см. табл. 6 в работе [21]) можно оценить как 200–250 K. Наиболее важным фактом является весьма слабое изменение сопротивления при МП. Если МП связан с изменением электронной структуры, то плотность состояний на уровне Ферми, $g(E_F)$, должна изменяться, что подтверждается теоретическими расчетами [22]. Но это не проявляется в сопротивлении, зависящем от плотности состояний, согласно выражению Мотта [23], как $\left|V^2\right|/g(E_F)^3$, где V — потенциал рассеяния. По-видимому, изменение плотности состояний компенсируется изменением потенциала рассеяния. К сожалению, расчеты электронной структуры выполнены только для $T = 0$, и поэтому прямое сопоставление теории с экспериментом, не учитывающее температурные изменения плотности состояний, невозможно. Отметим, что поскольку намагниченность изменяется незначительно, трансформация d-состояний должна быть незначительной, а значит, s–d-рассеяние принципиально не изменяется при МП в рассматриваемом случае.

Отрицательное магнитосопротивление связано с подавлением магнитным полем спиновых флуктуаций и магнитного беспорядка. В соответствии с этим механизмом этот вклад в магнитосопротивление растет при приближении к температуре Кюри (400 K) в аустенитной фазе, т. е. выше 250 K. Уменьшение же магнитосопротивления при 100–250 K, т. е. в области МП, выглядит неожиданным. Обращает на себя внимание также тот факт, что величина магнитосопротивления при низких температурах того же порядка, что и при высоких, хотя для рассеяния на магнонах должна быть много меньше. Мы связываем такое поведение магнитосопротивления с наличием антиферромагнитных корреляций, приводящих к неколлинеарным локальным структурам. Рассеяние на таких структурах подавляется в сильном магнитном поле, поэтому магнитосопротивление достаточно велико при низких температурах, где конкуренция между антиферромагнитным и ферромагнитным взаимодействиями существенна. При повышении температуры такие неколлинеарные образования постепенно исчезают в силу образования аустенитной фазы и кубической γ-фазы [19], что и приводит к уменьшению магнитосопротивления.

Сопротивление Холла в общем случае описывается соотношением

$$\rho_H = R_0 B_z + 4\pi R_s M_z + \Delta\rho_H, \qquad (1)$$

Здесь первый член описывает нормальный эффект Холла, обусловленный действием силы Лоренца, R_0 — коэффициент нормального эффекта Холла и B_z — z-компонента магнитной индукции. Второй член в (1) характеризует аномальный эффект Холла, который возникает за счет спин-орбитального взаимодействия, R_s — коэффициент аномального эффекта Холла. Третий член описывает возможный топологический и антиферромагнитный эффекты Холла (см., например, работу [16]). Полевая зависимость сопротивления Холла (рис. 4) имеет стандартный вид для ферромагнитных сплавов, хорошо коррелирует с полевой зависимостью намагниченности без каких-либо признаков топологического эффекта Холла или антиферромагнитного эффекта Холла, и далее этот вклад не рассматривается. Тогда, аппроксимируя данные для полевой зависимости сопротивления Холла (рис. 5) зависимостью намагниченности от магнитного поля (см. рис. 1*б*) и следуя определению сопротивления Холла (1) без последнего члена, можно определить коэффициенты

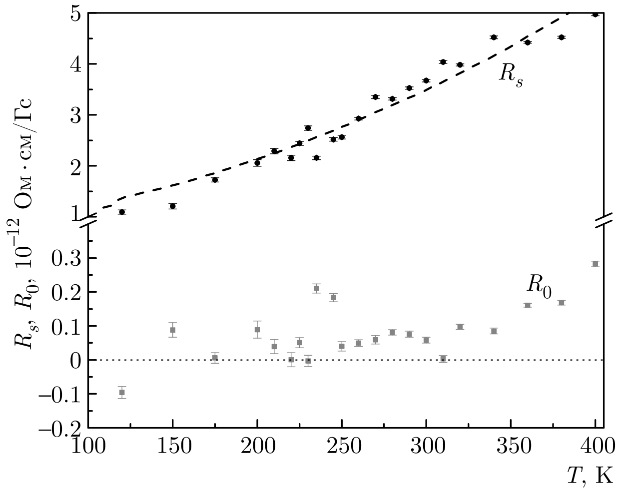


Рис. 5. Температурные зависимости коэффициентов нормального R_0 и аномального R_s эффектов Холла пленок $Ni_{49.7}Fe_{17.4}Co_{4.2}Ga_{28.7}$. Штриховая линия — аппроксимация с помощью соотношения $R_s = \alpha\rho + \beta\rho^2$, α [Гс$^{-1}$] $= 4.92 \cdot 10^{-8} + 2.34 \cdot 10^{-22}$, β [(Ом · см · Гс)$^{-1}$] $= 4.48 \cdot 10^{-9} + 4.52 \cdot 10^{-25}$

нормального R_0 и аномального R_s эффектов Холла. Такая методика разделения вкладов этих эффектов описана в работе [14]. Результат такого разделения коэффициентов нормального и аномального эффектов Холла показан на рис. 5.

Коэффициент нормального эффекта Холла относительно слабо зависит от температуры по сравнению с ранее исследованными сплавами Гейслера, испытывающими МП [14,16]. Коэффициент аномального эффекта Холла монотонно растет при повышении температуры, как и в низкорезистивных металлах и сплавах. Для Ni коэффициент аномального эффекта Холла отрицателен, но в сплавах с другими металлами меняет знак в области средних концентраций [24], так что положительный знак этого коэффициента в рассматриваемом случае с содержанием Ni 49.7 % не противоречит этой тенденции. Для температурной зависимости R_s соотношения вида $R_s \propto \rho^n$, где $n = 1$ для асимметричного рассеяния и $n = 2$ для собственного механизма и механизма бокового смещения [25], не применимы. Для рассматриваемого случая процедура аппроксимации приводит к $n = 0.7$, что подтверждает неприменимость соотношения вида $R_s \propto \rho^n$ для описания температурной зависимости R_s. Для температурной зависимости R_s в ферромагнитных сплавах в работе [26] была предложена зависимость вида

$$R_s = \alpha\rho + \beta\rho^2. \qquad (2)$$

Здесь первый член описывает асимметричное рассеяние на примесях и интерференционный вклад примесного-фононного рассеяния, и он больше второго члена, описывающего рассеяние на фононах и вклады механизма бокового смещения и собственного механизма. Учет магнитного рассеяния, т. е. рассеяния на температурных флуктуациях магнитного момента, при повышенных температурах не меняет вида зависимости (2). На рис. 5 показано, что соотношение (2) хорошо описывает экспериментальные данные и второй член действительно меньше первого. Таким образом, приходим к выводу, что при «скрытом» МП в низкорезистивных сплавах Гейслера аномальный эффект Холла ведет себя аналогично однородным ферромагнитным сплавам и температурная зависимость коэффициента R_s определяется асимметричным рассеянием и интерференционным рассеянием на фононах и примесях.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мартенситный переход в пленках $Ni_{49.7}Fe_{17.4}Co_{4.2}Ga_{28.7}$ является скрытым, так как происходит в широком диапазоне температур, не сопровождается магнитным фазовым переходом, а намагниченности мартенситной и аустенитной фаз различаются незначительно. Тем не менее мартенситный переход явно проявляется в поведении магнитосопротивления, которое уменьшается в диапазоне 100–250 К при повышении температуры в мартенситной фазе, а затем возрастает в аустенитной фазе. Такое поведение связывается с подавлением антиферромагнитных корреляций при низких температурах и рассеянием на флуктуациях магнитных моментов. Коэффициент аномального эффекта Холла хорошо описывается соотношением $R_s = \alpha\rho + \beta\rho^2$, характерным для однородных ферромагнитных сплавов. Второй член в этом выражении, соответствующий механизмам рассеяния на фононах, собственному механизму и механизму бокового смещения, существенно меньше первого члена. Это указывает на доминирующую роль асимметричного рассеяния и интерференционного примесного-фононного рассеяния для рассматриваемого низкорезистивного состава. Полученные в совокупности экспериментальные данные указывают на незначительные изменения как в суммарной плотности состояний на уровне Ферми, так и в распределении d-состояний с противоположными индексами спина при мартенситном переходе.

Финансирование. Работа поддержана Академией Финляндии (грант № 333805), а также Министерством науки, инноваций и университетов Испании (проект № RTI2018-094683-B-C53-54) и Правительством Страны Басков, Департамент образования (проект № IT1245-19). Один из авторов (М. И. Б.) выражает признательность за поддержку со стороны Фонда развития теоретической физики «БАЗИС» (Россия). Эта работа была частично поддержана Программой НИТУ «МИСиС» от Правительства РФ (грант № К2-2020-018).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Heusler Alloys. Properties, Grows, Applications*, ed. by C. Felser and A. Hirohata, Springer Ser. Mater. Sci. **222** (2016).
2. I. Dubenko, N. Ali, S. Stadler et al., in *Novel Functional Magnetic Materials: Fundamentals and Applications*, ed. by A. Zhukov, Springer Ser. Mater. Sci. **231** (2016).
3. O. Heczko, A. Sozinov, and K. Ullakko, IEEE Trans. Mag. **36**, 3266 (2000).
4. J. Liu, T. Gottschall, K. P.Skokov et al., Nature Matter **11**, 620 (2012).
5. I. Dubenko, N. Ali, S. Stadler et al., Phys. Rev. B **80**, 092408 (2009).
6. V. A. L'vov, V. A. Chernenko, J. M. Barandiaran, in *Novel Functional Materials*: *Fundamentals and Applications*, ed. by A. Zhukov, Springer Ser. Mater. Sci. **231** (2016).
7. C. Phatak, O. Heinonen, M. De Graef, and A. Petford-Long, Nano Lett. **16**, 4141 (2016).
8. X. Xiao, L. Peng, X. Zhao et al., Appl. Phys. Lett. **114**, 142404 (2019).
9. W. Zhang, B. Balasubramanian, A. Ullah et al., Appl. Phys. Lett. **115**, 172404 (2019).
10. P. J. Brown, A. Y. Bargawi, J. Crangle et al., J. Phys.: Condens. Matter **11**, 4715 (1999).
11. P. Klaer, H. C. Herper, P. Entel et al., Phys. Rev. B **88**, 174414 (2013).
12. T. Kihara, X. Xu, W. Ito et al., Phys. Rev. B **90**, 214409 (2014).
13. A. Novikov, A. Sokolov, E. A. Gan'shina et al., J. Magn. Magn. Mater. **432**, 455 (2017).

14. M. Blinov, A. Aryal, S. Pandey et al., Phys. Rev. B **101**, 094423 (2020).

15. S. Pandey, M. I. Blinov, A. Aryal et al., J. Magn. Magn. Mater. **481**, 25 (2019).

16. M. I. Blinov, V. A. Chernenko, V. N. Prudnikov et al., Phys. Rev. B **102**, 064413 (2020).

17. А. Б. Грановский, В. Н. Прудников, А. П. Казаков и др., ЖЭТФ **142**, 916 (2012).

18. F. Li, F. Chen, M. Zhang et al., J. Supercond. and Nov. Magn. **32**, 3183 (2019).

19. V. A. Chernenko, I. R. Aseguinolaza, V. Golub et al., J. Phys. D **50**, 455006 (2017).

20. T. Waeckerle, H. Fraisse, and Q. Furnemont, J. Magn. Magn. Mater. **290–291**, 1584 (2005).

21. H. Rached, D. Rached, R. Khenata et al., Phys. St. Sol. (b) **246**, 1580 (2009).

22. K. Sumida, K. Shirai, S. Zhu et al., Phys. Rev. B **91**, 134417 (2015).

23. N. F. Mott and E. A. Davis, *Electron Processes in Non-Crystalline Materials*, Clarendon Press, Oxford (1979).

24. А. Н. Волошинский, А. Г. Обухов, Н. В. Рыжанова, Л. Ю. Вишенков, ФММ **56**, 1070 (1983).

25. N. Nagaosa, J. Sinova, S. Onoda et al., Rev. Mod. Phys. **82**, 1539 (2010).

26. Е. И. Кондорский, А. В. Черемушкина, А. К. Курбаниязов, ФТТ **539** (1964).

ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 3, стр. 553–562

ПРОВОДИМОСТЬ ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ РЭЛЕЯ ПРИ КРИТИЧЕСКОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ — ПОРОГЕ ПРОТЕКАНИЯ

Б. Я. Балагуров[*]

Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля Российской академии наук
119334, Москва, Россия

Поступила в редакцию 7 ноября 2020 г.,
после переработки 14 ноября 2020 г.
Принята к публикации 14 ноября 2020 г.

Рассмотрена проводимость двумерной модели Рэлея (изотропной матрицы с периодическим расположением круговых включений) при критической концентрации — пороге протекания. В рамках бинарного приближения вычислена эффективная проводимость модели с фазовым переходом металл–идеальный проводник. Для альтернативной модели с фазовым переходом металл–диэлектрик соответствующая эффективная проводимость определена соотношением взаимности Келлера – Дыхне.

DOI: 10.31857/S0044451021030160

1. ВВЕДЕНИЕ

Двумерная модель композита с регулярным расположением включений круговой формы впервые рассмотрена Рэлеем в работе [1]. Для эффективной проводимости σ_e этой модели в [1] были вычислены первые члены разложения соответствующего вириального ряда по степеням малой концентрации включений. Впоследствии решение, позволяющее найти произвольный член этого ряда, было дано разными методами в работах [2, 3] (см. также [4]). Согласно [2, 3] для вычисления проводимости двумерной модели Рэлея необходимо разрешить бесконечную систему алгебраических уравнений. Как показал численный анализ [3], для определения величины σ_e в достаточно широком диапазоне изменения входящих в задачу параметров достаточно ограничиться рассмотрением конечной подсистемы уравнений небольшого размера. В то же время для модели с фазовым переходом этот размер может быть неограниченно большим. Это обстоятельство серьезно затрудняет исследование обсуждаемой задачи численным методом.

В предыдущей работе [5] обсуждаемая задача о проводимости двумерной модели Рэлея с фазовым переходом типа металл–идеальный проводник рассмотрена аналитическим методом в рамках бинарного приближения. В этом приближении исходная проблема сводится к изучению протекания тока через пару соседних круговых включений. При этом потенциал задачи выражается через электростатическую функцию Грина для «тела», состоящего из двух кругов. Для вычисления функции Грина в [5] определена система собственных функций (см. [6,7]) для упомянутого «тела». Использование полученного таким образом потенциала позволило определить эффективную проводимость рассматриваемой модели. Следует отметить, что использованное в работе [5] бинарное приближение тем точнее описывает проводимость рассмотренной двумерной модели, чем ближе она к точке фазового перехода.

В настоящей работе рассмотрена задача о проводимости двумерной модели Рэлея при критической концентрации (пороге протекания), когда происходит соприкосновение соседних кругов. В том же бинарном приближении потенциал выражен через функцию Грина, а та, в свою очередь, — через систему собственных функций для пары соприкасающихся включений. Спецификой этого случая является непрерывность спектра собственных значений и дельта-функционный вид соотношения ортонормированности для поляризационных собственных функций. С помощью найденного потенциала вычислена эффективная проводимость модели в точке фазового перехода типа металл–идеальный проводник. Для альтернативной модели с фазовым переходом типа металл–диэлектрик соответствующая эффективная проводимость определена из со-

[*] E-mail: balagurov@deom.chph.ras.ru, byabalagurov@mail.ru

отношения взаимности Келлера – Дыхне [8,9]. Сравнение полученного результата с гипотезой подобия [10,11] позволяет определить соответствующий критический индекс проводимости.

Знание системы собственных функций для какого-либо макроскопического тела позволяет не только находить соответствующую электростатическую функцию Грина, но и давать решение, например, краевых задач Дирихле и Неймана, а также вычислять поляризуемость этого тела. В качестве примера в Приложении найден тензор дипольной поляризуемости двух соприкасающихся кругов (параллельных круговых цилиндров для трехмерной задачи).

2. БИНАРНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Двумерная модель Рэлея представляет собой изотропную матрицу проводимости σ_1 с системой включений круговой формы радиуса R и проводимости σ_2. Центры кругов расположены в узлах квадратной решетки с периодом $2a$. При критической концентрации $a = R$ — пороге протекания — каждое из включений касается четырех ближайших соседей. При $\sigma_2 \gg \sigma_1$ в подобном двумерном композите происходит фазовый переход типа металл–идеальный проводник. В этом случае проводимость модели в целом определяется областью контакта соседних включений, где ток должен преодолевать низкопроводящую прослойку. Следует ожидать при этом, что ток протекает через эту прослойку в виде узкого канала возле точки соприкосновения включений. Для оценки вклада области контакта в эффективную проводимость воспользуемся, как и в [5], бинарным приближением — рассмотрим пару соседних кругов (см. рис. 1), помещенную в неограниченного размера матрицу. Входящий в эту пару и исходящий из нее токи, расположенные «вдали» от области контакта, представим в виде точечных источника и стока.

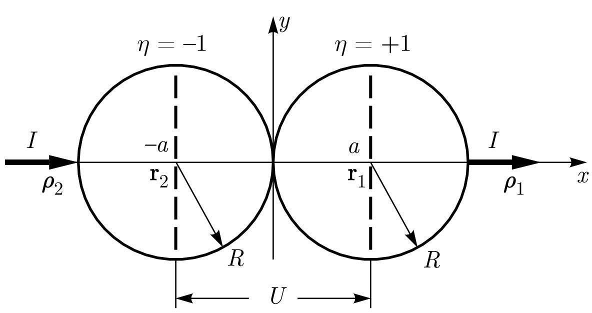


Рис. 1

В данном случае уравнение сохранения тока принимает вид

$$\operatorname{div}\mathbf{j} = I\left\{\delta(\mathbf{r}-\boldsymbol{\rho}_2) - \delta(\mathbf{r}-\boldsymbol{\rho}_1)\right\}. \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{j}$ — плотность тока

$$\mathbf{j} = -\sigma(\mathbf{r})\nabla\varphi(\mathbf{r}), \quad (2)$$

$\sigma(\mathbf{r})$ — проводимость среды, $\varphi(\mathbf{r})$ — электрический потенциал. Положим

$$\sigma(\mathbf{r}) = \sigma_1[1-(1-h)v(\mathbf{r})], \quad h = \sigma_2/\sigma_1, \quad (3)$$

где $v(\mathbf{r}) = 1$ внутри включения и $v(\mathbf{r}) = 0$ вне его. В этом случае уравнение для потенциала принимает вид

$$\nabla\left\{\left[1-(1-h)v(\mathbf{r})\right]\nabla\varphi(\mathbf{r})\right\} = \frac{I}{\sigma_1}\left\{\delta(\mathbf{r}-\boldsymbol{\rho}_1) - \delta(\mathbf{r}-\boldsymbol{\rho}_2)\right\}. \quad (4)$$

Введем, следуя ссылкам [6, 7], функцию Грина $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$, подчиняющуюся уравнению

$$\nabla_{\mathbf{r}}\left\{\left[1-(1-h)v(\mathbf{r})\right]\nabla_{\mathbf{r}}\, G(\mathbf{r},\mathbf{r}')\right\} = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \quad (5)$$

С учетом формулы (5) для потенциала $\varphi(\mathbf{r})$ из уравнения (4) получаем следующее выражение:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{I}{\sigma_1}\left\{G(\mathbf{r},\boldsymbol{\rho}_1) - G(\mathbf{r},\boldsymbol{\rho}_2)\right\}. \quad (6)$$

Величина $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$, подчиняющаяся уравнению (5), определена в [6, 7] с помощью метода собственных функций. Для функции Грина $G(\mathbf{r},\boldsymbol{\rho})$, где ρ принадлежит поверхности тела, имеет место следующее выражение согласно [6, 7]:

$$G(\mathbf{r},\boldsymbol{\rho}) = -\sum_{\nu}\frac{1+\varepsilon_\nu}{h+\varepsilon_\nu}\,\Psi_\nu(\boldsymbol{\rho})\,\psi_\nu(\mathbf{r}) - \sum_k \bar{\Psi}_k(\boldsymbol{\rho})\,\bar{\psi}_k(\mathbf{r}). \quad (7)$$

Здесь вектор $\mathbf{r}$ произволен и может принадлежать как телу, так и пространству вне его.

В выражении (7) $\psi_\nu(\mathbf{r})$ и $\bar{\psi}_k(\mathbf{r})$ — регулярные и обращающиеся в нуль при $r\to\infty$ собственные функции, а $\Psi_\nu(\boldsymbol{\rho})$ и $\bar{\Psi}_k(\boldsymbol{\rho})$ — их значения на поверхности тела при $\mathbf{r}=\boldsymbol{\rho}$. Поляризационные функции $\psi_\nu(\mathbf{r})$, обладающие мультипольной асимптотикой, удовлетворяют уравнению Лапласа внутри (i) и вне (e) тела:

$$\nabla^2\psi_\nu^{(i)}(\mathbf{r}) = 0, \quad \nabla^2\psi_\nu^{(e)}(\mathbf{r}) = 0. \quad (8)$$

На поверхности S тела (при $\mathbf{r} = \boldsymbol{\rho}$) для функции $\psi_\nu(\mathbf{r})$ имеем следующие граничные условия:

$$\psi_\nu^{(e)}\Big|_S = \psi_\nu^{(i)}\Big|_S, \quad \frac{\partial \psi_\nu^{(e)}}{\partial n} = -\varepsilon_\nu \frac{\partial \psi_\nu^{(i)}}{\partial n}. \tag{9}$$

Здесь $\partial/\partial n$ — нормальная производная, $\varepsilon_\nu > 0$ — собственное значение для поляризационного состояния. Система $\{\psi_\nu(\mathbf{r})\}$ ортонормирована по соотношению

$$\int \big(\nabla \psi_\mu(\mathbf{r}) \cdot \nabla \psi_\nu(\mathbf{r})\big)\, d\mathbf{r} = \delta_{\mu\nu}, \tag{10}$$

где интегрирование распространяется на все пространство, или

$$\int \big(\nabla \psi_\mu(\mathbf{r}) \cdot \nabla \psi_\nu(\mathbf{r})\big)[1 - v(\mathbf{r})]\, d\mathbf{r} = \frac{\varepsilon_\nu}{1+\varepsilon_\nu}\, \delta_{\mu\nu}. \tag{11}$$

Здесь интеграл берется по области вне тела.

Функции зарядовых состояний $\bar\psi_k(\mathbf{r})$ вне тела также подчиняются уравнению Лапласа и обладают монопольной асимптотикой. Им отвечает одно и то же собственное значение $\bar\varepsilon_k = \infty$. Для монолитного (неразъемного) тела зарядовая функция $\bar\psi(\mathbf{r})$ одна. На поверхности тела она принимает постоянное значение

$$\bar\psi^{(e)}(\mathbf{r})\big|_S = \bar\Psi = \text{const}. \tag{12}$$

В то же время $\bar\psi^{(i)}(\mathbf{r}) = \bar\Psi$ в любой точке внутри тела.

Разъемному «телу», состоящему из n частей, отвечает n зарядовых функций $\bar\psi_k(\mathbf{r})$, где $k = 1, 2, \ldots, n$. Каждая из них принимает постоянные (вообще говоря, разные) значения на поверхностях частей этого тела.

Функции $\bar\psi_k(\mathbf{r})$ ортонормированы согласно

$$\int \big(\nabla \bar\psi_k(\mathbf{r}) \cdot \nabla \bar\psi_{k'}(\mathbf{r})\big)[1 - v(\mathbf{r})]\, d\mathbf{r} = \delta_{kk'}. \tag{13}$$

Подсистемы поляризационных $\{\psi_\nu(\mathbf{r})\}$ и зарядовых $\{\bar\psi_k(\mathbf{r})\}$ функций взаимно ортогональны:

$$\int \big(\nabla \psi_\nu(\mathbf{r}) \cdot \nabla \bar\psi_k(\mathbf{r})\big)[1 - v(\mathbf{r})]\, d\mathbf{r} = 0. \tag{14}$$

Таким образом, совокупность $\{\psi_\nu(\mathbf{r}), \bar\psi_k(\mathbf{r})\}$ представляет собой ортонормированную систему функций. Заметим, однако, что эта совокупность полной системой не является (см. [6, 7]). Отметим также, что в рассматриваемой в работе двумерной задаче функции с монопольной асимптотикой логарифмически расходятся при $r \to \infty$. В этом случае на зарядовые функции накладывается условие $\bar\psi_k(\mathbf{r}) = 0$ на окружности достаточно большого радиуса. Как будет видно ниже, для соприкасающихся

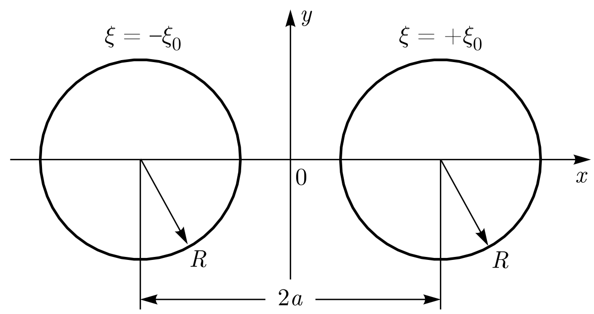


Рис. 2

кругов собственные значения образуют непрерывный спектр, а соотношение ортонормированности для поляризационных собственных функций имеет дельта-функционный вид. В этом случае сумму в формуле (7) следует заменить на соответствующий интеграл.

3. КООРДИНАТНАЯ СИСТЕМА

Задачу определения собственных функций для «тела» в виде соприкасающихся кругов будем решать в биполярной системе координат, соответствующим образом преобразованной. Согласно [12] биполярные координаты (ξ, θ) связаны с декартовыми (x, y) с помощью соотношения

$$x + iy = c \,\text{th}\, \frac{\xi + i\theta}{2}, \tag{15}$$

здесь $-\infty \leqslant \xi \leqslant +\infty$, $0 \leqslant \theta \leqslant 2\pi$. Из (15) следует, что

$$\xi = \frac{1}{2} \ln \frac{(x+c)^2 + y^2}{(x-c)^2 + y^2}, \quad \text{tg}\, \theta = \frac{2cy}{c^2 - x^2 - y^2} \tag{16}$$

и

$$\theta = \pi - \text{arctg}\, \frac{2cy}{r^2 - c^2} \tag{17}$$

при $r = \sqrt{x^2 + y^2} > c$. В ситуации, изображенной на рис. 2, имеем

$$c = \sqrt{a^2 - R^2}, \quad \xi_0 = \ln \frac{a + \sqrt{a^2 - R^2}}{R}. \tag{18}$$

При $a \to R \quad (c \to 0)$ из (16) и (17) следует

$$\xi \approx \frac{2cx}{x^2 + y^2}, \quad \theta \approx \pi - \frac{2cy}{x^2 + y^2} \tag{19}$$

и

$$\xi_0 \approx c/R. \tag{20}$$

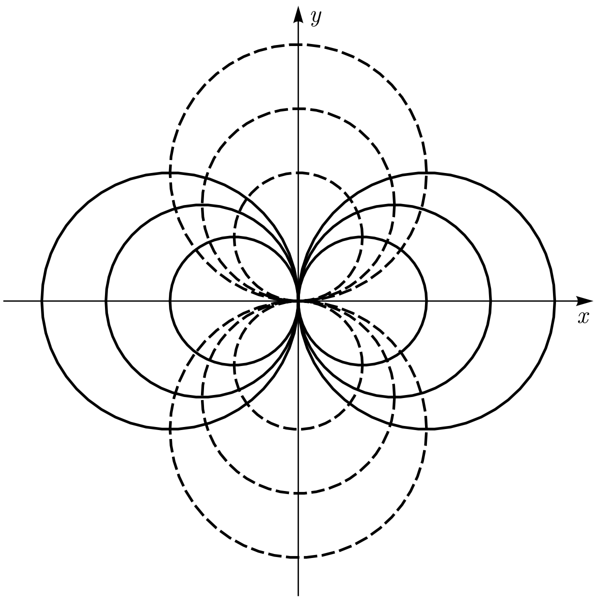


Рис. 3

(Здесь и далее символом $\approx$ обозначается асимптотическое выражение.)

Положим

$$\xi = \xi_0\,\eta, \quad \theta = \pi + \xi_0\,\beta, \tag{21}$$

тогда из (15) получаем

$$x + iy = c\,\mathrm{cth}\,\frac{\xi_0\,(\eta + i\beta)}{2}. \tag{22}$$

Отсюда в пределе $c \to 0$ находим

$$x + iy = \frac{2R}{\eta + i\beta}, \tag{23}$$

так что

$$x = 2R\,\frac{\eta}{\eta^2+\beta^2}, \quad y = -\,2R\,\frac{\beta}{\eta^2+\beta^2} \tag{24}$$

и, соответственно,

$$\eta = 2R\,\frac{x}{x^2+y^2}, \quad \beta = -\,2R\,\frac{y}{x^2+y^2}. \tag{25}$$

Введенные в (23)–(25) величины η и β являются координатами вырожденной биполярной системы.

Координаты η и β изменяются в пределах от $-\infty$ до $+\infty$. При этом $\eta \to 0$, $\beta \to 0$ при $r \to \infty$ и $\eta \to \pm\infty$, $\beta \to \pm\infty$ при $r \to 0$. Значениям $\eta > 0$ отвечает правая полуплоскость $x > 0$, а $\eta < 0$ — левая ($x < 0$). В то же время значению $\beta > 0$ соответствует нижняя полуплоскость ($y < 0$), а $\beta < 0$ — верхняя ($y > 0$).

Координатные линии вырожденной биполярной системы представляют собой два набора взаимно ортогональных окружностей, соприкасающихся в точке $x = 0$, $y = 0$ (см. рис. 3). Действительно, исключая из равенств (24) величину β при $\eta = \mathrm{const}$, получим уравнение

$$\left(x - \frac{R}{\eta}\right)^2 + y^2 = \left(\frac{R}{\eta}\right)^2. \tag{26}$$

Согласно (26) постоянным значениям $\eta = \pm\eta_0$ отвечает пара соприкасающихся окружностей радиуса R/η_0 с центрами в точках $\pm R/\eta_0$ на оси x. Аналогичным образом постоянным $\beta = \pm\beta_0$ отвечает пара соприкасающихся окружностей радиуса R/β_0 с центрами в точках $\pm R/\beta_0$ на оси y.

В вырожденной системе биполярных координат для градиента потенциала φ имеем следующее выражение:

$$\nabla\,\varphi = \frac{\mathbf{e}_\eta}{H_\eta}\,\frac{\partial\varphi}{\partial\eta} + \frac{\mathbf{e}_\beta}{H_\beta}\,\frac{\partial\varphi}{\partial\beta}, \tag{27}$$

где

$$H_\eta = H_\beta = H(\eta,\beta) = \frac{2a}{\eta^2+\beta^2} \tag{28}$$

— коэффициент Ламе. В (27) $\mathbf{e}_\eta$ и $\mathbf{e}_\beta$ — орты нормалей к координатным линиям $\eta = \mathrm{const}$ и $\beta = \mathrm{const}$:

$$\mathbf{e}_\eta = -\,\mathbf{i}_x\,\frac{\eta^2-\beta^2}{\eta^2+\beta^2} + \mathbf{i}_y\,\frac{2\eta\beta}{\eta^2+\beta^2}, \tag{29}$$

$$\mathbf{e}_\beta = -\,\mathbf{i}_x\,\frac{2\eta\beta}{\eta^2+\beta^2} - \mathbf{i}_y\,\frac{\eta^2-\beta^2}{\eta^2+\beta^2}. \tag{30}$$

Здесь $\mathbf{i}_x$ и $\mathbf{i}_y$ — орты декартовых осей x и y соответственно. Отметим, что $\mathbf{e}_\eta$ является единичным вектором внутренней к границе правого круга нормали и внешней — к границе левого.

Уравнение Лапласа в координатах (η,β) принимает вид

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial\eta^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial\beta^2} = 0. \tag{31}$$

В данном случае при решении этого уравнения методом разделения переменных отсутствует, в отличие от работы [5], требование периодичности по одной из координат. Поэтому соответствующая константа разделения принимает произвольные значения, образуя непрерывный спектр.

Регулярные частные решения уравнения (31) для правого включения, конечные при $x \to +0$ ($\eta \to +\infty$), имеют следующий вид:

$$e^{-\nu\eta}\sin\nu\beta, \quad e^{-\nu\eta}\cos\nu\beta. \tag{32}$$

Здесь величина ν положительна и меняется в пределах от 0 до ∞. Для левого включения аналогичные решения отличаются от (32) заменой $e^{-\nu\eta}$ на $e^{\nu\eta}$.

Для исчезающих при $r \to \infty$ $(\eta \to 0,\ \beta \to 0)$ регулярных решений с мультипольной асимптотикой имеем соответственно

$$\begin{gathered}\operatorname{sh}\nu\eta\,\sin\nu\beta, \quad \operatorname{sh}\nu\eta\,\cos\nu\beta,\\ \operatorname{ch}\nu\eta\,\sin\nu\beta, \quad \operatorname{ch}\nu\eta\,\cos\nu\beta - 1\end{gathered} \tag{33}$$

с тем же параметром ν.

Отметим, наконец, что решением уравнения (31) с монопольной (логарифмической) асимптотикой является функция

$$\ln(\eta^2 + \beta^2), \tag{34}$$

или $2\ln(2R/r)$, где $r = \sqrt{x^2+y^2}$, в декартовых координатах.

4. СИСТЕМА СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ

С рассматриваемым включением в виде пары соприкасающихся кругов связаны четыре типа поляризационных собственных функций $\psi_{\lambda\nu}(\mathbf{r}) = \psi_{\lambda\nu}(\eta,\beta)$ $(\lambda = 1,2,3,4)$, которым отвечают двукратно вырожденные собственные значения $\varepsilon_{1\nu} = \varepsilon_{3\nu}$ и $\varepsilon_{2\nu} = \varepsilon_{4\nu}$.

Нормированные функции первого типа $\psi_{1\nu}(\mathbf{r})$ с собственными значениями

$$\varepsilon_{1\nu} = \operatorname{th}\nu \tag{35}$$

имеют вид

$$\psi^{(e)}_{1\nu}(\mathbf{r}) = A_\nu\ \operatorname{ch}\nu\eta\,\sin\nu\beta, \quad |\eta| \leqslant 1, \tag{36}$$

вне включения и

$$\psi^{(1)}_{1\nu}(\mathbf{r}) = A_\nu\ \operatorname{ch}\nu\, e^{-\nu\eta}\ \sin\nu\beta, \quad \eta \geqslant 1, \tag{37}$$

$$\psi^{(2)}_{1\nu}(\mathbf{r}) = A_\nu\ \operatorname{ch}\nu\, e^{\nu\eta}\ \sin\nu\beta, \quad \eta \leqslant -1, \tag{38}$$

внутри правого (1) и левого (2) кругов соответственно. Здесь

$$A_\nu = \sqrt{\frac{1-\varepsilon_{1\nu}}{2\pi\nu}} = \sqrt{\frac{1}{2\pi\nu}\,\frac{e^{-\nu}}{\operatorname{ch}\nu}}. \tag{39}$$

Функции $\psi_{1\nu}(\mathbf{r})$ симметричны по координате x и антисимметричны по y.

Функции второго типа $\psi_{2\nu}(\mathbf{r})$, которым отвечают собственные значения

$$\varepsilon_{2\nu} = \operatorname{cth}\nu, \tag{40}$$

антисимметричны по x и симметричны по y:

$$\psi^{(e)}_{2\nu}(\mathbf{r}) = B_\nu\ \operatorname{sh}\nu\eta\,\cos\nu\beta, \quad |\eta| \leqslant 1, \tag{41}$$

$$\psi^{(1)}_{2\nu}(\mathbf{r}) = B_\nu\ \operatorname{sh}\nu\, e^{-\nu(\eta-1)}\ \cos\nu\beta, \quad \eta \geqslant 1, \tag{42}$$

$$\psi^{(2)}_{2\nu}(\mathbf{r}) = -B_\nu\ \operatorname{sh}\nu\, e^{\nu(\eta+1)}\ \cos\nu\beta, \quad \eta \leqslant -1, \tag{43}$$

где

$$B_\nu = \sqrt{\frac{\varepsilon_{2\nu}-1}{2\pi\nu}} = \sqrt{\frac{1}{2\pi\nu}\,\frac{e^{-\nu}}{\operatorname{sh}\nu}}. \tag{44}$$

Функции третьего типа $\psi_{3\nu}(\mathbf{r})$ с собственными значениями $\varepsilon_{3\nu} = \varepsilon_{1\nu} = \operatorname{th}\nu$ симметричны и по x, и по y:

$$\psi^{(e)}_{3\nu}(\mathbf{r}) = A_\nu\,(\operatorname{ch}\nu\eta\,\cos\nu\beta - 1), \quad |\eta| \leqslant 1, \tag{45}$$

$$\psi^{(1)}_{3\nu}(\mathbf{r}) = A_\nu\left[\operatorname{ch}\nu\, e^{-\nu(\eta-1)}\cos\nu\beta - 1\right], \quad \eta \geqslant 1, \tag{46}$$

$$\psi^{(2)}_{3\nu}(\mathbf{r}) = A_\nu\left[\operatorname{ch}\nu\, e^{\nu(\eta+1)}\cos\nu\beta - 1\right], \quad \eta \leqslant -1. \tag{47}$$

Нормировочный коэффициент A_ν определен в формуле (39).

Функции четвертого типа с собственными значениями $\varepsilon_{4\nu} = \varepsilon_{2\nu} = \operatorname{cth}\nu$ антисимметричны и по x, и по y:

$$\psi^{(e)}_{4\nu}(\mathbf{r}) = B_\nu\ \operatorname{sh}\nu\eta\,\sin\nu\beta, \quad |\eta| \leqslant 1, \tag{48}$$

$$\psi^{(1)}_{4\nu}(\mathbf{r}) = B_\nu\ \operatorname{sh}\nu\, e^{-\nu(\eta-1)}\sin\nu\beta, \quad \eta \geqslant 1, \tag{49}$$

$$\psi^{(2)}_{4\nu}(\mathbf{r}) = -B_\nu\ \operatorname{sh}\nu\, e^{\nu(\eta+1)}\sin\nu\beta, \quad \eta \leqslant -1. \tag{50}$$

Коэффициент B_ν определен в формуле (44).

Зарядовая собственная функция одна:

$$\begin{aligned}\bar\psi^{(e)}(\mathbf{r}) = \bar A\Bigg\{&2\,\ln\frac{L}{2a} + \ln\!\left(\eta^2+\beta^2\right) + \\ &+ 2\int\limits_0^\infty e^{-\nu}\,\frac{\operatorname{ch}\nu\eta\,\cos\nu\beta - 1}{\operatorname{ch}\nu}\,\frac{d\nu}{\nu}\Bigg\},\end{aligned} \tag{51}$$

где

$$\bar A = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}}\left[\ln\frac{L}{2a} + I\right]^{-1/2}, \tag{52}$$

$$J = \int\limits_0^\infty e^{-\nu}\,\frac{\operatorname{ch}\nu - 1}{\operatorname{ch}\nu}\,\frac{d\nu}{\nu}. \tag{53}$$

Выражение (51) принимает постоянное значение при $\eta = \pm 1$, в чем можно убедиться, используя соотношение

$$\ln \frac{\eta^2 + \beta^2}{\eta^2} = 2 \int_0^\infty e^{-\nu|\eta|} \, (1 - \cos \nu\beta) \, \frac{d\nu}{\nu} \tag{54}$$

при $\eta = \pm 1$. Функция $\bar{\psi}(\mathbf{r})$ обращается в нуль при $r = L$, где $L \gg R$. Действительно, в случае больших r имеем

$$r \gg R: \quad \bar{\psi}^{(e)}(\mathbf{r}) \approx 2\,\bar{q}\,\ln \frac{L}{r}. \tag{55}$$

Здесь

$$\bar{q} = \bar{A} \tag{56}$$

— полный заряд рассматриваемого включения.

5. ПОВЕРХНОСТНЫЕ СОБСТВЕННЫЕ ФУНКЦИИ

1. Как отмечено в работах [6, 7], собственные функции образуют полную систему на поверхности S соответствующего тела. Для формулировки соотношения полноты наряду с поверхностным значением функций (аналогами потенциалов)

$$\Psi_\nu(\boldsymbol{\rho}) = \psi_\nu^{(e)}(\mathbf{r})\Big|_{\mathbf{r}=\boldsymbol{\rho}}, \quad \bar{\Psi}_k(\boldsymbol{\rho}) = \bar{\psi}_k^{(e)}(\mathbf{r})\Big|_{\mathbf{r}=\boldsymbol{\rho}} \tag{57}$$

необходимо ввести сопряженные с ними величины

$$\begin{gathered} \Phi_\nu(\boldsymbol{\rho}) = \big(\mathbf{n}\,\nabla\psi_\nu^{(e)}(\mathbf{r})\big)\Big|_{\mathbf{r}=\boldsymbol{\rho}}, \\ \bar{\Phi}_k(\boldsymbol{\rho}) = \big(\mathbf{n}\,\nabla\bar{\psi}_k^{(e)}(\mathbf{r})\big)\Big|_{\mathbf{r}=\boldsymbol{\rho}}, \end{gathered} \tag{58}$$

имеющие смысл плотности поверхностного заряда. В формуле (58) $\mathbf{n}$ — орт внешней к поверхности тела нормали.

Введение системы поверхностных функций позволяет, прежде всего, упростить соотношения ортонормированности:

$$\int_S \Psi_\nu(\boldsymbol{\rho})\,\Phi_{\nu'}(\boldsymbol{\rho})\,d\boldsymbol{\rho} = -\frac{\varepsilon_\nu}{1+\varepsilon_\nu}\,\delta_{\nu\nu'}, \tag{59}$$

$$\int_S \Psi_\nu(\boldsymbol{\rho})\,\bar{\Phi}_k(\boldsymbol{\rho})\,d\boldsymbol{\rho} = 0, \tag{60}$$

$$\int_S \bar{\Psi}_k(\boldsymbol{\rho})\,\Phi_\nu(\boldsymbol{\rho})\,d\boldsymbol{\rho} = 0, \tag{61}$$

$$\int_S \bar{\Psi}_k(\boldsymbol{\rho})\,\bar{\Phi}_{k'}(\boldsymbol{\rho})\,d\boldsymbol{\rho} = -\,\delta_{kk'}. \tag{62}$$

Здесь $d\boldsymbol{\rho} = dS$ — элемент площади, а интегрирование в (59)–(62) проводится по всей поверхности S тела.

Соотношение полноты для системы поверхностных функций имеет вид

$$\sum_\nu \frac{1+\varepsilon_\nu}{\varepsilon_\nu}\,\Psi_\nu(\boldsymbol{\rho})\,\Phi_\nu(\boldsymbol{\rho}') + \sum_k \bar{\Phi}_k(\boldsymbol{\rho})\,\bar{\Phi}_k(\boldsymbol{\rho}') = -\delta(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'). \tag{63}$$

Отметим, что в случае непрерывного спектра собственных значений ε_ν в правой части равенства (59) символ Кронекера $\delta_{\nu\nu'}$ заменяется на дельта-функцию $\delta(\nu - \nu')$, а сумма по ν в соотношении (63) — на соответствующий интеграл.

2. Для рассматриваемого в работе включения поляризационные поверхностные функции выражаются через $\psi_{\lambda\nu}^{(e)}(\eta, \delta)$ следующим образом:

$$\Psi_{\lambda\nu}^{(1)}(\beta) = \psi_{\lambda\nu}^{(e)}(+1, \beta), \quad \Psi_{\lambda\nu}^{(2)}(\beta) = \psi_{\lambda\nu}^{(e)}(-1, \beta), \tag{64}$$

$$\begin{gathered} \Phi_{\lambda\nu}^{(1)}(\beta) = -\frac{1}{H_0}\,\frac{\partial\psi_{\lambda\nu}^{(e)}}{\partial\eta}\bigg|_{\eta=+1}, \\ \Phi_{\lambda\nu}^{(2)}(\beta) = \frac{1}{H_0}\,\frac{\partial\psi_{\lambda\nu}^{(e)}}{\partial\eta}\bigg|_{\eta=-1}, \end{gathered} \tag{65}$$

где $H_0 = H(1, \beta)$ — коэффициент Ламе. Выбор знаков в (65) обусловлен тем, что единичный вектор $\mathbf{e}_\eta$ является ортом внутренней нормали для правой окружности и внешней для левой. Зарядовые поверхностные функции $\bar{\Psi}^{(1)}(\beta)$, $\bar{\Psi}^{(2)}(\beta)$, $\bar{\Phi}^{(1)}(\beta)$ и $\bar{\Phi}^{(2)}(\beta)$ выражаются через $\bar{\psi}^{(e)}(\eta, \beta)$ аналогичным образом.

Используя приведенные в предыдущем разделе выражения для функций $\psi_{\lambda\nu}^{(e)}(\eta, \beta)$ и $\bar{\psi}^{(e)}(\eta, \beta)$, найдем

$$\Psi_{1\nu}^{(1)}(\beta) = \Psi_{1\nu}^{(2)}(\beta) = A_\nu\,\mathrm{ch}\,\nu\,\sin\nu\beta, \tag{66}$$

$$\Psi_{2\nu}^{(1)}(\beta) = -\,\Psi_{2\nu}^{(2)}(\beta) = B_\nu\,\mathrm{sh}\,\nu\,\cos\nu\beta, \tag{67}$$

$$\Psi_{3\nu}^{(1)}(\beta) = \Psi_{3\nu}^{(2)}(\beta) = A_\nu\,\big(\mathrm{ch}\,\nu\,\cos\nu\beta - 1\big), \tag{68}$$

$$\Psi_{4\nu}^{(1)}(\beta) = -\Psi_{4\nu}^{(2)}(\beta) = B_\nu\,\mathrm{sh}\,\nu\,\sin\nu\beta\,; \tag{69}$$

$$\Phi_{1\nu}^{(1)}(\beta) = \Phi_{1\nu}^{(2)}(\beta) = -\frac{\nu\,A_\nu}{H(1,\beta)}\,\mathrm{sh}\,\nu\,\sin\nu\beta, \tag{70}$$

$$\Phi^{(1)}_{2\nu}(\beta) = -\Phi^{(2)}_{2\nu}(\beta) = -\frac{\nu\, B_\nu}{H(1,\beta)}\,\mathrm{ch}\,\nu\cos\nu\beta, \tag{71}$$

$$\Phi^{(1)}_{3\nu}(\beta) = \Phi^{(2)}_{3\nu}(\beta) = -\frac{\nu\, A_\nu}{H(1,\beta)}\,\mathrm{sh}\,\nu\cos\nu\beta, \tag{72}$$

$$\Phi^{(1)}_{4\nu}(\beta) = -\Phi^{(2)}_{4\nu}(\beta) = -\frac{\nu\, B_\nu}{H(1,\beta)}\,\mathrm{ch}\,\nu\sin\nu\beta. \tag{73}$$

Зарядовые функции равны

$$\bar\Psi = 2\,\bar A\left[\ln\frac{R}{2a} + I\right], \tag{74}$$

$$\bar\Phi(\beta) = -\frac{\bar A}{H(1,\beta)}\,\frac{\pi}{\mathrm{ch}\,\dfrac{\pi\beta}{2}} \tag{75}$$

с коэффициентом $\bar A$ из формулы (52) и величиной J из (53). При выводе выражения (75) использовано равенство

$$\int\limits_0^\infty \frac{\cos bx}{\mathrm{ch}\,ax}\,dx = \frac{\pi}{2a\,\mathrm{ch}\,\dfrac{\pi b}{2a}}. \tag{76}$$

Найденная система поверхностных функций (66)–(75) ортонормирована по соотношениям

$$\sum_{\sigma=1}^{2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\Psi^{(\sigma)}_{\lambda\nu}(\beta)\,\Phi^{(\sigma)}_{\lambda'\nu'}(\beta)\,H(1,\beta)\,d\beta = -\frac{\varepsilon_{\lambda\nu}}{1+\varepsilon_{\lambda\nu}}\,\delta_{\lambda\lambda'}\,\delta(\nu-\nu'), \tag{77}$$

$$\sum_{\sigma=1}^{2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\bar\Psi^{(\sigma)}\,\Phi^{(\sigma)}_{\lambda\nu}(\beta)\,H(1,\beta)\,d\beta = 0, \tag{78}$$

$$\sum_{\sigma=1}^{2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\Psi^{(\sigma)}_{\lambda\nu}(\beta)\,\bar\Phi^{(\sigma)}(\beta)\,H(1,\beta)\,d\beta = 0, \tag{79}$$

$$\sum_{\sigma=1}^{2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\bar\Psi^{(\sigma)}\,\bar\Phi^{(\sigma)}(\beta)\,H(1,\beta)\,d\beta = -\,1. \tag{80}$$

Из равенств (77) и (80) определялись нормировочные коэффициенты A_ν, B_ν и $\bar A$, приведенные в предыдущем разделе.

Соотношение полноты в данном случае принимает вид

$$\sum_{\lambda=1}^{4}\int\limits_0^\infty \frac{1+\varepsilon_{\lambda\nu}}{\varepsilon_{\lambda\nu}}\,\Psi^{(\sigma)}_{\lambda\nu}(\beta)\,\Phi^{(\sigma')}_{\lambda\nu}(\beta')\,d\nu + {}+\,\bar\Psi^{(\sigma)}(\beta)\,\bar\Phi^{(\sigma')}(\beta') = -\,\delta_{\sigma\sigma'}\,\frac{\delta(\beta-\beta')}{H(1,\beta)}. \tag{81}$$

Нетрудно убедиться, что подстановка выражений (66)–(75) обращает это равенство в тождество.

6. ПОТЕНЦИАЛ

1. Искомый потенциал $\varphi(\mathbf r)$ рассматриваемой задачи находим подстановкой общего выражения для функций Грина $G(\rho,\mathbf r)$, имеющей в данном случае вид

$$G(\rho,\mathbf r) = -\sum_{\lambda=1}^{4}\int\limits_0^\infty d\nu\,\frac{1+\varepsilon_{\lambda\nu}}{h+\varepsilon_{\lambda\nu}}\,\Psi_{\lambda\nu}(\boldsymbol\rho)\,\psi_{\lambda\nu}(\mathbf r) - {} -\,\bar\Psi(\boldsymbol\rho)\,\bar\psi(\mathbf r), \tag{82}$$

в формулу (6). В результате получаем

$$\varphi(\mathbf r) = -2\frac{I}{\sigma_1}\int\limits_0^\infty d\nu\,\frac{1+\varepsilon_{2\nu}}{h+\varepsilon_{2\nu}}\,\Psi_{2\nu}(\boldsymbol\rho_1)\,\psi_{2\nu}(\mathbf r). \tag{83}$$

Здесь вектор $\mathbf r$ — любой, а вектор $\boldsymbol\rho_1$ равен $(2R,0)$ в декартовых координатах и $(1,0)$ в вырожденных биполярных.

Для потенциалов вне включений ($|\eta|\leqslant 1$) и внутри правого круга ($\eta\geqslant 1$) имеем соответственно

$$\varphi^{(e)}(\mathbf r) = -\frac{I}{\pi\sigma_1}\int\limits_0^\infty \frac{d\nu}{\nu}\,\frac{1}{h+\mathrm{cth}\,\nu}\,\frac{\mathrm{sh}\,\nu\eta}{\mathrm{sh}\,\nu}\cos\nu\beta, \tag{84}$$

$$\varphi^{(1)}(\mathbf r) = -\frac{I}{\pi\sigma_1}\int\limits_0^\infty \frac{d\nu}{\nu}\,\frac{e^{-\,\nu(\eta-1)}}{h+\mathrm{cth}\,\nu}\,\cos\nu\beta. \tag{85}$$

Как следует из формул (84), (85), потенциал непрерывен на границе ($\eta=+1$) правого круга. Кроме того, выполняется граничное условие

$$\left.\frac{\partial\varphi^{(e)}}{\partial\eta}\right|_{\eta=+1} - h\left.\frac{\partial\varphi^{(1)}}{\partial\eta}\right|_{\eta=+1} = -\frac{I}{\sigma_1}\,\delta(\beta), \tag{86}$$

следующее из уравнения (4).

2. Используя формулу (84), для плотности тока на оси y (при $\eta = 0$) имеем

$$j(0,y) = -\sigma_1 \left[\frac{1}{H(\eta,\beta)}\,\frac{\partial\varphi^{(1)}}{\partial\eta}\right]_{\eta=0}. \qquad (87)$$

С учетом $H(0,\beta) = 2R/\beta^2$ из (87) получим выражение

$$j(0,y) = \frac{I}{2\pi R}\,\beta^2 \int\limits_0^\infty d\nu\,\frac{\operatorname{cth}\nu}{h+\operatorname{cth}\nu}\cos\nu\beta. \qquad (88)$$

При $h \gg 1$ в интеграле из (88) существенны $\nu \ll \ll 1$:

$$j(0,y) = \frac{I}{2\pi R}\,\beta^2 \int\limits_0^\infty d\nu\,\frac{\cos\nu\beta}{1+h\nu}. \qquad (89)$$

Представим это выражение в следующем виде:

$$j(0,y) = \langle j\rangle\,\frac{h}{\pi}\,g(\gamma), \quad \langle j\rangle = \frac{I}{2R}, \qquad (90)$$

где

$$j(\gamma) = \gamma^2 \int\limits_0^\infty \frac{\cos\gamma t}{1+t}\,dt, \quad \gamma = \frac{2R}{hy}. \qquad (91)$$

Здесь $\langle j\rangle$ — средняя плотность тока и учтено, что при $\eta = 0$ величина $\beta = -\,2R/y$.

Для упрощения анализа выражения (91) преобразуем величину $g(\gamma)$ следующим образом. Введем функцию

$$F(\gamma) = \gamma^2 \int\limits_0^\infty \frac{\cos\gamma t}{1+t}\,e^{-\,x(1+t)}\,dt, \qquad (92)$$

так что

$$F(0) = g(\gamma), \quad F(\infty) = 0. \qquad (93)$$

Для производной $F'(x)$ соответствующий интеграл может быть вычислен в явном виде:

$$F'(x) = -\,\gamma^2\,e^{-\,x}\,\frac{x}{x^2+\gamma^2}, \qquad (94)$$

откуда с учетом определений (93) находим

$$g(\gamma) = \gamma^2 \int\limits_0^\infty e^{-\,x}\,\frac{x dx}{x^2+\gamma^2}. \qquad (95)$$

Отсюда при больших значениях параметра γ получаем

$$\gamma \gg 1: \quad g(\gamma) \approx 1 - \frac{6}{x^2} + \ldots \qquad (96)$$

При малых значениях γ проведем в выражении (95) интегрирование по частям. В результате получим

$$g(\gamma) = \gamma^2 \left\{ \ln\frac{1}{\gamma} + \frac{1}{2}\int\limits_0^\infty e^{-\,x}\,\ln(x^2+\gamma^2)\,dx \right\}, \qquad (97)$$

откуда следует

$$\gamma \ll 1: \quad g(\gamma) \simeq \ln\frac{1}{\gamma} - \mathbb{C}, \qquad (98)$$

где

$$\mathbb{C} = -\int\limits_0^\infty e^{-\,x}\,\ln x\,dx = 0.577\ldots \qquad (99)$$

— постоянная Эйлера.

Согласно (96)–(98) при рассматриваемых значениях $h \gg 1$ плотность тока имеет острый пик высотой $j(0,0) = \langle j\rangle\,\dot{h}/\pi \gg \langle j\rangle$ (в точке контакта включений) шириной приблизительно $R/h \ll R$.

Этот результат подтверждает справедливость обсуждавшейся в разд. 2 картины протекания тока в модели с фазовым переходом типа металл–идеальный проводник. При этом в пределе $h \to \infty$ плотность тока $j \approx h \to \infty$ при $y = 0$ и $j = 0$ при $y \neq 0$. Следовательно, величина j в этом пределе принимает дельта-функционный вид: $j(0,y) = = \mathrm{const}\cdot\delta(y)$. Определяя обычным образом эту константу, получим, что

$$j(0,y) = I\,\delta(y) \qquad (100)$$

в пределе $h \to \infty$. Последний результат означает, что использованное в работе бинарное приближение в пределе $h \to \infty$ становится точным.

7. ЭФФЕКТИВНАЯ ПРОВОДИМОСТЬ

Так как эффективная проводимость σ_e модели в целом совпадает с проводимостью отдельной ячейки, то

$$\sigma_e = \frac{I}{U}. \qquad (101)$$

Здесь I — полный ток, текущий через ячейку, U — приложенная к ней разность потенциалов и учтено, что $a \approx R$. В соответствии с рис. 2 величина U выражается через потенциал $\varphi(\mathbf{r})$ следующим образом:

$$U = \varphi^{(2)}(\mathbf{r}_2) - \varphi^{(1)}(\mathbf{r}_1) = -\,2\,\varphi^{(1)}(\mathbf{r}_1) \qquad (102)$$

с $\varphi^{(1)}(\mathbf{r})$ из формулы (85) при $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 = (R,0)$. Точке $x = R$, $y = 0$ соответствуют вырожденные биполярные координаты $(\eta_1, 0)$, где, как следует из определений (25), $\eta_1 = 2$.

Вычисляя с помощью выражения (85) для $\varphi^{(1)}(\mathbf{r})$ разность потенциалов U, найдем величину σ_e, которую представим в виде

$$\frac{1}{\sigma_e} = \frac{2}{\pi\sigma_1} \int\limits_0^\infty \frac{d\nu}{\nu} \frac{e^{-\nu}}{h + \operatorname{cth}\nu}. \tag{103}$$

Выражением (103) для σ_e, справедливым при $h = \sigma_2/\sigma_1 \gg 1$, дается эффективная проводимость исследуемой модели с фазовым переходом металл–идеальный проводник при критической концентрации — пороге протекания.

Величину σ_e как функцию ее аргументов запишем в виде

$$\sigma_e = \sigma_e(p; \sigma_1, \sigma_2), \tag{104}$$

где p — безразмерная концентрация (доля занимаемой площади) первой компоненты матрицы, σ_1 и σ_2 — проводимости матрицы и включений соответственно. Отметим, что в выражении (103) концентрация p равна критической $p_c = 1 - \pi/4$. Эффективная проводимость альтернативной модели с фазовым переходом типа металл–диэлектрик может быть найдена из полученных выше результатов с помощью так называемого соотношения взаимности Келлера–Дыхне [8,9]. Как отмечено в этих работах (см. также книгу [4]), в двумерном случае имеет место соотношение, связывающее эффективные проводимости взаимных, отличающихся друг от друга заменой $\sigma_1 \rightleftarrows \sigma_2$, систем:

$$\sigma_e(p; \sigma_1, \sigma_2)\, \sigma_e(p; \sigma_2, \sigma_1) = \sigma_1\sigma_2. \tag{105}$$

Введя безразмерную эффективную проводимость f согласно

$$\sigma_e(p; \sigma_1, \sigma_2) = \sigma_1\, f(p, h), \quad h = \frac{\sigma_2}{\sigma_1}, \tag{106}$$

приведем равенство (105) к следующему виду:

$$f(p, h)\, f(p, 1/h) = 1. \tag{107}$$

Из этого соотношения, используя выражение (103), после замены $h \to 1/h$ находим безразмерную эффективную проводимость модели с фазовым переходом типа металл–диэлектрик при критической концентрации:

$$f(p_c, h) = \frac{2}{\pi}\, h \int\limits_0^\infty \frac{d\nu}{\nu} \frac{\operatorname{th}\nu}{h + \operatorname{th}\nu}\, e^{-\nu}. \tag{108}$$

Выражение (108) справедливо при $h \ll 1$.

Для оценки $f(p_c, h)$ при малых h разобьем интеграл из (108) на две части, введя величину ν_0 такую, что $h \leqslant \nu_0 \leqslant 1$:

$$f(p_c, h) = \frac{2}{\pi}\, h \left\{ \int\limits_0^{\nu_0} \frac{d\nu}{\nu} \frac{\operatorname{th}\nu}{h + \operatorname{th}\nu}\, e^{-\nu} + \int\limits_{\nu_0}^\infty \frac{d\nu}{\nu} \frac{\operatorname{th}\nu}{h + \operatorname{th}\nu}\, e^{-\nu} \right\}. \tag{109}$$

Для первого интеграла имеем

$$\int\limits_0^{\nu_0} \frac{d\nu}{\nu} \frac{\operatorname{th}\nu}{h + \operatorname{th}\nu}\, e^{-\nu} \simeq \int\limits_0^{\nu_0} \frac{d\nu}{h + \nu} \simeq \ln\frac{\nu_0}{h}. \tag{110}$$

Для второго интеграла получаем

$$\int\limits_{\nu_0}^\infty \frac{d\nu}{\nu} \frac{\operatorname{th}\nu}{h + \operatorname{th}\nu}\, e^{-\nu} \simeq \int\limits_{\nu_0}^\infty e^{-\nu}\, \frac{d\nu}{\nu}. \tag{111}$$

Отсюда, интегрируя по частям, находим

$$\int\limits_{\nu_0}^\infty e^{-\nu}\, \frac{d\nu}{\nu} = e^{-\nu}\, \ln\nu \Big|_{\nu_0}^\infty + \int\limits_{\nu_0}^\infty e^{-\nu}\, \ln\nu\, d\nu \simeq -\ln\nu_0 - \mathbb{C}, \tag{112}$$

где $\mathbb{C}$ — постоянная Эйлера, определенная согласно (99). В результате получаем окончательно

$$f(p_c, h) = \frac{2}{\pi}\, h \left(\ln\frac{1}{h} - \mathbb{C} \right). \tag{113}$$

В соответствии со сказанным в предыдущем разделе, следует ожидать, что в пределе $h \to 0$ выражение (113) является точным.

В рамках гипотезы подобия [10, 11] величина $f(p_c, h)$ описывается степенно́й функцией:

$$f(p_c, h) \sim h^s, \tag{114}$$

где s — второй критический индекс проводимости. В выражении (114) пренебрегается возможной логарифмической зависимостью. Поэтому следует считать, что в (113) $s = 1$. Отметим, что численные исследования проводимости двумерной модели Рэлея [3] дает оценку $s \approx 0.95$.

Благодарности. Автор выражает благодарность Д. А. Головневой и Н. А. Хлопотуновой за помощь в подготовке рукописи статьи к печати.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Знание системы собственных функций для некоторого макроскопического тела дает возможность определить его дипольную поляризуемость.

В случае тела, помещенного в однородное электрическое поле напряженности $\mathbf{E}_0$, соответствующий потенциал $\varphi(\mathbf{r})$ имеет следующую асимптотику (двумерный случай):

$$r \to \infty: \quad \varphi(\mathbf{r}) \approx -\big(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}\big) + 2\,\frac{\big(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}\big)}{r^2} + \ldots \qquad (\text{A}.1)$$

Здесь

$$\mathbf{p} = \hat{\Lambda}\,\mathbf{E}_0 \qquad (\text{A}.2)$$

— дипольный момент тела, $\hat{\Lambda}$ — его тензор дипольной поляризуемости. Для составляющих этого тензора согласно [6, 7] имеем

$$\Lambda_{\alpha\beta} = -4\pi(1-\varepsilon)\sum_{\nu}\frac{d_{\nu\alpha}\,d_{\nu\beta}}{\varepsilon+\varepsilon_\nu}, \qquad (\text{A}.3)$$

где $\mathbf{d}_\nu$ — аналог дипольного момента в асимптотике поляризационной собственной функции:

$$r \to \infty: \quad \psi_\nu(\mathbf{r}) \approx 2\,\frac{\big(\mathbf{r}\cdot\mathbf{d}_\nu\big)}{r^2} + \ldots \qquad (\text{A}.4)$$

В формуле (A.3) ε — диэлектрическая проницаемость тела. В случае непрерывного спектра собственных значений ε_ν в (A.3) вместо суммы должен стоять интеграл.

Для пары соприкасающихся кругов дипольным поведением при $r \to \infty$ обладают функции $\psi_{2\nu}^{(e)}(\mathbf{r})$ и $\psi_{1\nu}^{(e)}(\mathbf{r})$. Для соответствующих дипольных моментов имеем

$$\mathbf{d}_{2\nu} = \nu\,B_\nu\,R\mathbf{i}_x, \quad \mathbf{d}_{1\nu} = \nu\,A_\nu\,R\mathbf{i}_y. \qquad (\text{A}.5)$$

Для составляющих тензора дипольной поляризуемости $\hat{\Lambda}$ получаем

$$\Lambda_{xx} = -\,2R^2\int\limits_0^\infty \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon+\operatorname{cth}\nu}\,\frac{e^{-\,\nu}}{\operatorname{sh}\nu}\,\nu\,d\nu, \qquad (\text{A}.6)$$

$$\Lambda_{yy} = -\,2R^2\int\limits_0^\infty \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon+\operatorname{th}\nu}\,\frac{e^{-\,\nu}}{\operatorname{ch}\nu}\,\nu\,d\nu. \qquad (\text{A}.7)$$

Отметим, что выражения (A.6), (A.7) удовлетворяют равенствам

$$\Lambda_{xx}(\varepsilon) = -\,\Lambda_{yy}(1/\varepsilon), \quad \Lambda_{yy}(\varepsilon) = -\,\Lambda_{xx}(1/\varepsilon), \quad (\text{A}.8)$$

являющихся следствием соотношения взаимности (см. [4]).

В двух частных случаях, используя формулы

$$\int\limits_0^\infty \frac{x\,dx}{e^x-1} = \frac{\pi^2}{6}, \quad \int\limits_0^\infty \frac{x\,dx}{e^x+1} = \frac{\pi^2}{12}, \qquad (\text{A}.9)$$

получим

$$\Lambda_{xx} = -\,\frac{\pi^2R^2}{12}, \quad \Lambda_{yy} = -\,\frac{\pi^2R^2}{6} \qquad (\text{A}.10)$$

при $\varepsilon = 0$ и

$$\Lambda_{xx} = \frac{\pi^2R^2}{6}, \quad \Lambda_{yy} = \frac{\pi^2R^2}{12} \qquad (\text{A}.11)$$

при $\varepsilon = \infty$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lord Rayleigh, Phil. Mag. S. **34**, №211, 481 (1892).
2. W. T. Perrins, D. B. McKenzie, and B. C. McPhedran, Proc. Roy. Soc. Lond. A **369**, 207 (1979).
3. Б. Я. Балагуров, В. А. Кашин, ЖЭТФ **117**, 978 (2000).
4. Б. Я. Балагуров, *Электрофизические свойства композитов. Макроскопическая теория*, URSS, Москва (2015).
5. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **157**, 669 (2020).
6. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **94**, 95 (1988).
7. Б. Я. Балагуров, *Метод собственных функций в макроскопической электростатике*, URSS, Москва (2016).
8. J. B. Keller, J. Math. Phys. **5**, 548 (1964).
9. А. М. Дыхне, ЖЭТФ **59**, 110 (1970).
10. A. L. Efros and B. I. Shrlovskii, Phys. Stat. Sol. (b) **76**, 475 (1976).
11. J. P. Straley, J. Phys. C **9**, 783 (1976).
12. Ф. М. Морс, Г. Фешбах, *Методы теоретической физики*, т. II, Изд-во иностр. лит., Москва (1960).

ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 3, стр. 563–568

ЭЛЕКТРОН-ЭЛЕКТРОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ И СОПРОТИВЛЕНИЕ В МЕТАЛЛАХ БЕЗ ЦЕНТРА ИНВЕРСИИ

В. П. Минеев *

Université Grenoble Alpes, CEA, IRIG, PHELIQS
F-38000, Grenoble, France

Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 23 ноября 2020 г.,
после переработки 23 ноября 2020 г.
Принята к публикации 24 ноября 2020 г.

Квадратичная зависимость сопротивления от температуры в металлах при низких температурах обусловлена релаксацией импульса при межэлектронных столкновениях, сопровождаемых процессами переброса или рассеянием на примесях. В металлах без центра инверсии спин-орбитальное взаимодействие электронов с кристаллической решеткой снимает спиновое вырождение состояний и расщепляет каждую энергетическую зону на две зоны. Температурная зависимость скорости релаксации за счет электрон-электронных столкновений определятся из матричного кинетического уравнения, включающего внутризонные и межзонные процессы рассеяния электронов на примесях и электронов на электронах. Показано, что в достаточно чистом случае, когда расщепление зон превосходит скорость рассеяния электронов на примесях и в то же время мало по сравнению с энергией Ферми, квадратичная зависимость сопротивления от температуры остается справедливой.

DOI: 10.31857/S0044451021030172

1. ВВЕДЕНИЕ

Низкотемпературная зависимость сопротивления нормальных металлов,

$$\rho = \rho_0 + AT^2, \tag{1}$$

определяется рассеянием электронов на электронах, сопровождаемым процессами переброса со скоростью релаксации [1, 2]

$$\frac{1}{\tau_{ee}} \propto \frac{V^2}{\varepsilon_F^2}\frac{T^2}{\varepsilon_F}. \tag{2}$$

Здесь V — амплитуда экранированного потенциала межэлектронного взаимодействия, ε_F — энергия Ферми. Обычно величина $1/\tau_{ee}$ весьма мала, и температурная зависимость (1) наблюдается лишь в металлах с очень узкой зоной проводимости и в соединениях с тяжелыми фермионами с малой энергией Ферми. В отсутствие процессов переброса в металлах и полупроводниках с единственной зоной проводимости электрон-электронное рассеяние не дает вклада в сопротивление, и оно целиком определяется рассеянием на примесях [3]. Однако в многозонных металлах вклад от столкновений электронов из разных зон выживает [4–7] и определяет температурную зависимость сопротивления согласно уравнению (1).

Квадратичная температурная зависимость возникает, поскольку из-за принципа Паули электроны могут рассеиваться друг на друге лишь в узком слое шириной порядка температуры вблизи поверхности Ферми. Это свойство сохраняется также в металлах с несколькими зонами проводимости.

В металлах без центра инверсии спин-орбитальное взаимодействие расщепляет поверхность Ферми каждой из зон проводимости на две поверхности с разными импульсами Ферми. Найденная в работе [8] скорость релаксации импульса благодаря электрон-электронным столкновениям равна

$$\frac{1}{\tau_{ee}} \propto \frac{(2\pi T)^2 + (v_F \Delta k_F)^2}{\varepsilon_F}. \tag{3}$$

* E-mail: vladimir.mineev@cea.fr

Здесь v_F — скорость Ферми, $\Delta k_F = k_{F+} - k_{F-}$ — разность импульсов Ферми. Выражение (3) фактически означает, что в металлах без центра инверсии остаточное сопротивление при $T = 0$ сильно увеличивается из-за расщепления зон спин-орбитальным взаимодействием. Однако вычисления в работе [8] были проделаны с использованием интеграла электрон-электронного рассеяния в форме, неприменимой в металлах, не обладающих пространственной четностью. Правильный интеграл столкновений был найден в следующей работе [9], где был подтвержден результат (3). И в той, и в другой работе вычисления были проведены с использованием законов дисперсии $\xi_\pm(k) = v_F(k - k_{F\pm})$ электронов в двух энергетических зонах, расщепленных спин-орбитальным взаимодействием. Каждое из этих выражений верно вблизи соответствующей поверхности Ферми с импульсами Ферми k_{F+} и k_{F-}. Но выражение для $\xi_+(k)$ неверно вблизи поверхности Ферми с импульсом k_{F-}, равно как и выражение для $\xi_-(k)$ неверно вблизи поверхности Ферми с импульсом k_{F+}. Эта ошибка исправлена в настоящей работе.

Аналитический вывод зависимости (2) в случае поверхности Ферми произвольной формы невозможен даже в однозонном металле с центром инверсии. Дело в том, что длина импульса Ферми меняется от точки к точке на поверхности Ферми. Все известные выводы сделаны при явном или неявном предположении, что изменение длины импульса Ферми значительно меньше его средней длины. В дополнение к этому условию мы будем также предполагать малость энергии расщепления зон по сравнению с энергией Ферми:

$$\varepsilon_F \gg v_F \Delta k_F. \tag{4}$$

Кинетические явления в металле без центра инверсии описываются кинетическим уравнением для матричной функции распределения. Пренебрежение недиагональными матричными элементами возможно, когда энергия расщепления зон велика по сравнению со скоростью рассеяния электронов на примесях, на электронах и т. д. Скорость электрон-электронного рассеяния всегда мала по сравнению со скоростью рассеяния электронов на примесях, $1/\tau_i$. Таким образом, мы будем предполагать выполнение условия

$$v_F \Delta k_F \gg \frac{1}{\tau_i}. \tag{5}$$

Статья организована следующим образом. В следующем разделе приведены кинетические уравнения для электронного газа в металлах без центра инверсии. Расчеты, представленные в третьем разделе, показывают, что при выполнении условий (4) и (5) низкотемпературная зависимость скорости релаксации импульса в металлах без центра инверсии дается уравнением (2).

2. КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ В МЕТАЛЛАХ БЕЗ ЦЕНТРА ИНВЕРСИИ

Спектр невзаимодействующих электронов в металлах без центра инверсии имеет вид

$$\hat\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k})\sigma_0 + \boldsymbol{\gamma}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \tag{6}$$

Здесь $\varepsilon(\mathbf{k})$ — не зависящая от спина часть спектра, σ_0 — единичная матрица 2×2 в спиновом пространстве, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ — матрицы Паули. Второе слагаемое в уравнении (6) описывает спин-орбитальное взаимодействие, соответствующее симметрии данной кристаллической структуры. Псевдовектор $\boldsymbol{\gamma}(\mathbf{k})$ — периодическая функция волнового вектора, такая что $\boldsymbol{\gamma}(-\mathbf{k}) = -\boldsymbol{\gamma}(\mathbf{k})$ и $g\boldsymbol{\gamma}(g^{-1}\mathbf{k}) = \boldsymbol{\gamma}(\mathbf{k})$, где g — любая из операций симметрии точечной группы $\mathcal{G}$ кристалла. Вблизи точки Γ в случае кубической симметрии имеем

$$\boldsymbol{\gamma}(\mathbf{k}) = \gamma\mathbf{k}. \tag{7}$$

Здесь γ — постоянный множитель. В случае тетрагональной точечной группы $\mathcal{G} = \mathbf{C}_{4v}$ антисимметричное спин-орбитальное взаимодействие,

$$\boldsymbol{\gamma}(\mathbf{k}) = \gamma(k_y\hat{x} - k_x\hat{y}) + \gamma_\parallel k_x k_y k_z (k_x^2 - k_y^2)\hat{z}, \tag{8}$$

в чисто двумерном случае (при $\gamma_\parallel = 0$) известно как взаимодействие Рашба [10].

Собственные значения и собственные векторы матрицы (6) имеют вид

$$\varepsilon_\pm(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) \pm |\boldsymbol{\gamma}(\mathbf{k})|, \tag{9}$$

$$\begin{aligned} \Psi_\sigma^+(\mathbf{k}) &= C_\mathbf{k} \begin{pmatrix} \hat\gamma_{\mathbf{k}z} + 1 \\ \hat\gamma_{\mathbf{k}x} + i\hat\gamma_{\mathbf{k}y} \end{pmatrix}, \\ \Psi_\sigma^-(\mathbf{k}) &= C_\mathbf{k} \begin{pmatrix} -\hat\gamma_{\mathbf{k}x} + i\hat\gamma_{\mathbf{k}y} \\ \hat\gamma_{\mathbf{k}z} + 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{10}$$

где $C_\mathbf{k} = (2(\hat\gamma_{\mathbf{k}z} + 1))^{-1/2}$, $\hat{\boldsymbol{\gamma}}_\mathbf{k} = \boldsymbol{\gamma}(\mathbf{k})/|\boldsymbol{\gamma}(\mathbf{k})|$. Собственные векторы удовлетворяют соотношениям ортогональности:

$$\Psi_\sigma^{\alpha*}(\mathbf{k})\Psi_\sigma^\beta(\mathbf{k}) = \delta_{\alpha\beta}, \quad \Psi_{\sigma_1}^\alpha(\mathbf{k})\Psi_{\sigma_2}^{\alpha*}(\mathbf{k}) = \delta_{\sigma_1\sigma_2}. \tag{11}$$

Здесь и во всех последующих формулах подразумевается суммирование по повторяющимся спиновым $\sigma =\uparrow, \downarrow$ и зонным $\alpha = +, -$ индексам.

Имеются две поверхности Ферми с различными импульсами Ферми $\mathbf{k}_{F\pm}$, определяемые уравнениями

$$\varepsilon_\pm(\mathbf{k}) = \mu, \tag{12}$$

где μ — химический потенциал. В случае двумерной модели Рашба и в трехмерном изотропном случае

$$k_{F\pm} = \mp m\gamma + \sqrt{2m\mu + (m\gamma)^2}, \tag{13}$$

а скорости Ферми на двух поверхностях Ферми совпадают:

$$\mathbf{v}_{F\pm} = \left.\frac{\partial(\varepsilon_\pm(\mathbf{k}))}{\partial\mathbf{k}}\right|_{k=k_{F\pm}} = \hat{\mathbf{k}}\sqrt{\frac{2\mu}{m} + \gamma^2}. \tag{14}$$

Здесь $\hat{\mathbf{k}}$ — единичный вектор вдоль импульса $\mathbf{k}$. Равенство скоростей на разных поверхностях Ферми — специфическое свойство модели с изотропным спин-орбитальным взаимодействием (7) в трехмерном случае и модели Рашба в двумерном.

Матрица равновесного распределения электронов имеет вид

$$\hat{n} = \frac{n(\varepsilon_+) + n(\varepsilon_-)}{2}\sigma_0 + \frac{n(\varepsilon_+) - n(\varepsilon_-)}{2|\boldsymbol{\gamma}|}\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{\sigma}. \tag{15}$$

Здесь

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left(\dfrac{\varepsilon-\mu}{T}\right) + 1} \tag{16}$$

— функция Ферми.

Эрмитовы матрицы неравновесных распределений в зонном и спиновом представлениях связаны друг с другом преобразованием

$$f_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \Psi^{\alpha*}_{\sigma_1}(\mathbf{k}) n_{\sigma_1\sigma_2}\Psi^{\beta}_{\sigma_2}(\mathbf{k}). \tag{17}$$

В зонном представлении матрица равновесного распределения диагональна:

$$n_{\alpha\beta} = \Psi^{\alpha*}_{\sigma_1}(\mathbf{k}) n_{\sigma_1\sigma_2}\Psi^{\beta}_{\sigma_2}(\mathbf{k}) = \\ = \begin{pmatrix} n(\varepsilon_+) & 0 \\ 0 & n(\varepsilon_-) \end{pmatrix}_{\alpha\beta}. \tag{18}$$

Недиагональные элементы $f_{+-}(\mathbf{k})$ и $f_{-+}(\mathbf{k})$ отличны от нуля только в неравновесных состояниях.

Кинетическое уравнения для матричной функции распределения электронов в металлах без центра инверсии выведено в работе [9]. Соответствующее условие стационарности во внешнем электрическом поле $\mathbf{E}$ имеет вид

$$e\begin{pmatrix} (\mathbf{v}_+\cdot\mathbf{E})\dfrac{\partial n(\varepsilon_+)}{\partial\varepsilon_+} & (\mathbf{v}_\pm\cdot\mathbf{E})(n(\varepsilon_-) - n(\varepsilon_+)) \\ (\mathbf{v}_\mp\cdot\mathbf{E})(n(\varepsilon_+) - n(\varepsilon_-)) & (\mathbf{v}_-\cdot\mathbf{E})\dfrac{\partial n(\varepsilon_-)}{\partial\varepsilon_-} \end{pmatrix} + \\ + \begin{pmatrix} 0 & i(\varepsilon_- - \varepsilon_+)f_\pm(\mathbf{k}) \\ i(\varepsilon_+ - \varepsilon_-)f_\mp(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} = \hat{I}^i + \hat{I}^{ee}. \tag{19}$$

Здесь

$$\mathbf{v}_\alpha(\mathbf{k}) = \frac{\partial\varepsilon_\alpha}{\partial\mathbf{k}}, \quad \mathbf{v}_\pm(\mathbf{k}) = \Psi^{+*}_\sigma(\mathbf{k})\frac{\partial\Psi^-_\sigma(\mathbf{k})}{\partial\mathbf{k}}, \\ \mathbf{v}_\mp = -\mathbf{v}^*_\pm. \tag{20}$$

В борновском приближении интеграл столкновений $I^i_{\alpha\beta}$ электронов с примесями имеет вид

$$I^i_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = 2\pi n_{imp}\int\frac{d^3k'}{(2\pi)^3}|V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')|^2 \times \\ \times \{O_{\alpha\nu}(\mathbf{k},\mathbf{k}')[f_{\nu\mu}(\mathbf{k}')O_{\mu\beta}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) - \\ - O_{\nu\mu}(\mathbf{k}',\mathbf{k})f_{\mu\beta}(\mathbf{k})]\delta(\varepsilon'_\nu - \varepsilon_\beta) + \\ + [O_{\alpha\nu}(\mathbf{k},\mathbf{k}')f_{\nu\mu}(\mathbf{k}') - f_{\alpha\nu}(\mathbf{k})O_{\nu\mu}(\mathbf{k},\mathbf{k}')] \times \\ \times O_{\mu\beta}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\delta(\varepsilon'_\mu - \varepsilon_\alpha)\}. \tag{21}$$

Здесь введены обозначения $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_\alpha(\mathbf{k})$, $\varepsilon'_\mu = \varepsilon_\mu(\mathbf{k}')$ и т. д. Функции

$$O_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \Psi^{\alpha*}_\sigma(\mathbf{k})\Psi^\beta_\sigma(\mathbf{k}') \tag{22}$$

удовлетворяют соотношениям $O_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\mathbf{k}') = O^*_{\beta\alpha}(\mathbf{k}',\mathbf{k})$. Интеграл межэлектронных столкновений в борновском приближении дается выражением [9]

$$\hat{I}^{ee}(\mathbf{k}) = 2\pi\int\frac{d^3k''}{(2\pi)^3}\frac{d^3k_2}{(2\pi)^3}\hat{F}(\mathbf{k},\mathbf{k}_2,\mathbf{k}',\mathbf{k}''), \tag{23}$$

где $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}'' - \mathbf{Q}$ и $\mathbf{Q}$ — вектор обратной решетки. Здесь и во всех остальных формулах мы работаем в системе единиц с постоянной Планка $\hbar = 1$. Матрица $\hat{F}$ есть

$$
\begin{aligned}
F_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\mathbf{k}_2,\mathbf{k}',\mathbf{k}'') = \frac{1}{2}W_1\{[O_{\alpha\nu}(\mathbf{k},\mathbf{k}')f_{\nu\mu}(\mathbf{k}')\times \\
\times O_{\mu\lambda}(\mathbf{k}',\mathbf{k})(\delta_{\lambda\beta}-f_{\lambda\beta}(\mathbf{k}))(\delta_{\xi\eta}-f_{\xi\eta}(\mathbf{k}_2))O_{\eta\zeta}(\mathbf{k}_2,\mathbf{k}'')\times \\
\times f_{\zeta\rho}(\mathbf{k}'')O_{\rho\xi}(\mathbf{k}'',\mathbf{k}_2) - O_{\alpha\nu}(\mathbf{k},\mathbf{k}')(\delta_{\nu\mu}-f_{\nu\mu}(\mathbf{k}'))\times \\
\times O_{\mu\lambda}(\mathbf{k}',\mathbf{k})f_{\lambda\beta}(\mathbf{k})\, f_{\xi\eta}(\mathbf{k}_2)O_{\eta\zeta}(\mathbf{k}_2,\mathbf{k}'')(\delta_{\zeta\rho}-f_{\zeta\rho}(\mathbf{k}''))\times \\
\times O_{\rho\xi}(\mathbf{k}'',\mathbf{k}_2)]\delta(\varepsilon'_\nu-\varepsilon_\beta-\varepsilon_{2\xi}+\varepsilon''_\zeta)+ \\
+[(\delta_{\alpha\nu}-f_{\alpha\nu}(\mathbf{k}))O_{\nu\mu}(\mathbf{k},\mathbf{k}')f_{\mu\lambda}(\mathbf{k}')O_{\lambda\beta}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\times \\
\times(\delta_{\xi\eta}-f_{\xi\eta}(\mathbf{k}_2))O_{\eta\zeta}(\mathbf{k}_2,\mathbf{k}'')f_{\zeta\rho}(\mathbf{k}'')O_{\rho\xi}(\mathbf{k}'',\mathbf{k}_2)- \\
-f_{\alpha\nu}(\mathbf{k}))O_{\nu\mu}(\mathbf{k},\mathbf{k}')(\delta_{\mu\lambda}-f_{\mu\lambda}(\mathbf{k}'))\times \\
\times O_{\lambda\beta}(\mathbf{k}',\mathbf{k})f_{\xi\eta}(\mathbf{k}_2)O_{\eta\zeta}(\mathbf{k}_2,\mathbf{k}'')(\delta_{\zeta\rho}-f_{\zeta\rho}(\mathbf{k}''))\times \\
\times O_{\rho\xi}(\mathbf{k}'',\mathbf{k}_2)]\delta(\varepsilon_\alpha-\varepsilon'_\mu+\varepsilon_{2\xi}-\varepsilon''_\zeta)\}+ \\
+\frac{1}{2}W_2\{[O_{\alpha\nu}(\mathbf{k},\mathbf{k}')f_{\nu\mu}(\mathbf{k}')O_{\mu\lambda}(\mathbf{k}',\mathbf{k}_2)\times \\
\times(\delta_{\lambda\xi}-f_{\lambda\xi}(\mathbf{k}_2))O_{\xi\zeta}(\mathbf{k}_2,\mathbf{k}'')f_{\zeta\rho}(\mathbf{k}''))O_{\rho\omega}(\mathbf{k}'',\mathbf{k})\times \\
\times(\delta_{\omega\beta}-f_{\omega\beta}(\mathbf{k})O_{\alpha\nu}(\mathbf{k},\mathbf{k}')(\delta_{\nu\mu}-f_{\nu\mu}(\mathbf{k}'))O_{\mu\lambda}(\mathbf{k}',\mathbf{k}_2)\times \\
\times f_{\lambda\xi}(\mathbf{k}_2)O_{\xi\zeta}(\mathbf{k}_2,\mathbf{k}'')(\delta_{\zeta\rho}-f_{\zeta\rho}(\mathbf{k}''))O_{\rho\omega}(\mathbf{k}'',\mathbf{k})\times \\
\times f_{\omega\beta}(\mathbf{k}]\delta(\varepsilon'_\nu-\varepsilon_\beta-\varepsilon_{2\xi}+\varepsilon''_\zeta)+ \\
+[(\delta_{\alpha\nu}-f_{\alpha\nu}(\mathbf{k})O_{\nu\mu}(\mathbf{k},\mathbf{k}')f_{\mu\lambda}(\mathbf{k}')O_{\lambda\xi}(\mathbf{k}',\mathbf{k}_2)\times \\
\times(\delta_{\xi\zeta}-f_{\xi\zeta}(\mathbf{k}_2))O_{\zeta\rho}(\mathbf{k}_2,\mathbf{k}'')f_{\rho\omega}(\mathbf{k}''))O_{\omega\beta}(\mathbf{k}'',\mathbf{k})- \\
-f_{\alpha\nu}(\mathbf{k})O_{\nu\mu}(\mathbf{k},\mathbf{k}')(\delta_{\mu\lambda}-f_{\mu\lambda}(\mathbf{k}'))O_{\lambda\rho}(\mathbf{k}',\mathbf{k}_2)f_{\rho\xi}(\mathbf{k}_2)\times \\
\times O_{\xi\zeta}(\mathbf{k}_2,\mathbf{k}'')(\delta_{\zeta\omega}-f_{\zeta\omega}(\mathbf{k}''))\times \\
\times O_{\omega\beta}(\mathbf{k}'',\mathbf{k})]\delta(\varepsilon_\alpha-\varepsilon'_\mu+\varepsilon_{2\xi}-\varepsilon''_\zeta)\}. \quad (24)
\end{aligned}
$$

Здесь W_1 и W_2 — зависящие от импульсов амплитуды кулоновского и обменного взаимодействий. В металле, благодаря экранировке заряда, их можно считать постоянными.

Недиагональные члены в левой части матричного кинетического уравнения (19) пропорциональны энергии расщепления зон, в то время как интегральные члены в правой части пропорциональны различным внутризонным и межзонным скоростям релаксации при рассеянии электронов на примесях и из-за электрон-электронного рассеяния. Скорость электрон-электронного рассеяния всегда мала по сравнению со скоростью электронного рассеяния на примесях. Следовательно, если энергия расщепления зон превышает скорость рассеяния электронов на примесях,

$$
v_F(k_{F-}-k_{F+}) \gg 1/\tau_i, \quad (25)
$$

то можно пренебречь интегралами столкновений в недиагональных слагаемых матричного кинетического уравнения (19) и использовать бесстолкновительные решения для недиагональных членов функции распределения:

$$
f_\pm = \frac{e(\mathbf{v}_\pm\cdot\mathbf{E})(n_- - n_+)}{i(\varepsilon_- - \varepsilon_+)}, \quad (26)
$$

$$
f_\mp = \frac{e(\mathbf{v}_\mp\cdot\mathbf{E})(n_+ - n_-)}{-i(\varepsilon_+ - \varepsilon_-)}. \quad (27)
$$

В стационарном случае вклад этих недиагональных членов в электрический ток равен нулю [9]. С другой стороны, подстановка этих выражений в диагональную часть матричных интегралов столкновений (21) и (24) позволяет пренебречь в них всеми членами, содержащими недиагональные элементы матричной функции распределения, поскольку они будут в $\gamma k_F\tau_i \gg 1$ раз меньше, чем члены с диагональными элементами.

Тогда система уравнений (19) для функции

$$
f_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} f_+(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & f_-(\mathbf{k}) \end{pmatrix}_{\alpha\beta} \quad (28)
$$

приобретает следующий вид:

$$
(\mathbf{v}_+\cdot\mathbf{E})\frac{\partial n(\varepsilon_+)}{\partial\varepsilon_+} = I^i_+ + I^{ee}_+, \quad (29)
$$

$$
(\mathbf{v}_-\cdot\mathbf{E})\frac{\partial n(\varepsilon_-)}{\partial\varepsilon_-} = I^i_- + I^{ee}_-, \quad (30)
$$

где

$$
\begin{aligned}
I^i_+ = 4\pi n_i\int\frac{d^3k}{2\pi^3}|V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')|^2 O_{++}(\mathbf{k},\mathbf{k}')O_{++}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\times \\
\times[f_+(\mathbf{k}')-f_+(\mathbf{k})]\delta(\varepsilon'_+-\varepsilon_+)+O_{+-}(\mathbf{k},\mathbf{k}')O_{-+}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\times \\
\times[f_-(\mathbf{k}')-f_+(\mathbf{k}))]\delta(\varepsilon'_- -\varepsilon_+)\}, \quad (31)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
I^{ee}_+ = 2\pi\int\frac{d^3k''}{(2\pi)^3}\frac{d^3k_2}{(2\pi)^3}\{W_1[O_{+\nu}(\mathbf{k},\mathbf{k}'))O_{\nu+}(\mathbf{k}',\mathbf{k}))\times \\
\times O_{\xi\zeta}(\mathbf{k}_2,\mathbf{k}'')O_{\zeta\xi}(\mathbf{k}'',\mathbf{k}_2)]+W_2[O_{+\nu}(\mathbf{k},\mathbf{k}'))O_{\nu\xi}(\mathbf{k}',\mathbf{k}_2))\times \\
\times O_{\xi\zeta}(\mathbf{k}_2,\mathbf{k}'')O_{\zeta+}(\mathbf{k}'',\mathbf{k})]\}\{f_\nu(\mathbf{k}')(1-f_+(\mathbf{k}))\times \\
\times(1-f_\xi(\mathbf{k}_2))f_\zeta(\mathbf{k}'')-(1-f_\nu(\mathbf{k}'))f_+(\mathbf{k})f_\xi(\mathbf{k}_2)\times \\
\times(1-f_\zeta(\mathbf{k}''))\}\delta(\varepsilon'_\nu-\varepsilon_+-\varepsilon_{2\xi}+\varepsilon''_\zeta). \quad (32)
\end{aligned}
$$

Соответствующие выражения для I^i_- и I^{ee}_- получаются заменой зонных индексов («+» $\leftrightarrow$ «−»).

Таким образом, мы пришли к системе двух уравнений с интегралами столкновений, включающими как внутризонные, так и межзонные электронные процессы рассеяния.

3. СКОРОСТЬ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА ЭЛЕКТРОНАХ

Решение уравнений такого рода с учетом процессов переброса является трудной задачей. Даже для однозонного металла с центром инверсии и сферической поверхностью Ферми аналитическое решение может быть найдено только путем применения вариационной процедуры [11]. В отсутствие процессов переброса, $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}''$, решить эту проблему можно так, как это было сделано в работе [7] для двухзонного металла с центром инверсии.

Левые части уравнений (29) и (30) ведут себя как дельта-функции вблизи поверхности Ферми соответствующей зоны. Таким образом, следуя обычной процедуре линеаризации, можно искать решение для отклонений функций распределения от равновесной в виде

$$\delta f_\alpha(\mathbf{k}) = f_\alpha(\mathbf{k}) - n(\varepsilon_\alpha) = c_\alpha(\mathbf{v}_\alpha \cdot \mathbf{E})\frac{\partial n(\varepsilon_\alpha)}{\partial \varepsilon_\alpha}, \quad (33)$$

$$\delta f_\alpha(\mathbf{k}_2) = f_\alpha(\mathbf{k}_2) - n(\varepsilon_{2\alpha}) = c_\alpha(\mathbf{v}_{2\alpha} \cdot \mathbf{E})\frac{\partial n(\varepsilon_{2\alpha})}{\partial \varepsilon_{2\alpha}} \quad (34)$$

и т. д. Затем, умножая уравнение (29) и уравнение (30) соответственно на $\mathbf{v}_+$ и $\mathbf{v}_-$ и интегрируя по $\mathbf{k}$, мы придем к системе двух линейных алгебраических уравнений для коэффициентов c_+ и c_-. Однако для установления температурной зависимости времени электронно-электронной релаксации нет необходимости воспроизводить эти громоздкие расчеты. Для этого достаточно в уравнениях (29) и (30) оставить только члены с $\delta f_\alpha(\mathbf{k}) = f_\alpha(\mathbf{k}) - n(\varepsilon_\alpha)$, пренебрегая остальными членами, пропорциональными $\delta f_\alpha(\mathbf{k}_2)$, и т. д. Конечно, этот трюк отнюдь не дает решений кинетических уравнений. Но, ввиду одинаковой зависимости от энергии всех членов в подынтегральном выражении, полный расчет дает ту же температурную зависимость электронно-электронной релаксации, что и в результате применения указанного приема. Таким образом, игнорируя не зависящий от температуры вклад от рассеяния электронов на примесях, получаем

$$\begin{aligned}(\mathbf{v}_+ \cdot \mathbf{E})\frac{\partial n(\varepsilon_+)}{\partial \varepsilon_+} = -2\pi\delta f_+(\mathbf{k})\int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3}\frac{d^3k_2}{(2\pi)^3} \times \\ \times \{W_1[O_{+\nu}(\mathbf{k},\mathbf{k}'))O_{\nu+}(\mathbf{k}',\mathbf{k}))O_{\xi\zeta}(\mathbf{k}_2,\mathbf{k}'') \times \\ \times O_{\zeta\xi}(\mathbf{k}'',\mathbf{k}_2)] + W_2[O_{+\nu}(\mathbf{k},\mathbf{k}'))O_{\nu\xi}(\mathbf{k}',\mathbf{k}_2)) \times \\ \times O_{\xi\zeta}(\mathbf{k}_2,\mathbf{k}'')O_{\zeta+}(\mathbf{k}'',\mathbf{k})]\}\{n(\varepsilon'_\nu)(1-n(\varepsilon_{2\xi}))n(\varepsilon''_\zeta) + \\ + (1-n(\varepsilon'_\nu))n(\varepsilon_{2\xi})(1-n(\varepsilon''_\zeta))\} \times \\ \times \delta(\varepsilon'_\nu - \varepsilon_+ - \varepsilon_{2\xi} + \varepsilon''_\zeta), \quad (35)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(\mathbf{v}_- \cdot \mathbf{E})\frac{\partial n(\varepsilon_-)}{\partial \varepsilon_-} = \\ = -2\pi\delta f_-(\mathbf{k})\int \frac{d^3k''}{(2\pi)^3}\frac{d^3k_2}{(2\pi)^3} \times \{+ \longrightarrow -\}. \quad (36)\end{aligned}$$

Чтобы принять во внимание сохранение энергии, необходимо перейти от интегрирования по импульсам к интегрированию по энергиям. Даже для однозонного металла с центром инверсии эту процедуру можно выполнить аналитически только в случае почти сферической формы поверхности Ферми. Для металла без центра инверсии с изотропным спектром

$$\varepsilon_\pm(\mathbf{k}) = \frac{k^2}{2m} \pm \gamma k, \quad (37)$$

следуя процедуре, разработанной в работе [12] и воспроизведенной несколько иным образом в работе [13], в пренебрежении членами порядка $\gamma k_F/\varepsilon_F$ получаем

$$\begin{aligned}d^3k''d^3k_2 = m^3\frac{\sin\theta\, d\theta\, d\phi\, d\phi_2}{2\cos(\theta/2)} \times \\ \times \left[1 + \mathcal{O}\left(\frac{\gamma k_F}{\varepsilon_F}\right)\right] d\varepsilon''_\zeta d\varepsilon_{2\xi} d\varepsilon. \quad (38)\end{aligned}$$

Здесь θ — угол между $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}_2$, ϕ — азимутальный угол $\mathbf{k}_2$ вокруг направления $\mathbf{k}$, а ϕ_2 — угол между плоскостями $(\mathbf{k},\mathbf{k}_2)$ и $(\mathbf{k}',\mathbf{k}'')$. С такой же точностью можно считать множители $O_{\alpha\beta}(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ функциями, зависящими только от углов между векторами $\mathbf{k},\mathbf{k}_2,\mathbf{k}',\mathbf{k}''$.

Интегрирование по ε'_ν сводится к замене $\varepsilon'_\nu = \varepsilon_+ + \varepsilon_{2\xi} - \varepsilon''_\zeta$. Затем, выполняя интегрирование по ε''_ζ и $\varepsilon_{2\xi}$, получаем

$$\begin{aligned}(\mathbf{v}_+ \cdot \mathbf{E})\frac{\partial n(\varepsilon_+)}{\partial \varepsilon_+} = \\ = -m^3[(\pi T)^2 + (\varepsilon_+ - \mu)^2]I_+\delta f_+(\mathbf{k}), \quad (39)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(\mathbf{v}_- \cdot \mathbf{E})\frac{\partial n(\varepsilon_-)}{\partial \varepsilon_-} = \\ = -m^3[(\pi T)^2 + (\varepsilon_- - \mu)^2]I_-\delta f_-(\mathbf{k}), \quad (40)\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}I_+ = \int \frac{\sin\theta\, d\theta\, d\phi\, d\phi_2}{2(2\pi)^5\cos(\theta/2)}\{W_1[O_{+\nu}(\mathbf{k},\mathbf{k}'))O_{\nu+}(\mathbf{k}',\mathbf{k})) \times \\ \times O_{\xi\zeta}(\mathbf{k}_2,\mathbf{k}'')O_{\zeta\xi}(\mathbf{k}'',\mathbf{k}_2)] + W_2[O_{+\nu}(\mathbf{k},\mathbf{k}'))O_{\nu\xi}(\mathbf{k}',\mathbf{k}_2)) \times \\ \times O_{\xi\zeta}(\mathbf{k}_2,\mathbf{k}'')O_{\zeta+}(\mathbf{k}'',\mathbf{k})]\}, \quad (41)\end{aligned}$$

I_- получается из I_+ заменой $+ \to -$. Подставляя $\delta f_+(\mathbf{k})$ и $\delta f_-(\mathbf{k})$ в выражение для плотности тока

$$\mathbf{j} = e^2\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\{\mathbf{v}_+\delta f_+(\mathbf{k}) + \mathbf{v}_-\delta f_-(\mathbf{k})\} \quad (42)$$

и выполняя интегрирование, мы приходим к выражению

$$\mathbf{j} = \frac{e^2 v_F^2}{3\pi^2 m^3 T^2} \left\{ \frac{N_{0+}}{I_+} + \frac{N_{0-}}{I_-} \right\} \mathbf{E}, \tag{43}$$

где $N_{0\pm} = mk_{F\pm}/2\pi^2$ — плотности состояний в зонах $\pm$. Таким образом, при условии выполнения сделанных при выводе ограничений, скорость релаксации импульса, определяемая рассеянием электронов на электронах, и сопротивление в металлах без центра инверсии при низких температурах имеют обычную температурную зависимость, соответствующую формулам (2) и (1).

Упомянутый выше полный вывод с учетом всех членов в уравнениях (29)–(32), включая и рассеяние на примесях, приводит к такой же температурной зависимости проводимости.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе показано, что в металлах без центра инверсии электронно-электронные столкновения дают тот же вклад в низкотемпературную зависимость сопротивления, что и в обычных металлах без нарушения пространственной четности. Предыдущие вычисления [8, 9], посвященные той же задаче, привели к неверному результату (3) из-за использования неправильных формул для законов дисперсии электронов.

Настоящие вычисления были выполнены в предположении, что расщепление зон спин-орбитальным взаимодействием велико по сравнению со скоростью рассеяния электронов на примесях и в то же время мало по сравнению с энергией Ферми. При этих условиях электронно-электронное рассеяние порождает обычную квадратичную температурную зависимость удельного сопротивления при низких температурах и не вносит дополнительного вклада в остаточное удельное сопротивление металла при $T = 0$.

Как и в обычных металлах с центром инверсии, квадратичная температурная зависимость, определяемая электронно-электронными столкновениями, может быть подавлена из-за существенной анизотропии поверхности Ферми.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, И. Я. Померанчук, ЖЭТФ **7**, 379 (1937) [Phys. Zs. Sowjetunion **10**, 649 (1936)].

2. А. А. Абрикосов, *Основы теории металлов*, Физматлит, Москва (2010).

3. R. W. Keyes, J. Phys. Chem. Sol. **6**, 1 (1958).

4. В. Ф. Гантмахер, И. Б. Левинсон, ЖЭТФ **74**, 261 (1978) [Sov. Phys. JETP **47**, 133 (1978)].

5. J. Appel and A. W. Overhauser, Phys. Rev. B **18**, 758 (1978).

6. S. S. Murzin, S. I. Dorozhkin, G. Landwehr, and A. C. Gossard, Письма в ЖЭТФ **67**, 101 (1998) [JETP Lett. **67**, 113 (1998)].

7. H. K. Pal, V. I. Yudson, and D. L. Maslov, Lith. J. Phys. **52**, 142 (2012).

8. V. P. Mineev, Phys. Rev. B **98**, 165121 (2018).

9. В. П. Минеев, ЖЭТФ **156**, 750 (2019) [JETP **129**, 700 (2019)]; Поправка, ЖЭТФ **157**, 1131 (2020) [JETP **130**, 955 (2020)].

10. Э. И. Рашба, ФТТ **2**, 1224 (1960) [E. I.Rashba, Sov. Phys. Sol. St. **2**, 1109 (1960)].

11. J. M. Ziman, *Electrons and Phonons*, Oxford, Clarendon Press (1960).

12. A. A. Abrikosov and I. M. Khalatnikov, Rep. Progr. Phys. **22**, 329 (1959).

13. G. Baym and C. Pethick, in *Physics of Liquid and Solid Helium*, ed. by K. H. Bennemann and J. B. Ketterson, Wiley, New York (1978), Vol. 2, Ch. 2.

ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 3, стр. 569–572

НУЛИ ДЗЕТА-ФУНКЦИИ РИМАНА НА ЛИНИИ $z = 1/2 + it_0$ II

Ю. Н. Овчинников *

Max-Planck Institute for Physics of Complex Systems
01187, Dresden, Germany

Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 19 ноября 2020 г.,
после переработки 19 ноября 2020 г.
Принята к публикации 19 ноября 2020 г.

Показано, что все нетривиальные нули дзета-функции Римана расположены на линии $z = 1/2 + it_0$ и могут быть поделены на две группы: нормальные, номер которых однозначно восстанавливается по величине корня, и аномальные номера, для однозначного восстановления номера которых требуется знание величины еще двух соседних корней (левого и правого). Использованные методы анализа могут быть полезны при исследовании физики явлений, связанных с проскальзыванием фазы.

DOI: 10.31857/S0044451021030184

1. ВВЕДЕНИЕ

Дзета-функция Римана возникает во многих задачах физики низких температур, связанных с аналитическим продолжением с целочисленных точек в температурной технике (техника Мацубары) [1], а также при исследовании динамических процессов, приводящих к проскальзыванию фазы (эффект Джозефсона, диссипация тока в квазиодномерных сверхпроводниках). Поведение дзета-функции в полосе $0 < x < 1$ весьма сложное и используемые методы исследования могут быть полезны во многих физических задачах. Равно как и при рассмотрении физических задач могут возникнуть нетривиальные соотношения между функциями Эйлера и дзета-функцией Римана [2]. Возможность установления точного номера любого нетривиального корня дзета-функции по его значению означает сильную корреляцию нулей на больших расстояниях при сохранении сравнительно больших отклонений расстояний между соседними нулями от квазисреднего.

2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Для исследования мы воспользуемся методом, изложенным в работе [3]. Следуя ему, мы определяем аналитические функции $\{\phi, \eta\}$, связанные с двумя функциями: гамма-функцией Эйлера $\Gamma(z)$ и дзета-функцией Римана ζ. Положим

$$z = 1/2 + it = 1/2 + \nu + it_0. \tag{1}$$

Аналитическая функция ϕ в полосе $|\nu| < 1/2$, $t_0 \gg 1$ имеет следующее асимптотическое разложение [3]:

$$\phi(t) = \frac{t}{2}\left(\ln\frac{t}{2} - \ln\pi - 1\right) - \frac{\pi}{8} + \frac{1}{48t}. \tag{2}$$

На линии Стокса ($\nu = 0$) выполняется уравнение [3]

$$\begin{aligned} &2e^{-\eta_2(t_0)}\cos(\phi(t_0) + \eta_1(t_0)) = \\ &= e^{i\phi(t_0)}\frac{D_1 + iD_2}{1 - \sqrt{2}\cos(t_0\ln 2) + i\sqrt{2}\sin(t_0\ln 2)} + \\ &+ e^{-i\phi(t_0)}\frac{D_1 - iD_2}{1 - \sqrt{2}\cos(t_0\ln 2) - i\sqrt{2}(t_0\ln 2)}, \end{aligned} \tag{3}$$

где

$$\begin{gathered} \eta = \eta_1 + i\eta_2, \\ D_1 = (1 - 2^{-1/2-\nu}\cos(t_0\ln 2)) + \\ + \sum_{k=2}^{\infty}\left(\frac{\cos(t_0\ln(2k-1))}{(2k-1)^{1/2+\nu}} - \frac{\cos(t_0\ln(2k))}{(2k)^{1/2+\nu}}\right), \\ D_2 = 2^{-1/2-\nu}\sin(t_0\ln 2) - \\ - \sum_{k=2}^{\infty}\left(\frac{\sin(t_0\ln(2k-1))}{(2k-1)^{1/2+\nu}} - \frac{\sin(t_0\ln(2k))}{(2k)^{1/2+\nu}}\right). \end{gathered} \tag{4}$$

* E-mail: ovc@itp.ac.ru

На линии Стокса функция η_1 удовлетворяет условию

$$|\eta_1| < \pi. \tag{5}$$

В нуле дзета-функции с номером N на линии Стокса выполняются следующие два уравнения:

$$\frac{1}{\pi}(\phi(t_0^{(N)}) + \eta_1(t_0^{(N)})) = N - \frac{3}{2}, \tag{6}$$

$$\left.\frac{\partial \eta_1(t_0)}{\partial t_0}\right|_{t_0^{(N)}} = 0. \tag{7}$$

Из уравнений (3), (6) находим значение функции η_2 в нулях дзета-функции $t_0^{(N)}$:

$$\eta_2(t_0^{(N)}) = -\ln\left.\left((-1)^{(N+1)}\frac{\partial\mu}{\partial t_0}\Big/\frac{\partial\phi}{\partial t_0}\right)\right|_{t_0^{(N)}}, \tag{8}$$

где

$$\mu(t_0) = \\ = \frac{1}{2}\left\{e^{i\phi(t_0)}\frac{D_1 + iD_2}{1-\sqrt{2}\cos(t_0\ln 2)+i\sqrt{2}\sin(t_0\ln 2)} + \right. \\ \left. + e^{-i\phi(t_0)}\frac{D_1 - iD_2}{1-\sqrt{2}\cos(t_0\ln 2)-i\sqrt{2}\sin(t_0\ln 2)}\right\}. \tag{9}$$

Уравнения (5), (6) существенно улучшают классический результат, приведенный в [4]. Неравенство (5) позволяет разделить все нетривиальные нули дзета-функции на два подмножества: нормальные нули, если $|\eta_1| < \pi/2$, и аномальные при $\pi/2 < \eta_1 < < \pi$. Слева и справа от аномального нуля находятся нормальные нули, поэтому легко установить, является ли данный нуль нормальным или нет. Для этого достаточно найти номера левого (правого) нулей в приближении $|\eta| < \pi/2$. Если номера левого (правого) нуля окажутся равными $\{N-2, N\}$ или $\{N, N+2\}$, то данный нуль является аномальным и имеет номер $\{N-1\}$ в первом случае и $\{N+1\}$ во втором. В противном случае данный номер является нормальным и имеет номер $\{N\}$.

Значения функций $(\eta_1,\eta_2)|_{t_0\neq t_0^{(N)}}$ могут быть найдены из уравнения

$$\operatorname{tg}(\phi(t_0) + \eta_1(t_0)) = \frac{\partial\mu/\partial t_0}{\mu\partial\phi/\partial t_0} - \frac{1}{\partial\phi/\partial t_0} \times \\ \times\left[\frac{\partial\eta_2}{\partial t_0} + \frac{\partial\eta_1}{\partial t_0}\exp(-\eta_2)\frac{\sin(\phi+\eta_1)}{\mu}\right]. \tag{10}$$

Используя банк данных для нулей дзета-функции Римана, мы приводим в таблице значения функций η_1, η_2, δ, где δ — расстояние между нулями с номерами $\{N-1, N\}$.

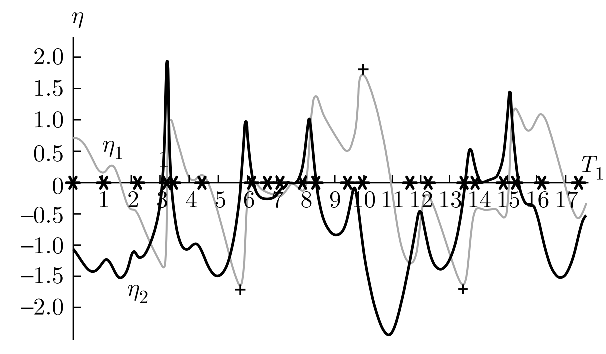


Рис. 1. Функции $\{\eta_1(t_0), \eta_2(t_0)\}$ — решения уравнений (3), (10) в интервале $0 \le T_1 \le 17.7$; $t_0 = 9860.360205325 + T_1$. Точки с одиночными звездочками указывают положение нулей дзета-функции с номерами $N = \{9980–10000\}$. Крестики указывают положение аномальных нулей

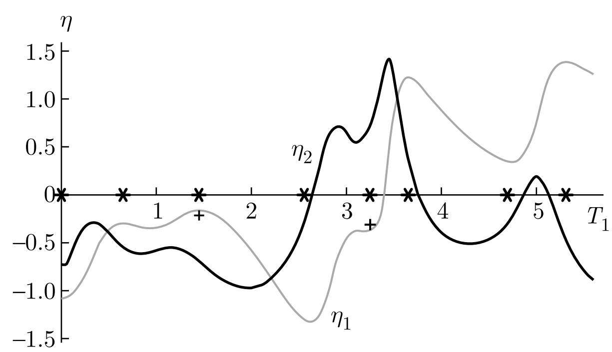


Рис. 2. Функции $\{\eta_1(t_0), \eta_2(t_0)\}$ в интервале $0 \le T_1 \le 5.6$; $t_0 = 9882.192215966 + T_1$. Точки с одиночными звездочками указывают положение нулей дзета-функции с номерами $N = \{10005–10012\}$. Все нули являются нормальными. Номера двух нулей $N = \{10007, 10009\}$ являются простыми числами

Существуют точная верхняя и точная нижняя границы функции η_1 на множестве $\{t_0^{(N)}\}$. Их значения неизвестны. Неизвестно также, достигаются они или нет.

На рис. 1 мы приводим функции $\{\eta_1(t_0), \eta_2(t_0)\}$ — решения уравнений (3), (10) в интервале $0 \le t_0 - 9860.360205325 \le 17.8$, полученные по теории возмущений относительно второго члена в правой части уравнения (10). Все номера нулей дзета-функции на этом интервале не являются простыми числами. Аномальными являются нули с номерами $N = \{9986, 9992, 9995\}$. На рис. 1 они отмечены крестиками.

На рис. 2 приведены графики функций $\{\eta_1(t_0), \eta_2(t_0)\}$ в интервале $0 \le t_0 - 9882.192215966 \le \le 5.6$, полученные в том же приближении, что и на рис. 1. Все нули дзета-функции в этом интервале

Таблица. Номера N нулей; значения корней t_0 дзета-функции из банка данных; значения функций η_1, η_2; расстояние δ между нулями с номерами $\{N-1, N\}$. Номера аномальных нулей помечены звездочкой

N	t_0	η_1	η_2	δ
995	1413.843148788569	−0.3347787	−1.439698	
996*	1415.585784795495	−1.913157	0.7729658	1.742636
997	1415.781581303283	0.6981624	0.8390399	0.1957965
998	1417.102822933823	0.2604094	−0.7057182	1.32124163
999	1418.696963852452	−0.9173339	−0.2697894	1.5941409
1000	1419.422480945996	0.2581943	$-2.734378 \cdot 10^{-2}$	0.7255171
9995*	9873.802220903648	−1.622723	−0.2933259	
9996	9874.323957629064	−0.4010518	$8.274927 \cdot 10^{-2}$	0.5217367
9997	9875.218994098847	−0.554381	0.5169054	0.8950364
9998	9875.600956248757	1.182915	0.4075229	0.3819621
9999	9876.479017063784	1.092085	−0.7418838	0.8780608
10000	9877.782654005501	−0.5631968	−0.8569397	1.3036369
99995	74 917.71941582848	−0.8112433	−0.7327937	
99996	74 918.37058022667	−0.7321506	0.3116081	0.6511644
99997	74 918.69143345370	0.909442	0.6422741	0.3208532
99998*	74 919.07516112077	2.238535	−0.2387409	0.3837276
99999	74 920.25979325889	−0.1823727	−1.530978	1.1846321
100000	74 920.82749899419	0.30297	−1.534634	0.5677057
999995*	600 267.1935613822	−1.766762		
999996	600 267.5137087857	−0.3751698		0.3201474
999 997	600 267.9045547598	0.5164229		0.39084598
999 998	600 268.4774001423	0.4080155		0.5728454
999 999	600 269.0055602490	0.5496082		0.5281601
1000000	600 269.6770124450	−0.3087992		0.6714522
9 999 995	$4.992378736958099 \cdot 10^6$	0.1155457		
9 999 996	$4.992379318476746 \cdot 10^6$	−0.7428616		0.58151865
9 999 997*	$4.992380078878498 \cdot 10^6$	−1.601269		0.76040175
9 999 998	$4.992380229898413 \cdot 10^6$	−0.4596763		0.1510199
9 999 999	$4.992380724410680 \cdot 10^6$	−1.318084		0.49451227
10 000 000	$4.992381014003179 \cdot 10^6$	−0.1764911		0.2895925

являются нормальными. Номера двух нулей с $N = \{10007, 10009\}$ являются простыми числами. Они обозначены крестиками. Рассматривая рис. 1, 2 данной работы и рис. 5 из работы [3], можно предположить, что существует корреляция между формой функции $\{\eta_1, \eta_2\}$ и наличием близкого нуля с номером, являющимся простым числом.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Распределение нулей дзета-функции представляет собой хороший пример системы, в которой имеется дальний порядок при отсутствии ближнего порядка. В результате оказывается возможным установить номер любого заданного нуля с точностью ± 1. Если известно положение трех нулей подряд, то их номера восстанавливаются однозначно с указанием, к какому подмножеству (нормальному или аномальному) принадлежит каждый из этих нулей. При этом даже на больших расстояниях общие формулы восстановления положения хотя бы ближайшего нуля к данному неизвестны. Вполне возможно, что разбиение задачи на две: установление дальнего порядка (нумерация с установлением интервалов без перекрытия) при отсутствии ближнего, может быть эффективным и в других задачах как физических, так и математических.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматлит, Москва (1962).

2. Yu. N. Ovchinnikov, JETP **123**, 838 (2016).

3. Yu. N. Ovchinnikov, J. Supercond. Novel Magnetism **32**, 3363 (2019).

4. H. M. Edwards, *Riemann's Zeta Function*, Acad. Press, New York, London (1974).

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 у́же 4 см; рукописные вставки не допускаются. В обозначениях и индексах (в тексте и на рисунках) не должно быть русских букв. Например, следует писать $P_{\rm opt}$, а не $P_{\rm опт}$. 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.