ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Продолжение физической части

Журнала Русского физико-химического общества, издававшегося с 1873 по 1930 г.

Выходит 12 раз в год

ИЮЛЬ

MOCKBA

Том 160

ВЫПУСК 1 (7)

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

ГЛАВНЫЙ РЕДАКТОР А. Ф. АНДРЕЕВ

ЗАМЕСТИТЕЛИ ГЛАВНОГО РЕДАКТОРА

Е. И. КАЦ, С. В. ТРОИЦКИЙ, И. А. ФОМИН, Д. Е. ХМЕЛЬНИЦКИЙ

Редколлегия: акад. А. Ф. АНДРЕЕВ,

д-р физ.-мат. наук И. Г. ЗУБАРЕВ, д-р физ.-мат. наук Е. И. КАЦ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции), д-р физ.-мат. наук В. П. КРАЙНОВ, акад. М. В. САДОВСКИЙ, канд. физ.-мат. наук С. С. СОСИН, канд. физ.-мат. наук Ю. С. БАРАШ, член-корр. РАН С. В. ТРОИЦКИЙ (зам. гл. редактора), член-корр. РАН И. А. ФОМИН (зам. гл. редактора), д-р физ.-мат. наук Д. Е. ХМЕЛЬНИЦКИЙ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ в Великобритании), акад. А. М. ЧЕРЕПАЩУК

Редакционный совет:

д-р физ.-мат. наук В. Т. ДОЛГОПОЛОВ, член-корр. РАН В. В. ЛЕБЕДЕВ, д-р физ.-мат. наук В. С. ПОПОВ

Москва

ООО «Объединённая редакция»

[©] Российская академия наук, 2021 г.

[©] Редколлегия журнала ЖЭТ
Ф (составитель), 2021 г.

СОДЕРЖАНИЕ

атомы, молекулы, оптика

Скорость туннельной ионизации в сильном поле в теории переходов Ландау–Дыхне	5
Интерференция гамма-излучения в спиновом пространстве при ядерном резонансном рассеянии	
Смирнов Г. В.	13
Применение магнито-индуцированных переходов атомов $^{85}\mathrm{Rb},~D_2$ -линии, в когерентных процессах	
Саргсян А., Тоноян А., Саркисян Д.	24
Дифракционная структура квантовых фантомных изображений	
Балакин Д. А., Белинский А. В.	35

ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА

Электророждение каонов на протоне	Егоров М. В., Постников В. И.	42
-----------------------------------	-------------------------------	----

твердые тела и жидкости

Деформация межатомных связей в верхних слоях поверхности $\operatorname{Ge}(111)$ со структурами $c(2 imes 8)$, $7 imes 7$	
и 5×5 Долбак А. Е., Жачук Р. А.	55

ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

Локальная структура и сверхтонкие магнитные взаимодействия зондовых ядер ${}^{57}{ m Fe}$ в хромите ${ m TlCr}_{0.95}{}^{57}{ m Fe}_{0.05}{ m O}_3$	
Соболев А. В., И В., Белик А. А., Глазкова Я. С., Пресняков И. А.	62
Восстановление функции электрон-фононного взаимодействия в сверхпроводниках с помощью неод- нородных микроконтактов и коррекция фона в спектрах ЯнсонаБобров Н. Л.	73
Условия реализации и магнитополевая зависимость угловых возбуждений в топологическом изоляторе со сверхпроводящим спариванием на треугольной решетке $\dots \dots \Phi e doceeb ~ A. ~ J.$	88
Распространение звука в области фазового перехода в магнитоупорядоченную фазу в средах с тетрагональной структуройВ.В.	95

Транспортное уравнение для субдиффузии смешанного происхождения Шкилев В. П.	107
Фазовая диаграмма и основное состояние декорированной модели Изинга на кубической решетке	
Мутайламов В. А., Муртазаев А. К.	119

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Влияние давления на межслоевой перенос заряда и электронную структуру металлических слоев в	
двухслойном двумерном органическом металле $(\mathrm{BETS})_4\mathrm{CoBr}_4(\mathrm{DCB})\ \dots$ Любовский Р. Б.,	
Песоцкий С. И., Зверев В. Н., Жиляева Е. И., Флакина А. М., Любовская Р. Н.	126

СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ

обзоры

Электронные состояния и аномальный эффект Холла в сильнокоррелированных топологических си-	
стемахИрхин В. Ю., Скрябин Ю. Н.	139

СКОРОСТЬ ТУННЕЛЬНОЙ ИОНИЗАЦИИ В СИЛЬНОМ ПОЛЕ В ТЕОРИИ ПЕРЕХОДОВ ЛАНДАУ-ДЫХНЕ

В. М. Петрович^а, Х. С. Делибашич^{а*}, И. Д. Петрович^b

^a University of Kragujevac, Faculty of Science 34000, Kragujevac, Serbia

^b University of Kragujevac, Technical Collage of Applied Studies 34000, Kragujevac, Serbia

> Поступила в редакцию 24 декабря 2020 г., после переработки 24 декабря 2020 г. Принята к публикации 13 января 2021 г.

> > (Перевод с английского)

STRONG-FIELD TUNNELING IONIZATION RATE BASED

ON LANDAU–DYKHNE TRANSITION THEORY

V. M. Petrović, H. S. Delibašić, I. D. Petrović

С помощью теории переходов Ландау – Дыхне исследована ионизация атома гелия и подобных ему атомов в поле линейно-поляризованного лазерного излучения низкой частоты. С учетом кулоновской поправки и взаимодействия электронов в основном состоянии получено выражение для скорости туннельных переходов, вызванных импульсами линейно-поляризованного излучения с тригонометрической формой огибающей. Проведено сравнение этой зависимости с результатами теории Аммосова – Делоне – Крайнова. Полученная зависимость имеет правильную форму, но скорость ионизации превышает результат теории Аммосова – Делоне – Крайнова. В дополнение к этому проведено исследование при различных длинах волн, а также при учете пондеромоторного сдвига в потенциале ионизации. Проведенный анализ показывает, что учет дополнительных членов в потенциале ионизации приводит к уменьшению скорости переходов. Эта скорость зависит от формы лазерных импульсов. Согласно нашим расчетам скорость ионизации также сильно зависит от длины волны лазерного излучения (его частоты) и от параболической координаты.

DOI: 10.31857/S0044451021070014

1. ВВЕДЕНИЕ

Результатом исследований взаимодействия лазерного излучения и атомов, выполненных за последние три десятилетия, стало общее понимание нелинейных оптических явлений вне рамок теории возмущения, таких как генерация гармоник высокого порядка, оптическое отражение, смешивание частот и самофокусировка света [1,2]. Объяснение физической картины этих процессов включает механизм фотоионизации, который необходимо детально изучить как с теоретической, так и с экспериментальной точек зрения [3,4].

Зависимость вероятности ионизации (скорости ионизации) от потенциала ионизации и свойств поля лазерного излучения была теоретически исследована в работе Келдыппа [5]. В ней ионизация понималась как покидание валентным электроном атома или молекулы под воздействием поля лазерного излучения большой напряженности при поглощении нескольких фотонов (многофотонная ионизация) или в результате туннелирования под потенциальным барьером, который создается благодаря

^{*} E-mail: hristina.delibasic@pmf.kg.ac.rs

действию кулоновских сил и полю лазерного излучения (туннельная ионизация). Для того чтобы различить эти два механизма фотоионизации, был введен параметр Келдыша γ , который представляет собой отношение частоты туннелирования ω_t и угловой частоты лазерного излучения ω , $\gamma = \omega_t/\omega$ [5]. Этот параметр можно выразить как отношение характерного атомного импульса $\sqrt{2mI_p}$ и импульса eF/ω , приобретенного в электрическом поле, γ = $=\omega \sqrt{2mI_p}/eF$, где I_p — это потенциал ионизации, а *F* — напряженность электрического поля. В атомных единицах ($e = m = \hbar = 1$), которые будут использоваться в этой статье, параметр Келдыша записывается в виде $\gamma = \omega \sqrt{2I_p}/F$. Механизм туннельной фотоионизации преобладает при $\gamma \ll 1$, а механизм многофотонной ионизации преобладает при $\gamma \gg 1$. При $\gamma \sim 1$ режим, в котором находится система, является промежуточным. Определение режимов важно для хорошего понимания разнообразных явлений, обусловленных ионизацией в сильном поле.

Следуя пионерской работе Келдыша, были получены многочисленные аналитические выражения, описывающие скорости ионизации атомов и молекул. Один из таких результатов, известный как ППТ (Переломов, Попов, Терентьев) [6], весьма хорошо описывает экспериментально измеренные зависимости скоростей ионизации в многофотонном и туннельном режимах. В исследовании [6] была предложена более точная модель для расчета скорости ионизации, в которой учитывается кулоновское взаимодействие покидающего атом фотоэлектрона и иона. Позднее Аммосов, Делоне и Крайнов уточнили формулы, выведенные для сложных атомов и ионов в так называемом туннельном режиме, и получили наиболее часто используемое выражение для скорости ионизации, АДК. В случае линейнополяризованного поля лазерного излучения и ненулевого начального импульса, $p \neq 0$, скорость ионизации дается выражением

$$W_{ADK}(F_0, \omega, p, \eta) \sim$$

 $\sim \exp\left[-\frac{2Z^3}{3F_0 n^{*^3}} - \frac{p(F_0, \eta)^2 \gamma(F_0, \eta)^3}{3\omega}\right],$

см. [7], где n^* обозначает эффективное квантовое число, $n^* = Z/2I_p$, а Z — заряд иона. Из приведенного выражения следует, что скорость перехода $W_{ADK}(F_0, \omega, p, \eta)$ зависит от второй степени начального импульса $p(F_0, \eta)$ испускаемых фотоэлектронов и от параметра Келдыша $\gamma(F_0, \eta)$, а также от эффективного квантового числа n^* и интенсивности поля лазерного излучения F₀. Справедливость этого выражения была многократно проверена экспериментально [8, 9], а также подтверждена сравнением с результатами вычислений, использующих зависящее от времени уравнение Шредингера. Следует заметить, что АДК-теория хорошо описывает экспериментальные данные для инертных газов (одним из них является гелий) только при $\gamma < 0.5$ [10]. В остальных случаях теория переоценивает экспериментальную величину и предсказание АДК не совпадает с результатами экспериментов. Причиной этого является тот факт, что при $\gamma > 1$ время туннелирования электрона становится гораздо больше, чем период оптических колебаний, и квазистатическое приближение перестает работать даже при сильном подавлении кулоновского барьера [9].

После получения Аммосовым, Делоне и Крайновым аналитического выражения для скорости туннельной ионизации [7] многие авторы пытались уточнить его [11–13]. В результате было выдвинуто и разработано множество других теорий, например, теория квантовых переходов Ландау-Дыхне (ЛД) [14], теория неадиабатической туннельной ионизации (НТИ) [15] и асимптотическая теория в режиме слабого поля (СЛП) [16]. В дальнейшем теория НТИ детально разрабатывалась Юдиным и Ивановым [15] в предположении нулевого начального импульса испускаемого электрона (экспериментальные исследования НТИ проводились, например, в работах [17-19]). Ими было получено простое выражение в замкнутой форме для скорости ионизации как функции мгновенной фазы лазерного излучения для произвольных значений γ в обычном приближении сильного поля (СП). Приближение СЛП было впервые использовано в работе Оппенгеймера [20], но лишь через 50 лет после этого было получено правильное выражение для асимптотической зависимости скорости ионизации простейшей системы, содержащей водород в основном состоянии [21]. Несмотря на значительную работу, проделанную в этой области, до сих пор отсутствует общепринятая формула, и дебаты продолжаются. Настоящая работа посвящена изучению разновидности ЛД-теории [14], которая характеризуется достаточной простотой и точностью.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В настоящей статье исследуется двухэлектронная система (нейтральный атом гелия и подобные ему атомы), которая является предельным случаем задачи многих тел, взаимодействующих с линейно-поляризованным лазерным излучением. Целью работы является выяснение влияния интенсивности лазерного излучения, формы луча и длины волны (частоты) на скорость туннельной фотоионизации. Для этого нами была получена аналитическая формула для конкретного профиля лазерного импульса и проведено сравнение с результатом широко применяемой АДК-теории, а также с некоторыми доступными экспериментальными результатами.

Следуя работе [22], мы использовали ЛД-теорию [14, 21], которая широко применяется в различных областях физики, где исследуемая система подвергается воздействию поля сильного лазерного излучения. Необходимое условие применимости ЛД-теории состоит в том, что энергия фотона ω должна быть мала по сравнению с энергией ионизации I_p . Как было установлено Дыхне [14], если гамильтониан системы $\hat{H}(t)$ является медленноменяющейся функцией времени и

$$\widehat{H}(t)\Psi_n(t) = \widehat{E}(t)\Psi_n(t), \quad n = i, f$$

(где *i* и *f* обозначают начальное (связанное) и конечное состояния соответственно), вероятность перехода $\Psi_i \to \Psi_f, W(F, \omega, p)$, выражается через мнимую часть классического действия *S* следующей формулой:

$$W(F, \omega, p) \propto \exp[-2 \operatorname{Im}(S)]$$

где

$$S = \int_{0}^{\tau} [E_f(t) - E_i(t)] dt$$

Здесь комплексное значение τ является точкой поворота в комплексной плоскости времени. Для его нахождения используются метод седловой точки и условие равенства начальной и конечной энергий $E_i(\tau) = E_f(\tau)$.

Как указывалось ранее, в общем случае линейнополяризованное поле лазерного излучения записывается в виде

$$F(t) = F_0 f(t) \cos(\omega t + \varphi),$$

где f(t) — нормированная огибающая функция [23]. В нашей работе исследуются импульсы с тригонометрической формой огибающей

$$f(t) = \sin(\omega t + \varphi)$$

[24], F_0 — пиковая амплитуда, а φ — фаза несущей огибающей (ФНО), которая для циклов большого количества импульсов полагается равной нулю [25].

Векторный потенциал определяется согласно работе [26],

$$A(t) = c \int F(t) \, dt$$

и имеет следующий вид:

$$A(t) = -\frac{cF_0}{4\omega}\cos(2\omega t),$$

где *с* — скорость света.

Согласно подходу, сформулированному в работах [14, 22], нами была использована ЛД-теория с заданными значениями E_i и $E_f(t)$. В начальном состоянии мы учли электрон-электронные корреляции [27] (второй член в выражении E_i), а в конечном состоянии была учтена кулоновская поправка (второй член в выражении $E_f(t)$ в параболических координатах η) [28]. В итоге

$$E_i = -I_p + \frac{5Z}{8}$$

где ${\cal Z}-$ заряд иона, а

$$E_f = \frac{1}{2} \left(p - \frac{A(t)}{c} \right)^2 - \frac{(2n_2 + |m| + 1)\sqrt{2I_p}}{\eta}.$$

Кулоновский член приводит к появлению параболического n_2 и магнитного *m* квантовых чисел [26].

Время поворота τ определяется на комплексной плоскости с помощью седловой точки из уравнения $E_i(\tau) = E_f(\tau)$ [14,22]:

$$-I_p + \frac{5Z}{8} = \frac{1}{2} \left(p - \frac{A(t)}{c} \right)^2 - \frac{(2n_2 + |m| + 1)\sqrt{2I_p}}{\eta}.$$
 (1)

Тригонометрическую функцию $\cos(2\omega\tau)$ можно разложить в ряд Маклорена (используются лишь первые два члена разложения, остальными членами пренебрегаем). В результате последовательных преобразований из уравнения (1) можно получить выражение для точки поворота τ в комплексном виде:

$$\tau = \frac{\pi}{4\omega} + \frac{2p}{F_0} - \frac{32\omega^2 D(\eta)p}{F_0{}^3} + \frac{16\omega^2 p^3}{3F_0{}^3} - \frac{16\omega^2 p^2}{F_0{}^3} - \frac{16\omega^2 p^2 D(\eta)\sqrt{D(\eta)}}{F_0{}^3} + \frac{16\omega^2 p^2 \sqrt{2D(\eta)}}{F_0{}^3} + \frac{16\omega^2 p^2 \sqrt{2D(\eta)}}{F_0{}^3} \right). \quad (2)$$

Для упрощения записи было введено следующее обозначение:

$$D(\eta) = I_p - \frac{5Z}{8} - \frac{1}{2} \left(p - \frac{A(t)}{c} \right)^2 - \frac{(2n_2 + |m| + 1)\sqrt{2I_p}}{\eta},$$

где $D(\eta)$ является поправкой к I_p и может рассматриваться как некоторый эффективный потенциал ионизации. Согласно уравнению (2) точка поворота на комплексной плоскости зависит от величины электрического поля F_0 , угловой частоты ω и от начального импульса испускаемых фотоэлектронов в области вне барьера, который можно выразить через параболическую координату η :

$$p(F_0, \eta) = \frac{1}{2} \left(\sqrt{F_0 \eta - 1} - \frac{1}{\eta \sqrt{F_0 \eta - 1}} \right)$$

[29,30]. Если полная энергия системы не зависит от координаты η , импульс сохраняется вдоль классической траектории, $p_{\eta} = p$ [29].

Подставляя уравнение (2) в формулу для скорости перехода

$$W(F,\omega,p) \propto \exp[-2\operatorname{Im}(S)]$$

и интегрируя по времени, разделяя действительную и мнимую части (нас интересует только мнимая часть, содержащая $1/F^n$, $n \leq 3$), находим

$$W(F_{0}, \omega, p, \eta) \sim \exp\left[-2\left(\frac{2D(\eta)\gamma'(F_{0}, \eta)}{3\omega} - \frac{\sqrt{D(\eta)}F_{0}\pi^{2}}{32\omega^{2}} + \frac{\sqrt[3]{2D(\eta)}}{5F_{0}} - \frac{2p}{\omega}(F_{0}, \eta)^{2}\gamma'(F_{0}, \eta)\left(1 - \frac{80D(\eta)\omega^{2}}{3}\right)\right)\right].$$
 (3)

Получаемое в результате выражение для скорости перехода $W(F_0, \omega, p, \eta)$ имеет компактную форму, в которой не содержится суммирование рядов и интегрирование. Оно состоит из двух частей: первой, не зависящей от начального импульса испускаемых фотоэлектронов $p(F_0, \eta)$, и второй, которая зависит от импульса. На часть, не зависящую от импульса, сильно влияют эффективный потенциал ионизации $D(\eta)$, а также напряженность электрического поля F_0 и угловая частота ω . Введем модифицированный параметр Келдыша

$$\gamma'(F_0,\eta) = (\omega\sqrt{2D(\eta)})/(F_0),$$

который учитывает поправку в потенциале ионизации $D(\eta)$. Оставшаяся часть зависит от квадрата начального импульса $p(F_0, \eta)^2$ как

$$\frac{2p(F_0,\eta)^2\gamma'(F_0,\eta)}{\omega}\left(1-\frac{80D(\eta)\omega^2}{3}\right).$$

Мы предполагаем, что импульсы достаточно малы, так что четвертой и более высокими степенями можно пренебречь по сравнению со второй степенью.

Для сравнения экспериментальных данных с теорией следует отметить существенность таких не связанных напрямую с актом элементарной ионизации факторов как пондеромоторное ускорение испускаемых электронов и насыщение вероятности ионизации [31,32]. Чтобы учесть их влияние на скорость перехода, мы включили пондеромоторный потенциал U_p в уравнении (3). Для поля с линейной поляризацией при усреднении кинетической энергии электрона во времени пондеромоторный потенциал дается следующим выражением: $U_p(F_0, \omega) =$ $= F_0^2/4c^2$ [31]. В соответствии с этим выражением во всех приведенных выше формулах мы заменили потенциал ионизации I_p на значение $I_p^{corr} = I_p +$ $+F_0^2/4c^2$, учитывающее поправку. Новые обозначения имеют вид

$$D^{eff}(F_0, \omega, \eta) = I_p^{corr} - \frac{5Z}{8} + \frac{(2n_2 + |m| + 1)\sqrt{2I_p}}{\eta}$$

И

$$\gamma'^{eff}(F_0,\omega,\eta) = \frac{\omega\sqrt{2D^{eff}(F_0,\omega,\eta)}}{F_0}$$

Основываясь на сказанном выше, уравнение (3) можно переписать в следующем виде:

$$W^{corr}(F_{0},\omega,p,\eta) \sim \\ \sim \exp\left[-2\left(\frac{2}{3\omega}D^{eff}(F_{0},\omega,\eta)\gamma^{'eff}(F_{0},\omega,\eta) - \frac{\sqrt{D^{eff}(F_{0},\omega,\eta)}F_{0}\pi^{2}}{32\omega^{2}} + \frac{\sqrt[3]{2D^{eff}(F_{0},\omega,\eta)}}{5F_{0}} - \frac{2p}{\omega}(F_{0},\eta)^{2}\gamma^{'eff}(F_{0},\omega,\eta) \times \\ \times \left(1 - \frac{80D^{eff}(F_{0},\omega,\eta)\omega^{2}}{3}\right)\right)\right]. \quad (4)$$

Штарковским сдвигом атомных уровней в слабых полях при условии непрерывности границы можно пренебречь [22].

Скорость однократной фотоионизации может быть рассчитана и по стандартным формулам АДК-теории туннельной ионизации. Для лазерного излучения с линейной поляризацией и ненулевого начального импульса p скорость ионизации дается следующим выражением [7]:

$$W_{ADK}(F_0, \omega, p, \eta) \sim$$

 $\sim \exp\left[-\frac{2Z^3}{3F_0 n^{*^3}} - \frac{p(F_0, \eta)^2 \gamma(F_0, \eta)^3}{3\omega}\right].$ (5)



Рис. 1. Скорости ионизации $W(F_0, \omega, p, \eta)$ (a) и $W_{ADK}(F_0, \omega, p, \eta)$ (b) как функция интенсивности лазерного излучения $I = (1 \cdot 10^{14} - 1 \cdot 10^{15})$ Вт/см². Параболическая координата принимает значение $\eta = 20$, начальный импульс испускаемых фотоэлектронов меняется в диапазоне p = (0.2-0.8) ат. ед. Все теоретические кривые построены для угловой частоты $\omega = 0.0569$ ат. ед. ($\lambda = 800$ нм)

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В этой работе для исследования ионизации атома гелия и ему подобных атомов нами предложено выражение для импульсов с тригонометрической формой огибающей. Проанализировано, как профиль лазерного луча влияет на скорость однократной фотоионизации. Импульсы лазерного излучения предполагаются короткими. Мы использовали лазерное излучение с длинами волн 800 нм, 1000 нм и 1200 нм и соответствующими угловыми частотами 0.0569 ат. ед., 0.0455 ат. ед. и 0.0379 ат. ед. Параметр Келдыша γ был рассчитан в зависимости от интенсивности поля $I(F_0 \sim \sqrt{I})$, которая менялась в интервале 10^{14} Вт/см² < $I < 10^{15}$ Вт/см². Выбранные параметры ограничивают значения γ диапазоном, который характерен для туннельной ионизации $\gamma \ll 1.$ В завершение мы проанализировали, как на скорость ионизации влияют поправки, модифицирующие потенциал ионизации. Приводятся обсуждение и сравнение наших результатов с предсказаниями АДК-теории и имеющимися экспериментальными результатами.

Чтобы проанализировать применимость полученных нами формул для описания туннельной ионизации, на рис. 1 приводится сравнение наших результатов (уравнение (3), рис. 1*a*) и кривой по АДК-теории (уравнение (5), рис. 1*б*). Для расчета обеих кривых начальный импульс предполагался ненулевым.

На рис. 1а видно, что теоретическая кривая, полученная нами, демонстрирует типичную зависимость туннельного типа, и ее согласие с кривой АДК-теории, вообще говоря, весьма неплохое. Ширина нашей кривой больше, чем предсказано АДК-теорией (рис. 1б), и она имеет менее резко выраженную форму. Это демонстрирует существенное влияние формы лазерного луча на скорость ионизации. Можно сделать вывод, что сдвиг и уширение нашей кривой непосредственно связаны с параметрами источников лазерного излучения, что согласуется с результатами [7, 31, 32]. Для сравнения кривых мы использовали одни и те же единицы, что сохраняет количественное соотношение между ними. Обе зависимости демонстрируют экспоненциальный рост, достигают максимального значения, а затем убывают, пока поле не достигнет насыщения (при значениях $I \sim 1 \cdot 10^{15} \text{ Br/см}^2$). Область насыщения соответствует результатам [29]. Оба пика располагаются почти при одном и том же значении интенсивности поля примерно 3·10¹⁴ Вт/см². Расчеты по нашей формуле совпадают с результатами численного моделирования [30] и с экспериментальными данными [33] в диапазоне интенсивностей около $5 \cdot 10^{14} \text{ Br/см}^2$, а при более высоких интенсивностях возникает отклонение в соответствии с [29]. Причи-



Рис. 2. скоростей Сравнение ионизации как лазерного функций интенсивности излучения $I = (1 \cdot 10^{14} - 1 \cdot 10^{15})$ Вт/см² для $W(F_0, \omega, p, \eta)$ и $W^{corr}(F_0,\omega,p,\eta)$ при фиксированном значении параболической координаты $\eta = 20$. Угловая частота $\omega = 0.0569$ ат. ед. ($\lambda = 800$ нм), а начальные импульсы испускаемых фотоэлектронов лежат в интервале p = (0.2-0.8)ат.ед.

на этого отклонения при больших интенсивностях может заключаться в том, что выражение для скорости ионизации в [29] выведено в предположении малости импульса испущенного электрона, которым можно пренебречь [12,13].

Далее анализируется влияние пондеромоторного потенциала U_p на скорость туннельной ионизации $W(F_0, \omega, p, \eta)$. На рис. 2 приведены кривые, полученные согласно уравнениям (3), (4).

Согласно теоретическим кривым $W(F_0, \omega, p, \eta)$ и $W^{corr}(F_0, \omega, p, \eta)$, построенным на рис. 2, учет пондеромоторного потенциала U_p приводит к уменьшению скорости ионизации (штриховая линия) по сравнению с исходной кривой (уравнение (3), сплошная линия). Максимальное значение скорости ионизации с учетом поправки съезжает ниже и правее в область больших интенсивностей лазерного излучения. Максимум исходной кривой располагается при значении примерно $3 \cdot 10^{14}$ BT/cm², а на кривой с учетом поправки он достигается примерно при $3.8 \cdot 10^{14}$ BT/cm². Такое уменьшение обусловлено тем, что часть энергии фотонов «тратится» на сообщение испускаемому электрону начального импульса и колебательной энергии. Это приводит к снижению скорости фотоионизации [29].

Мы также построили скорость ионизации $W(F_0, \omega, p, \eta)$ (уравнение (3)) в зависимости от интенсивности лазерного излучения при различных длинах волн. Скорость рассчитана для выбранных значений длинноволнового диапазона 800 нм, 1000 нм и 1200 нм. Результаты показаны на рис. 3. Вычисления проводились при исходных условиях, т. е. для невозмущенного значения потенциала ионизации I_p .

На рис. З видно, что скорость ионизации $W(F_0, \omega, p, \eta)$ зависит от длины волны. Лазерное излучение более коротких длин волн дает большие значения скорости ионизации при всех значениях интенсивности излучения. Такое поведение соответствует работе [34]. Наши расчеты показывают, что соответствующий сдвиг скоростей уменьшается при увеличении длин волн, что согласуется с результатами, полученными в [27, 34]. Кривые, соответствующие разным длинам волн, ведут себя качественно одинаково. Как видно на рис. 3, любая из этих кривых сначала возрастает, достигает максимального значения, а затем убывает с ростом интенсивности лазерного излучения. Примечательно, что величина и положение максимума зависят от длины волны (частоты) лазерного излучения. Для длин волн 800 нм, 1000 нм и 1200 нм максимум располагается соответственно при $2.91 \cdot 10^{14} \text{ Br/cm}^2$, $3.01 \cdot 10^{14} \text{ Bt/cm}^2$ и $3.14 \cdot 10^{14} \text{ Bt/cm}^2$. Эти результаты соответствуют ожиданиям, поскольку согласно работе [28] пондеромоторная энергия увеличивается с уменьшением длины волны, ограничивая вероятность туннельной ионизации. При больших длинах волн и большом колебательном радиусе, когда пондеромоторной энергией можно пренебречь, скорость ионизации достигает насыщения и начинает убывать с ростом интенсивности лазерного излучения. Кроме того, видно, что линии, соответствующие разным длинам волн, совпадают приблизительно при 10¹⁴ Вт/см². Сравнение наших теоретических результатов с результатами эксперимента показывает их хорошее согласие [29].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этой работе исследовалась туннельная ионизация двухэлектронных атомов. Была получена удобная формула для скорости однократной туннельной ионизации атома гелия и ему подобных атомов в поле линейно-поляризованного лазер-



Рис. 3. *a*) Скорость ионизации $W(F_0, \omega, p, \eta)$ как функция интенсивности лазерного излучения I при фиксированных значениях длин волн λ , δ) контурный график для скорости ионизации $W(F_0, \omega, p, \eta)$ как функции интенсивности лазерного излучения и длины волны λ (800 нм–1200 нм). Значение параболической координаты фиксировано $\eta = 20$, а интенсивность лазерного излучения и начальный импульс испускаемых фотоэлектронов меняются в интервалах $I = (1 \cdot 10^{14} - 1 \cdot 10^{15})$ Вт/см² и p = (0.2-0.8) ат.ед.

ного излучения в нерелятивистском режиме. Полученная нами формула хорошо согласуется с теоретическими и экспериментальными данными в области малых полей и имеет ожидаемую форму. Продемонстрировано, что конкретная форма лазерного импульса оказывает влияние на скорость ионизации. В наших расчетах учитывался пондеромоторный потенциал электрона в поле лазерного излучения, а сдвиг Штарка не учитывался. Показано, что получаемые результаты сильно зависят от длины волны лазерного излучения, от параболической координаты и от интенсивности. Как следует из полученных теоретических зависимостей, все эти параметры влияют на величину скорости ионизации. Описанная теоретическая модель может быть использована для атомов других инертных газов, что послужит ее дальнейшей верификации.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке министерства Образования, Науки и Технологического Развития республики Сербия (грант № 451-03-68/2020-14/200122) и гранта Европейского Содружества в Области Науки и Технологий COST CA18222 «Аттосекундная Химия».

ЛИТЕРАТУРА

 P. Xia, C. Kim, F. Lu et al., Opt. Express 26, 29393 (2018).

- N. J. Dawson and M. Kounta, J. Nonlinear Opt. Phys. Mater. 28, 1950033 (2019).
- A. V. Andreev, O. A. Shoutova, and V. A. Makarov, In ICONO 2005: Nonlinear Optical Phenomena 6259, 625901 (2006).
- 4. Y. H. Lai, J. Xu, U. B. Szafruga et al., Phys. Rev. A 96, (2017).
- **5**. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ **47**, 1945 (1964).
- A. M. Perelomov, V. S. Popov, and M. V. Terent'ev, Sov. Phys. JETP 24, 207 (1967).
- M. V. Ammosov, N. B. Delone, and V. P. Krainov, *Ж*ЭТФ 91, 2008 (1986).
- H. Ni, U. Saalmann, and J. M. Rost, Phys. Rev. A 97, 013426 (2018).
- R. Wang, Q. Zhang, D. Li et al., Opt. Express 27, 647 (2019).
- 10. Y. Z. Fu, S. F. Zhao, and X. X. Zhou, Chin. Phys. B 21, 113101 (2012).
- N. Abro, K. Wang, X. Zhu, B. Li, and C. Jin, Phys. Rev. A 98, 023411 (2018).
- 12. R. Sun, X. Lai, W. Quan et al., Phys. Rev. A 98, 053418 (2018).
- 13. S. Luo, M. Li, W. Xie et al., Phys. Rev. A 99, 053422 (2019).

- 14. A. M. Dykhne, Sov. Phys. JETP 14, 1 (1962).
- 15. G. L. Yudin and M. Y. Ivanov, Phys. Rev. A 64, 013409 (2001).
- 16. L. B. Madsen, O. I. Tolstikhin, and T. Morishita, Phys. Rev. A 85, 053404 (2012).
- I. Barth and O. Smirnova, Phys. Rev. A 87, 065401 (2013).
- 18. M. Li, M. M. Liu, J. W. Geng et al., Phys. Rev. A 95, 053425 (2017).
- 19. K. Liu, S. Luo, M. Li et al., Phys. Rev. Lett. 122, 053202 (2019).
- 20. J. R. Oppenheimer, Phys. Rev. 31, 66 (1928).
- L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Quantum Mechanics (Nonrelativistic Theory), Pergamon, Oxford (1977).
- 22. D. I. Bondar, W. K. Liu et al., Phys. Rev. A 79 (2009).
- 23. C. D. Lin, C. Jin, A. T. Le, and H. Wei, Attosecond and Strong-Field Physics: Principles and Applications, Cambridge Univ. Press (2018), pp. 86.
- 24. I. Barth and M. Lein, J. Phys. B 47, 204016 (2014).

- **25**. M. Harooni, *High Power Laser Systems* (BoD–Books
- on Demand, 2018).
- 26. V. P. Krainov, J. Opt. Soc. Amer. B 14, 425 (1997).
- 27. V. P. Krainov, J. Phys. B 36, L169 (2003).
- M. Inguscio and L. Fallani, Atomic Physics: Precise Measurements and Ultracold Matter, OUP Oxford (2013).
- 29. M. Petersilka and E. K. U. Gross, Laser Phys. 9, 1 (1999).
- 30. Z. Chen, L. Zhang, Y. Wang et al., Phys. Rev. A 99, (2019).
- 31. Е. А. Волкова, А. М. Попов, О. В. Тихонова, ЖЭТФ 140, 450 (2011).
- 32. R. Wiehle, Experimental Examination of Ionization Processes of Noble Gases in Strong Laser Fields, Doctoral Dissertation, Verlag Nicht Ermittelbar (2005).
- 33. B. Walker, B. Sheehy, L. F. DiMauro et al., Phys. Rev. Lett. 73, 1227 (1994).
- 34. K. Nagaya, K. Mishima, M. Hayashi, and S. H. Lin, J. Chem. Phys. 124, 144303 (2006).

Г. В. Смирнов*

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» 123182, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 24 января 2021 г., после переработки 20 февраля 2021 г. Принята к публикации 20 февраля 2021 г.

В картине мультипространственной интерференции, возникающей при ядерном резонансном рассеянии гамма-излучения в кристалле бората железа, наряду с интерференцией в геометрическом и энергетическом пространствах существенную роль играет интерференция в спиновом пространстве [1]. Последняя появляется благодаря специфическому характеру сверхтонкого взаимодействия ядра Fe-57 с внутрикристаллическими полями бората железа [2]. Чтобы вычленить эту необычную разновидность интерференции, изучить ее свойства и влияние на общую картину рассеяния, исследован процесс рассеяния гамма-излучения на одиночном ядре в названном кристалле при возбуждении изолированного резонансного перехода между основным и возбужденным состояниями ядра. Найдены амплитуды и поляризации волн излучения на каждом из парциальных путей рассеяния в спиновом пространстве. Выявлена сильная зависимость условий интерференции от поляризации падающего излучения и от направления кристаллического магнитного поля на ядре. Кроме поляризационных свойств рассеянного излучения исследованы спектры ядерного резонансного рассеяния.

DOI: 10.31857/S0044451021070026

1. ВВЕДЕНИЕ

Любое дифракционное явление включает в себя интерференцию рассеянных волн. В частности, дифракция рентгеновского или резонансного гамма-излучения возникает как результат когерентного сложения волн, упруго рассеянных атомами и ядрами, входящими в состав кристаллической решетки. В случае дифракции на ядрах, энергетические уровни которых расщеплены вследствие сверхтонкого взаимодействия, помимо интерференции в геометрическом пространстве имеет место интерференция в энергетическом пространстве, поскольку при упругом рассеянии гамма-излучения ядрами с той или иной вероятностью принимают участие сразу несколько переходов между подуровнями основного и возбужденного состояний. Интерференция в энергетическом пространстве отражается на форме мессбауэровского дифракционного спектра [3], особенно в окрестности брэгговского угла [4] и при сближении энергии ядерных переходов [5]. Что касается рассеяния синхротронного излучения ядрами,

В настоящей статье мы коснемся другого, довольно необычного вида интерференции, а именно, интерференции в спиновом пространстве. Существуют особые условия сверхтонкого взаимодействия, в которых возбужденные состояния ядра с разными проекциями ядерного спина обладают одной и той же энергией, иначе говоря, имеет место смешивание ядерных состояний по проекции спина¹⁾. Такая ситуация возникает, например, для изотопа железа ⁵⁷Fe в кристалле FeBO₃, где на ядро железа действуют одновременно внутрикристаллические магнитное и электрическое поля. Комбинированное взаимодействие моментов ядра с внутрикристаллическими полями приводит к асимметричному расщеплению первого возбужденного уровня ядра на четыре подуровня. И, это существенно, так как, поскольку в кристалле бората железа градиент

то в этом случае интерференция ядерных переходов на разных частотах приводит к временным биениям интенсивности рассеянного излучения, так называемым квантовым биениям [6,7].

¹⁾ Не следует путать с вырождением ядерных состояний, при котором отсутствует выделенное направление для проекции спина.

^{*} E-mail: g.smirnov@gmx.net



Рис. 1. Схема рассеяния в ортогональной системе координат XYZ, \mathbf{k}_0 , \mathbf{k}_1 — волновые векторы падающего и рассеянного излучений, θ — угол рассеяния в плоскости YZ, $\mathbf{h}_{0,1}^{\pi}$, $\mathbf{h}_{0,1}^{\sigma}$, — единичные векторы π - и σ -поляризации падающего и рассеянного излучений, \mathbf{n}_x , \mathbf{n}_y , \mathbf{n}_z — единичные векторы, задающие направления сверхтонкого поля на ядре

электрического поля ортогонален магнитному полю, состояние ядра на любом из четырех подуровней представляет собой суперпозицию двух состояний, каждое из которых отвечает определенной проекции ядерного спина на квантовую ось [2]. Отдельное парциальное состояние характеризуется определенной амплитудой вероятности. В результате возбужденное ядро оказывается в смешанном по проекции спина состоянии, вследствие чего упругое рассеяние при данной частоте падающего излучения может происходить по различным путям в спиновом пространстве. В этих условиях наблюдается интерференция путей рассеяния в спиновом пространстве. В следующем разделе рассматриваемое явление интерференции моделируется и исследуется на примере сверхтонкого расщепления уровней ядра ⁵⁷Fe в кристалле бората железа.

2. ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ В СПИНОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Пусть рассеивающее ядро жестко закреплено в кристалле и находится в начале координат рис. 1. Плоская волна резонансного гамма-излучения с волновым вектором \mathbf{k}_0 , падает на ядро вдоль оси Z и при соответствующей частоте возбуждает ядерный переход. При этом ядро ведет себя как осциллирующий мультиполь, который излучает.

Будем рассматривать рассеянное излучение с волновым вектором \mathbf{k}_1 , который лежит в плоско-

сти YZ и составляет угол θ с осью Z. Поскольку между основным и первым возбужденным состояниями ядра ⁵⁷Fe происходит магнитный дипольный переход M1, нас будет интересовать только магнитная компонента волнового поля. Поляризация магнитного волнового поля падающего излучения задается единичными векторами \mathbf{h}_{0}^{π} , \mathbf{h}_{0}^{σ} , а поляризация магнитного поля рассеянного излучения векторами \mathbf{h}_{1}^{π} , \mathbf{h}_{1}^{σ} . Пусть единичные векторы $\mathbf{n}_{x}, \mathbf{n}_{y}, \mathbf{n}_{z}$ задают направления главных осей сверхтонкого поля на ядре. Будем предполагать, что вектор напряженности магнитного поля на ядре может лежать либо по оси +Z, либо против этого направления -Z. При этом градиент электрического поля направлен вдоль оси Х. Магнитное квантовое число излучения равно $M = m_e - m_g$, где m_g , $m_e - m_g$ квантовые числа проекций ядерного спина (в основном и возбужденном состояниях) на главную квантовую ось, направленную вдоль вектора \mathbf{n}_z . В соответствии с правилами отбора при магнитном дипольном переходе между основным и первым возбужденным состояниями число М может принимать значения $0, \pm 1$. Магнитные моменты ядерного перехода из основного в возбужденное состояния характеризуются сферическими единичными векторами, **n**_{-M}. При локальном магнитном поле, направленном вдоль оси Z, $\mathbf{n}_0 = \mathbf{n}_z$ (это вектор поляризации линейно-поляризованного магнитного момента перехода), а $\mathbf{n}_{\pm 1} = \mp \left(\mathbf{n}_x \pm i \mathbf{n}_y \right) / \sqrt{2}$ (это векторы поляризации циркулярных право- и лево-закрученных магнитных моментов перехода). В результате совместного действия на ядро внутрикристаллических магнитного и электрического полей энергетический уровень основного состояния расщепляется на два подуровня с проекциями ядерного спина $\pm 1/2$ на главную квантовую ось Z. Что касается возбужденного состояния, то в нем энергетический уровень расщепляется на четыре подуровня и состояние ядра на каждом из этих подуровней оказывается смешанным по проекции спина, как показано в табл. 1. Энергетические подуровни сверхтонкого расщепления в возбужденном состоянии e = 1, 2, 3, 4 пронумерованы в порядке возрастания энергии.

Коэффициенты $c_e^{m_e}$ представляют собой амплитуды вероятности обнаружить возбужденное ядро в состоянии с соответствующей проекцией ядерного спина на каждом подуровне. Решение для амплитуд $c_e^{m_e}$ можно найти в работах [1,2]. Очевидно, при описании когерентного рассеяния гамма-излучения на таком ядре необходимо рассматривать пути рассеяния с возбуждением различных состояний по проекции спина.

Таблица 1. Собственные волновые функции ядерных возбужденных состояний для четырех энергетических подуровней ядра $^{57}{
m Fe}$ в кристалле бората железа

1	2	3	4
$\left c_{1}^{-3/2} \left -\frac{3}{2} \right\rangle + c_{1}^{+1/2} \left +\frac{1}{2} \right\rangle \right $	$\left c_{2}^{-1/2} \left -\frac{1}{2} \right\rangle + c_{2}^{+3/2} \left +\frac{3}{2} \right\rangle \right $	$c_{3}^{+1/2}\left +\frac{1}{2}\right\rangle+c_{3}^{-3/2}\left -\frac{3}{2}\right\rangle$	$\left.c_4^{+3/2}\left +\frac{3}{2}\right\rangle+c_4^{-1/2}\left -\frac{1}{2}\right\rangle\right.$

Таблица 2. Пути рассеяния в спиновом пространстве при возбуждении ядерного перехода на уровень e=1

$-\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{3}{2}$, $+\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2} \rightarrow +\frac{1}{2}$, $-\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2} \rightarrow +\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$
M = -1, M' = -1	M = -1 , $M' = +1$	M = +1 , $M' = -1$	M = +1, M' = +1
$-\frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$, $-\frac{1}{\sqrt{12}}$	$-\frac{1}{\sqrt{12}}$, $-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{\sqrt{12}}$, $-\frac{1}{\sqrt{12}}$
$c_1^{-3/2} \cdot c_1^{-3/2}$	$c_1^{-3/2} \cdot c_1^{+1/2}$	$c_1^{+1/2} \cdot c_1^{-3/2}$	$c_1^{+1/2} \cdot c_1^{+1/2}$

Полагаем, что частота излучения ω находится в окрестности частот резонансных переходов между подуровнями основного и возбужденного состояний ω_{eg} . Учитывая, что ядро жестко закреплено в пространстве, для амплитуды когерентного рассеяния из направления 0 в направление 1, исходя из формулы для ядерной восприимчивости (2.21), приведенной в работе [2], получим следующее выражение:

$$\begin{split} f_{01}^{ss'} &= -\frac{3}{8\pi} K \sigma_0 \frac{\Gamma/2\hbar}{\omega - \omega_{eg} - i\Gamma/2\hbar} \times \\ \times \sum_{m'_e, m''_e} \left\langle \frac{1}{2}, m_g; 1, M | \frac{3}{2}, m'_e \right\rangle \left\langle \frac{1}{2}, m_g; 1, M' | \frac{3}{2}, m''_e \right\rangle \times \\ & \times c_e^{m'_e} c_e^{m''_e} P_{01}^{ss'} \left(M \right), \quad (1) \end{split}$$

где

$$\sigma_0 = \frac{2\pi}{K^2} \frac{1}{1+\alpha} \frac{2I_e + 1}{2I_g + 1},$$
$$P_{01}^{ss'}(M) = (-1)^{M+M'} (\mathbf{h}_0^s \mathbf{n}_{-M}) (\mathbf{h}_1^{s'} \mathbf{n}_{-M'})^*,$$

 σ_0 — максимальное резонансное поперечное сечение, $P_{01}^{ss'}(M)$ — поляризационные множители, индексы s, s' обозначают поляризацию излучения в падающей и рассеянной волнах, Γ — естественная ширина возбужденного уровня ядра.

В приведенной формуле приняты обозначения: волновое число $K = 2\pi/\lambda$, λ — длина волны излучения, α — коэффициент внутренней электронной конверсии, $\langle \frac{1}{2}, m_g; 1, M | \frac{3}{2}, m_e \rangle$ — коэффициенты Клебша-Гордана, произведение которых характеризует вероятность перехода между подуровнями основного и возбужденного состояний (с учетом передачи момента импульса в системе ядро плюс гаммаквант). Скобки ($\mathbf{h}^{s}\mathbf{n}_{-M}$) и ($\mathbf{h}^{s'}\mathbf{n}_{-M'}$)* представляют собой скалярные произведения векторов поляризации излучения и магнитного момента перехода на этапах возбуждения и девозбуждения ядра.

В силу смешивания состояний по проекциям спина упругое рассеяние с возбуждением любого ядерного перехода между подуровнями основного и возбужденного состояний происходит по четырем путям в спиновом пространстве. В качестве примера рассмотрим упругое рассеяние при возбуждении ядерного перехода с минимальной энергией (уровень e = 1) при ориентации локального магнитного поля +Z, см. первый столбец табл. 1. Для этого перехода в спиновом пространстве открыты пути рассеяния, показанные в табл. 2.

В первой строке таблицы показаны начальные, промежуточные и конечные значения квантовых чисел спиновых проекций в основном и в возбужденном состояниях для четырех путей рассеяния, при этом в силу смешивания спиновых состояний на возбужденном подуровне процессы возбуждения и девозбуждения ядра могут происходить с участием разных проекций спина в возбужденном состоянии, как это видно на втором и третьем путях рассеяния; во второй строке магнитные квантовые числа излучения на стадиях возбуждения и девозбуждения ядра в рассматриваемых переходах; в третьей строке — значения коэффициентов Клебша – Гордана переходов; в четвертой строке — произведения амплитуд вероятностей обнаружения ядра с соответствующей проекций спина в промежуточном (возбужден-

π на входе	σ на входе
$\left({\bf h}_{0}^{\pi}{\bf n}_{+1}\right)\left({\bf h}_{1}^{\pi}{\bf n}_{+1'}\right)^{*}+\left({\bf h}_{0}^{\pi}{\bf n}_{+1}\right)\left({\bf h}_{1}^{\sigma}{\bf n}_{+1'}\right)^{*}$	$\left(\mathbf{h}_{0}^{\sigma}\mathbf{n}_{+1} ight)\left(\mathbf{h}_{1}^{\sigma}\mathbf{n}_{+1^{\prime}} ight)^{*}+\left(\mathbf{h}_{0}^{\sigma}\mathbf{n}_{+1} ight)\left(\mathbf{h}_{1}^{\pi}\mathbf{n}_{+1^{\prime}} ight)^{*}$
$\left({\bf h}_{0}^{\pi}{\bf n}_{+1}\right)\left({\bf h}_{1}^{\pi}{\bf n}_{-1'}\right)^{*}+\left({\bf h}_{0}^{\pi}{\bf n}_{+1}\right)\left({\bf h}_{1}^{\sigma}{\bf n}_{-1'}\right)^{*}$	$\left({\bf h}_0^{\sigma}{\bf n}_{+1}\right)\left({\bf h}_1^{\sigma}{\bf n}_{-1'}\right)^* + \left({\bf h}_0^{\sigma}{\bf n}_{+1}\right)\left({\bf h}_1^{\pi}{\bf n}_{-1'}\right)^*$
$\left({\bf h}_0^{\pi}{\bf n}_{-1}\right)\left({\bf h}_1^{\pi}{\bf n}_{+1'}\right)^* + \left({\bf h}_0^{\pi}{\bf n}_{-1}\right)\left({\bf h}_1^{\sigma}{\bf n}_{+1'}\right)^*$	$\left(\mathbf{h}_{0}^{\sigma}\mathbf{n}_{-1}\right)\left(\mathbf{h}_{1}^{\sigma}\mathbf{n}_{+1'}\right)^{*}+\left(\mathbf{h}_{0}^{\sigma}\mathbf{n}_{-1}\right)\left(\mathbf{h}_{1}^{\sigma}\mathbf{n}_{+1'}\right)^{*}$
$\left({{{\mathbf{h}}_0^\pi {{\mathbf{n}}_{ - 1}}} \right)\left({{{\mathbf{h}}_1^\pi {{\mathbf{n}}_{ - 1'}}} \right)^*} + \left({{{\mathbf{h}}_0^\pi {{\mathbf{n}}_{ - 1}}} \right)\left({{{\mathbf{h}}_1^\sigma {{\mathbf{n}}_{ - 1'}}} \right)^*}$	$\left({{\bf{h}}_0^\sigma {{\bf{n}}_{ - 1}}} \right)\left({{\bf{h}}_1^\sigma {{\bf{n}}_{ - 1'}}} \right)^* + \left({{\bf{h}}_0^\sigma {{\bf{n}}_{ - 1}}} \right)\left({{\bf{h}}_1^\pi {{\bf{n}}_{ - 1'}}} \right)^*$

Таблица 3. Поляризационные множители для π - и σ -поляризованного падающего излучения при ядерном переходе на уровень e = 1 и разных путях рассеяния в спиновом пространстве

ном) состоянии. Из табл. 2, в частности, следует, что множитель $(-1)^{M+M'}$ в формуле (1) для амплитуды на всех путях рассеяния равен единице. Если частота падающего излучения ω совпадает с резонансной частотой рассматриваемого перехода на уровень e = 1, то выражение для амплитуды рассеяния приобретает вид

$$f_{01}^{ss'} = -i\frac{3}{8\pi}K\sigma_0 \left\{ \frac{1}{4}\alpha_1^2(\mathbf{h}_0^s\mathbf{n}_{+1})(\mathbf{h}_1^{s'}\mathbf{n}_{+1})^* + \frac{1}{2\sqrt{12}}\alpha_1\alpha_2 \left[(\mathbf{h}_0^s\mathbf{n}_{+1})(\mathbf{h}_1^{s'}\mathbf{n}_{-1})^* + (\mathbf{h}_0^s\mathbf{n}_{-1})(\mathbf{h}_1^{s'}\mathbf{n}_{+1})^* \right] + \frac{1}{12}\alpha_2^2(\mathbf{h}_0^s\mathbf{n}_{-1})(\mathbf{h}_1^{s'}\mathbf{n}_{-1})^* \right\}.$$
 (2)

Здесь для амплитуд спиновых состояний использованы обозначения $c_1^{-3/2} = \alpha_1$ и $c_1^{+1/2} = \alpha_2$, по условию нормировки $\alpha_1^2 + \alpha_2^2 = 1$. Как следует из уравнения (2), существенную роль в формировании интерференционной картины играют поляризационные множители $(\mathbf{h}_0^s \mathbf{n}_{-M})(\mathbf{h}_1^{s'} \mathbf{n}_{-M'})^*$. При произвольной линейной поляризации падающего излучения амплитуда будет представлять собой матрицу второго ранга

$$f_{01}^{ss'} = \begin{vmatrix} f_{01}^{\pi\pi} & f_{01}^{\pi\sigma} \\ f_{01}^{\sigma\pi} & f_{01}^{\sigma\sigma} \end{vmatrix} .$$
(3)

Если же падающее излучение поляризовано по базисным направлениям π или σ , амплитуда задается соответственно только первой или второй строкой. Тогда для каждой π - или σ -поляризации падающего излучения в амплитуде рассеяния (формула (2)) имеем четыре поляризационных множителя, каждый в виде суммы двух слагаемых, см. табл. 3.

В табл. 4 представлены выражения поляризационных множителей для π -или σ -поляризованного падающего излучения при переходе на уровень e = 1. **Таблица 4.** Решения для поляризационных множителей на четырех путях в спиновом пространстве для π - и σ -поляризованного падающего излучения при ядерном переходе на уровень e = 1

π на входе	σ на входе
$\frac{1}{2}\left(1+i\cos\theta\right)$	$\frac{1}{2}\left(\cos\theta-i\right)$
$-rac{1}{2}\left(1-i\cos heta ight)$	$\frac{1}{2}\left(\cos\theta+i\right)$
$-\frac{1}{2}\left(1+i\cos\theta\right)$	$rac{1}{2}\left(\cos heta-i ight)$
$\frac{1}{2}\left(1-i\cos\theta\right)$	$\frac{1}{2}\left(\cos\theta+i\right)$

Аналогичным образом можно получить выражения поляризационных множителей для всех других ядерных переходов.

3. ПОЛЯРИЗАЦИЯ ВОЛН НА РАЗНЫХ ПУТЯХ В СПИНОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Чтобы проиллюстрировать интерференцию волн в спиновом пространстве, построим полярные орбиты для разных путей в этом пространстве. Полярной орбитой будем называть траекторию, которую описывает конец вектора магнитного волнового поля в плоскости, перпендикулярной к направлению рассеяния. Запишем временную зависимость вектора магнитного поля в определенной плоскости:

$$\mathbf{H}_{1}^{(e)}(t) = \mathbf{H}_{1}^{s}(t) + \mathbf{H}_{1}^{s'}(t).$$

Так, например, если при ориентации локального магнитного поля +Z π -поляризованное излучение возбуждает ядерный переход на уровень e = 1, то для напряженности магнитного поля в первой парциальной волне будем иметь

 $\mathbf{H}_{1}^{(1)}(t) \propto \alpha_{1}^{2}(\mathbf{h}_{1}^{\sigma} \cos \theta \cos \omega t + \mathbf{h}_{1}^{\pi} \sin \omega t).$



Рис. 2. Полярные орбиты при рассеянии в первичном направлении в пределах одного периода колебаний на каждом из четырех путей в спиновом пространстве. Локальное магнитное поле на ядре 10кЭ. Верхние панели соответствуют возбуждению переходов $-1/2 \rightarrow (-3/2, +1/2)$, нижние панели соответствуют возбуждению переходов $+1/2 \rightarrow (+3/2, -1/2)$. Внешние орбиты (зеленые) относятся к путям рассеяния $-\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$ (+*Z*), и $+\frac{1}{2} \rightarrow +\frac{3}{2} \rightarrow +\frac{1}{2}$ (-*Z*), средние орбиты (голубые и коричневые) относятся к путям $-\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{3}{2} \rightarrow +\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$ (+*Z*) и $+\frac{1}{2} \rightarrow +\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$ (-*Z*), к средние $-\frac{1}{2} \rightarrow +\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$ (+*Z*) и $+\frac{1}{2} \rightarrow +\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$ (-*Z*), и $-\frac{1}{2} \rightarrow +\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$ (+*Z*) и $+\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2} \rightarrow +\frac{1}{2}$ (-*Z*). Внутренние орбиты (красные) относятся к путям рассеяния $-\frac{1}{2} \rightarrow +\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$ (+*Z*) и $+\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2} \rightarrow +\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2} \rightarrow +\frac{1}{2}$ (-*Z*). Стрелки указывают направление циркуляции вектора напряженности поля в каждой из волн от начальной фазы

При возбуждении ядра σ -поляризованным излучением на той же частоте для напряженности магнитного поля рассеянной волны получим

$$\mathbf{H}_{1}^{(1)}(t) \propto \alpha_{1}^{2} \left(\mathbf{h}_{1}^{\sigma} \cos \theta \sin \omega t - \mathbf{h}_{1}^{\pi} \cos \omega t \right).$$

Аналогично рассчитываются вклады трех остальных парциальных волн. Амплитуды составляющих волн, которые задаются коэффициентами α_1 и α_2 , зависят от соотношения энергий магнитного и электрического взаимодействия ядра с внутрикристаллическими полями в кристалле бората железа [1,2]. При комнатной температуре магнитное поле на ядре равно 330кЭ и сверхтонкое магнитное взаимодействие доминирует над электрическим квадрупольным. При таком поле $\alpha_1 = 0.9993$, а $\alpha_2 = 0.0383$, и согласно формуле (2) фактически один путь в спиновом пространстве определяет амплитуду рассеянной волны. В этом случае для любой поляризации падающего излучения ядро в первичном направлении, $\theta = 0$, излучает циркулярную правополяризо-

(1)



Рис. 3. Полярные орбиты суммы парциальных волн, представленных на рис. 2, в случаях падающего π- и *σ*-поляризованного излучения при ориентациях локального магнитного поля +*Z* (голубые точки) и -*Z* (розовые точки)

ванную волну. При нагревании кристалла магнитное поле на ядре уменьшается вплоть до нуля при температуре Нееля. В результате при сближении энергий взаимодействия ядра с магнитным и электрическим полями вклады остальных путей рассеяния в спиновом пространстве могут оказаться существенными.

На рис. 2 показаны полярные орбиты для парциальных волн, рассеянных в первичном направлении. Соотношение амплитуд парциальных волн позволяет определить вклады путей рассеяния в спиновом пространстве. Орбиты рассчитаны для противоположных направлений магнитного поля на ядре +Z, и -Z и для разных, π и σ , поляризаций падающего излучения при возбуждении перехода на уровень е = 1. Магнитное поле на ядре принято равным 10 кЭ, которым оно является при температуре недалеко от точки Нееля в борате железа. При этом поле амплитуды $\alpha_1 \approx 0.647, \alpha_2 \approx 0.763$, так что вклад всех парциальных волн в этом случае становится соизмеримым. Чтобы получить в чистом виде интерференцию волн в спиновом пространстве, предполагалось, что возбуждаемый резонанс изолирован, т.е. влияние других разрешенных резонансных переходов на этой частоте излучения не учитывалось. Этот вопрос будет рассмотрен ниже.

Как видно на рис. 2, парциальные волны для всех четырех путей рассеяния при любой ориентации магнитного поля и поляризации падающего излучения имеют круговую поляризацию, но отличаются по амплитуде, начальной фазе и направлению циркуляции. Вместе с тем, волны, отвечающие определенному пути рассеяния, имеют одинаковые амплитуды, ср. панели а,б,в,г на рис. 2. На первом пути (внешние орбиты на всех панелях) рождаются волны с максимальной амплитудой; при поле +Z эти волны правополяризованы с начальными фазами в случае a - 0 рад, в случае $\delta - \pi/2$ рад, при поле -Z волны левополяризованы с начальными фазами в случае $e - \pi$ рад, а в случае $r = \pi/2$ рад. На втором и третьем путях (средние орбиты на всех панелях) волны имеют одинаковую амплитуду, но противоположные, правое и левое, направления циркуляции вектора напряженности поля. Суммы этих двух волн представляют собой линейно-поляризованные π- и σ-волны соответственно в случаях а, в и б, г. На четвертом пути (внутренние орбиты на всех панелях) рождаются волны с наименьшей амплитудой. Наложение волн на первом и четвертом путях приводит к возникновению эллиптически-поляризованной волны. Если на ядро падает π -поляризованная волна, то *π*-компонента рассеянной эллиптически-поляризованной волны оказывается в противофазе с суммой волн на втором и третьем путях. В этом случае наблюдается деструктивная интерференция волн в спиновом пространстве. Если на ядро падает σ -поляризованная волна, то *σ*-компонента рассеянной эллиптически-поляризованной волны оказывается в фазе с суммой волн на втором и третьем путях. И тогда наблюдается конструктивная интерференция волн в спиновом пространстве. Приведенная иллюстрация раскрывает механизм формирования волн, когерентно-рассеянных в первичном направлении.

На рис. 3 сравниваются просуммированные по путям в спиновом пространстве волны при значе-



Рис. 4. Полярные орбиты суммарных волн, рассеянных в первичном направлении, при значениях магнитного поля на ядре 330 кЭ (зеленые точки), при поле 50 кЭ (оранжевые точки), при поле 20 кЭ (голубые точки) и при поле 10 кЭ (красные точки), для падающих *π*- и *σ*-поляризованных волн при ориентации локального поля +*Z*

нии локального магнитного поля 10 кЭ для падающего *π*- и *σ*-поляризованного излучения и для разных ориентаций локального магнитного поля: +Z и -Z. В результате наложения четырех парциальных волн, представленных на рис. 2, формируются эллиптически-поляризованные волны с большой осью эллипса, лежащей в направлении о-поляризации. Как видно, волны имеют идентичную по форме поляризацию, но разные направление циркуляции и начальные фазы, и, что самое интересное, для π- и σ-поляризации падающего излучения они значительно различаются по амплитуде. При падении на ядро σ-поляризованного излучения амплитуда рассеянной волны более чем в пять раз превышает амплитуду при падающем *п*-поляризованном излучении. Это наиболее яркий эффект интерференции волн в спиновом пространстве. Основной причиной этого эффекта является деструктивное сложение парциальных волн при падении *π*-поляризованного излучения и, напротив, конструктивное сложение парциальных волн в случае падающего σ поляризованного излучения. Если говорить о сумме волн, рассеянных двумя ядрами, на одном из которых ориентация поля +Z, а на другом -Z, то суммарные волны оказываются линейно-поляризованы, так же как и возбуждающее ядра излучение. При этом наблюдается существенное превосходство амплитуды σ-поляризованной волны.

Интересно проследить, как меняется амплитуда и поляризация суммарной рассеянной волны при снижении напряженности локального магнитного поля от максимального значения 330 кЭ при комнатной температуре до минимального в окрестности температуры Нееля. На рис. 4 показаны полярные орбиты при некоторых значениях напряженности локального поля в указанном диапазоне. При поле на ядре 330 кЭ открыт практически единственный путь в спиновом пространстве, а именно, $-\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$. В этом случае при падающем π и о-поляризованном излучении поляризация рассеянных волн является круговой и амплитуды волн равны между собой (орбиты из зеленых точек). Начиная с поля 50 кЭ, волны приобретают эллиптическую поляризацию, при этом наблюдается их заметное различие как по амплитуде, так и по степени эллиптичности (ср. орбиты из оранжевых точек для π - и σ -поляризации падающего излучения). А при полях 20 кЭ и 10 кЭ рассеянное излучение в рассматриваемых случаях уже существенно отличается по амплитуде волнового поля. Физической причиной этого эффекта является, как говорилось выше, интерференция путей рассеяния в спиновом пространстве. Если при падающем *π*-поляризованном излучении интерференция является деструктивной, то при падающем σ-поляризованном излучении она оказывается конструктивной.



Рис. 5. Энергетические спектры когерентного рассеяния в первичном направлении π- и σ-поляризованного излучения ядром ⁵⁷Fe в условиях комбинированного магнитного и электрического квадрупольного сверхтонкого взаимодействия ядра с внутрикристаллическими полями в кристалле ⁵⁷FeBO₃. На верхних панелях представлены спектры рассеяния π -поляризованного излучения при ориентации магнитного локального поля +Z и -Z (геометрия рассеяния на рис. 1). На нижних панелях — спектры рассеяния σ -поляризованного излучения при тех же ориентациях магнитного локального поля. Представлены спектры для значений магнитного поля 330 кЭ, 50 кЭ и 2 кЭ — линии соответственно оранжевого, голубого и лилового цвета

Подобные рассуждения можно распространить на все остальные разрешенные ядерные переходы в энергетическом пространстве. И во всех случаях наблюдается сильный эффект интерференции в спиновом пространстве. В конечном счете этот эффект отражается на форме и интенсивности линий в спектре сверхтонкого расщепления.

4. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ РАССЕЯНИЯ

Энергетическая зависимость интенсивности когерентного рассеяния содержит резонансные линии, вызванные переходами между основным и возбужденным состояниями ядра. При выбранной геометрии рассеяния и ориентации локального магнитного поля разрешены четыре ядерных перехода, о чем говорилось выше. До тех пор пока нас интересовала исключительно интерференция в спиновом пространстве, мы рассматривали только один из этих переходов. Это был переход, который отвечает наименьшей резонансной энергии. При этом присутствие остальных переходов было проигнорировано. В действительности, при заданной частоте падающего излучения возбуждаются все разрешенные переходы с той или иной амплитудой вероятности и, следовательно, общая картина интерференции должна включать в себя интерференцию как в спиновом, так и в энергетическом пространствах. В настоящем разделе представлены энергетические спектры рассеяния, в которых учтено совместное



Рис. 6. Энергетические спектры когерентного рассеяния в первичном направлении π- и σ-поляризованного излучения двумя ядрами ⁵⁷Fe в условиях комбинированного магнитного и электрического квадрупольного сверхтонкого взаимодействия ядра с внутрикристаллическими полями в кристалле ⁵⁷FeBO₃. Локальные магнитные поля на ядрах имеют противоположную ориентацию ±*Z*. Спектры рассчитаны для значений магнитного поля 330 кЭ, 50 кЭ и 2 кЭ — линии соответственно оранжевого, голубого и лилового цвета

действие интерференции излучения в названных пространствах. В качестве примера на рис. 5 показаны спектры рассеяния π - и σ -поляризованного излучения одиночным ядром при двух ориентациях на нем кристаллического магнитного поля $\pm Z$.

При величине магнитного поля 330 кЭ наблюдается максимальное разделение резонансных линий. Интерференция в энергетическом пространстве при таком большом расщеплении спектра играет совсем незначительную роль. При поле 330 кЭ фактически открыт только один путь рассеяния в спиновом пространстве, поэтому и в спиновом пространстве интерференция практически отсутствует. В этом случае, как видно на рисунке, все линии в спектрах имеют одинаковую форму и интенсивность независимо от поляризации падающего излучения и направления локального магнитного поля на ядре. При полях 50 кЭ и 2 кЭ амплитуды на путях в спиновом пространстве становятся сопоставимыми. Очевидно, что в этом случае роль интерференции путей рассеяния в спиновом пространстве существенно возрастает. Помимо этого значительно усиливается роль интерференции и в энергетическом пространстве, поскольку резонансные линии заметно сближаются. Обратим внимание на то, что спектры рассеяния при локальном поле 2 кЭ в рассматриваемых случаях существенно различаются. В случае входной *п*-поляризации спектр состоит в основном из одиночного пика, который для поля с ориентацией + Z сопоставим по интенсивности с резонансами при больших полях, но практически полностью подавлен для поля с ориентацией-Z. Спектры в случае входной σ-поляризации состоят уже из двух пиков. Их интенсивность значительно превышает не только интенсивность резонансов для *π*поляризации при данном поле, но и интенсивность резонансов в спектрах для σ -поляризации при поле 330 кЭ. Особенно поражает интенсивность пика при входной σ -поляризации и ориентации поля -Z. Различие спектров при ориентациях магнитного поля $\pm Z$ для данной поляризации раскрывает сильную анизотропию ядерного резонансного рассеяния в рассматриваемых условиях сверхтонкого взаимодействия.

Спектры рассеяния π - и σ -поляризованного излучения ядерной ячейкой, состоящей из двух ядер, на которых локальные магнитные поля имеют противоположную направленность, показаны на рис. 6. Роль поляризации падающего излучения в величине интенсивности рассеянного излучения ярко проявляется при локальном магнитном поле на ядре 2 кЭ. Различие в интенсивности рассеянного излучения при переходе от падающего π -поляризованного излучения к σ -поляризованному существенно — примерно в 15 раз. Экспериментально подобный эффект можно было наблюдать в спектрах полного



Рис. 7. Энергетические спектры когерентного рассеяния в первичном направлении π- и σ-поляризованного излучения двумя ядрами ⁵⁷Fe: в условиях чисто магнитного сверхтонкого расщепления ядерных уровней — линии оранжевого цвета, и комбинированного магнитного и электрического квадрупольного сверхтонкого расщепления ядерных уровней в кристалле ⁵⁷FeBO₃ — линии голубого цвета

внешнего отражения от кристалла бората железа резонансного поляризованного гамма-излучения.

Необходимо подчеркнуть, что в отсутствие квадрупольного электрического сверхтонкого взаимодействия для всех рассмотренных ситуаций спектры для *π*- и *σ*-поляризованного падающего излучения ничем не отличались бы при данном магнитном расщеплении. Эти спектры для двух значений магнитного поля 50 кЭ и 2 кЭ представлены на рис. 7 линиями оранжевого цвета. Действительно, никакого различия в форме спектров для данного поля не наблюдается. Для сравнения на рис. 7 показаны также спектры при совместном сверхтонком взаимодействии ядра с электрическим и магнитным полями в кристалле бората железа — линии голубого цвета. Очевидно включение электрического взаимодействия существенно отражается на форме и интенсивности линий. Наблюдается значительное различие спектров при разных поляризациях падающего излучения. Таким образом, мы видим, что, хотя при сближении ядерных резонансов роль интерференции в энергетическом пространстве возрастает, решающую роль в формировании спектров играет все же интерференция в спиновом пространстве.

В заключение отметим, что сильная анизотропия рассеяния как результат многопутевой интерференции резонансного излучения в спиновом пространстве, может сыграть большую роль в поисках повышения интенсивности чисто ядерной резонансной дифракции [8–12] в источнике синхротронного мессбауэровского излучения [13–15].

Благодарности. Автор выражает свою признательность и благодарность А. И. Чумакову за полезные дискуссии при подготовке статьи.

ЛИТЕРАТУРА

- G. V. Smirnov, A. I. Chumakov, V. B. Potapkin, R. Rueffer, and S. L. Popov, Phys. Rev. A 84, 053851 (2011).
- 2. G. V. Smirnov, Hyper. Inter. 25, 91 (2000).
- Е. П. Степанов, А. Н. Артемьев, И. П. Перстнев, В. В. Скляревский, Г. В. Смирнов, ЖЭТФ 66, 1150 (1974) [JETP 36, 562 (1974)].
- U. van Buerck, G. V. Smirnov, R. L. Moessbauer, and Th. Hertrich, J. Phys.: Condens. Matter 2, 3989 (1990).
- Г. В. Смирнов, М. В. Зелепухин, У. ван Бюрк, Письма в ЖЭТФ 43, 274 (1986) [JETP Lett. 43, 353 (1986)].
- G. T. Trammell and J. P. Hannon, Phys. Rev. B 18, 165 (1978); B 19, 3835 (1979).
- E. Gerdau, R. Rueffer, R. Hollatz, and J. P. Hannon, Phys. Rev. Lett. 57, 1141 (1986).
- В. А. Беляков, Ю. М. Айвазян, Письма в ЖЭТФ 7, 477 (1968) [JETP Lett. 7, 368 (1968)].

- В. А. Беляков, Ю. М. Айвазян, Письма в ЖЭТФ
 9, 637 (1969) [JETP Lett. 9, 393 (1969)].
- 10. Г. В. Смирнов, В. В. Скляревский, Р. А. Восканян, А. Н. Артемьев, Письма в ЖЭТФ 9, 123 (1969) [JETP Lett. 9, 70 (1969)].
- R. M. Mirzababaev, G. V. Smirnov, V. V. Sklyarevskii, A. N. Artem'ev, A. N. Izrailenko, and A. V. Babkov, Phys. Lett. A 37, 441 (1971).
- R. M. Mirzababaev, V. V. Sklyarevskii, and G. V. Smirnov, Phys. Lett. A 41, 349 (1972).
- 13. G. V. Smirnov, U. van Buerck, A. I. Chumakov, A. Q. R. Baron, and R. Rueffer, Phys. Rev. B 55, 5811 (1997).
- 14. T. Mitsui, M. Seto, S. Kikuta, N. Hirao, Y. Ohishi, H. Takei, Y. Kobayashi, S. Kitao, S. Higashitaniguchi, and R. Masuda, Jpn. J. Appl. Phys. 46, 821 (2007).
- V. B. Potapkin, A. I. Chumakov, G. V. Smirnov, C. McCammon, and L. Dubrovinsky, J. Synchrotron Rad. 19, 559 (2012).

А. Саргсян, А. Тоноян, Д. Саркисян*

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

> Поступила в редакцию 25 января 2021 г., после переработки 18 февраля 2021 г. Принята к публикации 26 февраля 2021 г.

Впервые использованы магнито-индуцированные (MI) переходы атомов ⁸⁵Rb, D_2 -линии, $F_g = 2 \rightarrow F_e = 4$ в случае циркулярно поляризованного σ^+ -излучения для формирования оптических темных резонансов в сильных магнитных полях (вплоть до 1 кГс) в процессе электромагнитно-индуцированной прозрачности (EIT). Используется ячейка толщиной 1.5 мкм, заполненная парами атомов Rb. Вероятности двух из пяти MI-переходов (которые эффективно формируются только при σ^+ -поляризованном излучении) в интервале магнитных полей 0.2–1 кГс превосходят вероятности «обычных» атомных переходов, что делает целесообразным их использование в Λ -системах для формирования темного резонанса (DR). Установлено следующее правило: для формирования темного резонанса в Λ -системе при использовании пробного излучения на частоте MI-переходов в случае σ^+ -поляризованного излучения поляризация излучения связывающего лазера также должна быть σ^+ ; DR не формируется в случае поляризации излучения связывающего лазера σ^- , что подтверждается и расчетной теоретической кривой. Отмечено существенное преимущество использования MI-резонансов для процесса EIT по сравнению с использованием обычных атомных переходов 85 Rb, D_2 -линии. Формирование темных резонансов в сильных магнитных полях, когда имеет место смещение частоты DR на несколько ГГц, имеет практические применения.

DOI: 10.31857/S0044451021070038

1. ВВЕДЕНИЕ

Многочисленные применения оптических процессов, протекающих в парах атомов щелочных металлов (Cs, Rb, K, Na), заключенных в оптические ячейки (в том числе и в миниатюрные ячейки), такие как атомные оптические часы, атомные оптические магнитометры, атомные гироскопы, маркеры частот атомных переходов и т.д., приведены в обзорной работе [1]. Поэтому поведение атомов щелочных металлов, в том числе и в магнитных полях, продолжают представлять научный интерес. В сильных магнитных полях может происходить значительная модификация вероятности (интенсивности) атомных переходов щелочных металлов (Cs, Rb, K, Na) [2–9]. Для разрешенных (в дипольном приближении) переходов между нижними и верхними уровнями сверхтонкой структуры для полного момента атома F в нулевом магнитном поле должны выполняться следующие правила отбора между нижними F_g и верхними F_e уровнями сверхтонкой структуры атомов: $F_e - F_g = \Delta F = 0, \pm 1$ [2]. В последние годы большой интерес вызывают атомные переходы между нижними и верхними уровнями сверхтонкой структуры, для которых выполняются условия $F_e - F_g = \Delta F = \pm 2$ (вероятность таких переходов в нулевом магнитном поле нулевая). Сушественная молификация вероятностей переходов, в частности гигантское возрастание вероятностей магнито-индуцированных (MI) атомных переходов, происходит из-за эффекта «перемешивания» магнитных подуровней для нижнего F_q или верхнего Fe уровней с магнитными подуровнями близлежащего перехода; эффект «перемешивания» индуцируется внешним магнитным полем [2,6,8,10]. Интерес к МІ-переходам обусловлен тем, что в широких интервалах магнитных полей вероятности этих переходов могут значительно превосходить вероятности обычных атомных переходов, разрешенных и в отсутствие магнитного поля. Отметим также, что

^{*} E-mail: sarkdav@gmail.com

величина производной частотных сдвигов по магнитному полю S [МГц/Гс] (в англоязычной литературе Slope) в сильных магнитных полях может достигать 4 МГц/Гс, что примерно в 3 раза больше величины S для обычных атомных переходов [11]. Поэтому в сильных магнитных полях частотный сдвиг МІ-переходов может достигать нескольких десятков ГГц, что представляет практический интерес для освоения новых частотных диапазонов, к примеру, для стабилизации частоты лазеров на частотах, сильно смещенных относительно начальных частот переходов в невозмущенных атомах [12, 13].

В работах [7,8] было установлено следующее правило для вероятностей (интенсивностей) МІ-переходов: вероятности МІ-переходов с $\Delta F = +2$ максимальны (а также максимально число формируемых МІ-переходов) для излучения σ^+ , в то время как вероятности МІ-переходов с $\Delta F = -2$ максимальны (а также максимально их число) для излучения σ^- . Для некоторых МІ-переходов различие в интенсивности при использовании излучений σ^+ и σ^- может достигать нескольких порядков. Отметим, что МІ-переходы могут быть использованы во всех тех же задачах, в которых используются обычные атомные переходы. В настоящей работе впервые продемонстрирована перспективность применения МІ-переходов $^{85}\mathrm{Rb},\,D_2$ -линии, $F_q=2 \to F_e=4$ для процесса электромагнитно-индуцированной прозрачности (EIT) в сильных магнитных полях. Это обусловлено двумя причинами: 1) поскольку вероятность МІ-перехода может существенно превосходить вероятность «обычного» атомного перехода, целесообразным является его использование для перехода на частоте «связывающего» или пробного лазеров в Л-системе; 2) в сильных магнитных полях, наряду с существенным увеличением вероятности МІ-перехода, происходит его значительный частотный сдвиг относительно начального положения, что имеет отмеченное выше практическое применение [12]. Для реализации процесса ЕІТ в микроячейке, заполненной парами атомов Rb, использовалось излучение двух непрерывных узкополосных диодных лазеров с длиной волны 780 нм, которые формировали пробное и связывающие излучения.

2. РАСЧЕТНЫЕ КРИВЫЕ ДЛЯ ВЕРОЯТНОСТЕЙ И ЧАСТОТНЫХ СДВИГОВ МІ-ПЕРЕХОДОВ ⁸⁵Rb

На рис. 1
а показаны магнито-индуцированные переходы $F_g=2 \to F_e=4$ с номерам
и ①–⑤ при использовании излучения с круговой поляризаци-



Рис. 1. *а*) Диаграмма переходов ⁸⁵ Rb, D_2 -линия, переходы 1–5 (указаны в кружках) запрещены при B = 0, однако в магнитном поле происходит гигантское возрастание их вероятностей, переходы для σ^+ -излучения. *б*) Вероятности МІ-переходов и переходов $F_g = 2 \rightarrow F_e = 3'$ для σ^+ -излучения в зависимости от величины B. *б*) Частотные смещения МІ-переходов и переходов $F_g = 2 \rightarrow F_e = 3$ (переходы 1–5) в зависимости от величины B, пунктирная линия показывает зависимость перехода ⁸⁷ Rb от величины B (см. текст)

ей σ^+ . Кривые на рис. 1 (а также на рис. 6) рассчитаны по известной теоретической модели, которая описывает модификацию вероятности атомного перехода в магнитном поле с помощью матрицы гамильтониана с учетом всех переходов внутри сверхтонкой структуры и детально изложена в ряде работ, к примеру [2, 6, 8]. Зависимости вероятностей МІ-переходов (1)–(5) от величины магнитного поля В показаны на рис. 16: видно, что вероятности МІ-переходов с номерами (4) и (5) в интервале B = 0.2 - 1 кГс наибольшие среди всех атомных переходов с нижнего уровня $F_q = 2$, а в интервале B = 1-2 кГс все еще достаточны для их регистрации и применения. Частотные сдвиги МІ-переходов (1-5) и переходов $F_q = 2 \rightarrow F_e = 3$ для излучения σ^+ в зависимости от *B* показаны на рис. 1*e*. Как видно, в интервале 0.6 – 1 кГс МІ-переходы с номерами ④ и ⑤ не имеют частотных пересечений с другими атомными переходами, что делает их удобными для применений. Пунктирной линией показана частотная зависимость перехода атома $^{87}\mathrm{Rb},\ F_g=1,\ m_F=-1$ \rightarrow $F_e=2,\ m_F=0,\ \mathrm{koto-}$ рый при полях, больших 1 кГс, частотно пересекается с МІ-переходом с номером (4). Отметим, что при использовании излучения с круговой поляризацией σ^- формируется только один МІ-переход $F_q = 2$, $m_F = -2 \rightarrow F_e = 4, m_F = -3,$ вероятность которого в 4 раза меньше вероятности МІ-перехода с номером (5).

3. ЭКСПЕРИМЕНТ

3.1. Экспериментальная установка

Схема экспериментальной установки показана на рис. 2. Для формирования конфигурации Л-системы с использованием атомных уровней, приведенных на вставке рис. 2, использовалось излучение двух непрерывных узкополосных диодных лазеров с внешним резонатором с длиной волны 780 нм. Пробное излучение с частотой ν_P формировалось лазером "MOGLabs cateve" и имело спектральную ширину ~ 100 кГц, а его частота сканировалась по МІ-переходам $2 \rightarrow 4'$ (здесь и ниже верхние уровни отмечены штрихами). Связывающее излучение с частотой ν_C имело спектральную ширину ~ 1 МГц (лазер ECDL, выпускаемый под товарной маркой VitaWave [14]). Часть (10%) излучения лазера ν_C направлялась на систему для осуществления стабилизации его частоты методом DAVLL [15], на рис. 2 не показано. Частота ν_C находилась в резонансе с соответствующими перехо-



Рис. 2. Схема экспериментальной установки. Используются два узкополосных лазера с $\lambda \approx 780$ нм. 1 - MЯ с Rb в печке (печка не показана), $2 - \phi$ отодиоды, Ref. — узел формирования частотного репера; $\varphi -$ угол между пучками ν_P и ν_C , $\varphi = 20$ мрад, 3 -цифровой осциллограф, IF — фильтр, BD — преграда для пучка ν_C , PM — сильный магнит. На вставке — используемые для формирования Λ -системы уровни и переходы $^{85}\mathrm{Rb}$, D_2 -линии, для частот пробного ν_P и связывающего ν_C излучений с круговыми поляризациями σ^+

дами $3 \rightarrow 4'$ между нижними и верхними зеемановскими подуровнями. Соответствующие энергетические уровни
 $\Lambda\mathchar`-$ системы $^{85}\mbox{Rb}, D_2\mbox{-линии, кото$ рые участвуют в формировании темного резонанса (DR) при использовании МІ-переходов с номерами ④ и ⑤, показаны на вставке рис. 2. В эксперименте необходимо было выяснить, какую круговую поляризацию σ^+ или σ^- должны иметь связывающее и пробное излучения для наиболее эффективного формирования процесса DR (к примеру, могло произойти так, что максимальная эффективность DR достигается при σ^+ -излучении для пробного излучения, однако связывающее излучение должно иметь σ^{-} -поляризацию), поэтому возникала необходимость иметь возможность независимого варьирования этих поляризаций. Неколлинеарная геометрия, показанная на рис. 2, позволяет это осуществить. В неколлинеарной геометрии (рис. 2) начальное расстояние между пробным и связывающим излучениями до начала схождения в ячейке составляет 2 см и для уменьшения угла схождения приблизительно до 20 мрад в микроячейке она помещалась на расстоянии 120 см. Вследствие расходимости лазерных пучков их диаметры возрастали до 2 мм (прямо на выходе из лазера диаметр 1 мм).

Ранее было показано, что использование сверхтонких ячеек с толщинами $L = \lambda, 2\lambda$ или 3λ , где λ — длина волны резонансного лазерного излучения (в нашем случае $\lambda = 780$ нм), позволяет формировать контрастный DR [16, 17]. Контраст (или «технический контраст») определяется как отношение изменения поглощения из-за эффекта EIT (это показывает величина амплитуды DR) к величине пикового поглощения паров [1, 16, 17]. Кроме того, при использовании ячеек, содержащих пары атомов металлов с толщиной столба паров ~ 1 мкм, могут быть использованы сильные постоянные магниты. Поэтому в эксперименте была использована микроячейка (MЯ) 1, заполненная парами атомов Rb, толщиной $L \approx 2\lambda \approx 1.56$ мкм (для деталей МЯ см. [18]). Поляризаторы Глана (GP) использовались для формирования линейно поляризованного излучения, которое с помощью четвертьволновой пластины преобразовывалось либо в излучение с круговой поляризацией σ^+ (левый круг), либо в излучение с круговой поляризацией σ^- (правый круг). Спектры пропускания регистрировались фотодиодами ФД-24К 2, далее сигнал усиливался и подавался на четырехканальный цифровой осциллограф Tektronix TDS2014B (3). Мошности связывающего и пробного излучений варьировались в интервалах 10–15 мВт (P_c) и 0.1–0.2 мВт (P_n) соответственно с помощью нейтральных фильтров (на рис. 2 не показаны).

Часть излучения пробного лазера направлялась на систему (Ref.) для формирования частотного репера с помощью дополнительной наноячейки Rb толщиной $L = \lambda = 780$ нм [19–21]. В эксперименте регистрировалось пробное излучение и для дополнительной селекции частоты ν_P использовался интерференционный фильтр IF (на длине волны $\lambda = 780$ нм, с шириной пропускания 10 нм). Для формирования магнитных полей использовался откалиброванный с помощью магнитометра Teslameter HT201 сильный постоянный магнит из сплава неодим-железо-бор, который помещался вблизи заднего окна МЯ и имел небольшое отверстие для прохождения лазерного излучения. Варьирование величины В осуществлялось изменением расстояния от магнита до окна МЯ. В работах [20, 22] было показано, что при толщине ячейки $L \approx \lambda$, 2λ , 3λ вследствие оптической накачки в спектре пропускания формируются так называемые селективные по атомным скоростям оптические резонансы (в англ. литературе — velocity selective optical pumping (VSOP)), которые имеют спектральную ширину в 10-20 раз уже доплеровской ширины. VSOP-резонансы демонстрируют уменьшение поглощения и расположены на частоте атомных переходов.

3.2. Экспериментальные результаты: применение МІ-переходов для получения DR

На рис. 3 кривая (1) показывает спектр пропускания пробного излучения, содержащий темный резонанс DR_5 (приложено продольное магнитное поле 770 Гс). При наличии магнитного поля формируются Л-системы с участием разных подуровней m_F , поэтому, используя представление в виде $|F, m_F\rangle$, можно записать: частота ν_P настроена на переход $|2, -2\rangle \rightarrow |4', -1'\rangle$ (это МІ-переход с номером (5)), а частота ν_C настроена на переход $|3,-2\rangle \rightarrow |4',-1'\rangle$ (Л-система для формирования DR₅ приведена на левой вставке). Мощности связывающего и пробного излучений составляют 15 мВт и 0.1-0.2 мВт соответственно. Температура резервуара МЯ (который содержит металлический Rb) примерно 100 °C, что обеспечивает концентрацию атомов $N \approx 5 \cdot 10^{12}$ см⁻³. Ярко выраженный DR₅ имеет контраст приблизительно 30%. На средней вставке показан аппроксимированный гауссовой кривой DR со спектральной шириной 20 МГц (ПШПВ полная ширина на полувысоте). Заметим, что, как показано в работе [23], наличие угла между пучками ν_C и ν_P приводит к дополнительному спектральному уширению DR. На спектре присутствуют также VSOP-резонансы, которые имеют бо́льшую спектральную ширину и меньшую амплитуду. DR₅ формируется только тогда, когда излучение ν_{C} имеет поляризацию σ^+ , а при поляризации σ^- имеет нулевую амплитуду. На рис. 3 кривая (2) показывает спектр пропускания пробного излучения, содержащий темный резонанс DR_4 , когда частота ν_P настроена на переход $|2, -1\rangle \rightarrow |4', 0'\rangle$ (это МІ-переход с номером (4)), а частота ν_C настроена на переход |3,-1
angle
ightarrow |4',0'
angle (Λ -система для этого случая показана на правой вставке). DR₄ формируется, только когда излучение ν_C имеет поляризацию σ^+ , а при поляризации σ^- имеет нулевую амплитуду. На рис. 3 кривая (3) показывает спектр пропускания пробного излучения, когда излучение ν_C отсутствует. В этом случае регистрируются только VSOP-резонансы со спектральной шириной 40-50 МГц, в частности, отмечены VSOP-резонансы на переходах под номерами ④ и ⑤. Кривая (4) показывает расчетный спектр пропускания только пробного излучения: наблюдается хорошее согласие расчетных амплитуд VSOP-резонансов и их частотных положений с экспериментальной кривой (3). Кривая (5) показывает реперный спектр 87 Rb, переходы $1 \to 0', 1', 2'$. Частотные сдвиги атомных переходов



Рис. 3. ⁸⁵Rb, D_2 -линия, B = 770 Гс, кривая (1) — спектр пропускания ν_P , содержащий резонанс DR₅, кривая (2) — спектр пропускания ν_P , содержащий резонанс DR₄, кривая (3) — спектр ν_P , когда нет излучения ν_C , кривая (4) — расчетный спектр пропускания пробного излучения, кривая (5) — реперный спектр ⁸⁷Rb при B = 0, переходы $1 \rightarrow 0', 1', 2'$. Левая и правая вставки — конфигурация частот ν_P и ν_C для формирования соответственно DR₅ и DR₄; на средней вставке показан профиль DR₅, аппроксимированный гауссовой кривой

отсчитываются от перехода $1 \rightarrow 2'$, частота которого принята за нулевую. На рис. 3 спектры смещены по вертикали для удобства читателя. Несмотря на то, что для формирования DR достаточно было мощности 50 мкВт для пробного излучения, использовалась несколько бо́льшая мощность, чтобы формировались VSOP-резонансы, которые позволяли определять частотное положение МІ-переходов с номерами ④ и ⑤. Отметим, что, как показано в работе [19], интенсивность насыщения при использовании микроячеек (из-за столкновений атомов со стенками) на порядок выше, чем в сантиметровых ячейках.

Интересно сравнить полученные результаты с результатами работы [22], в которой исследовался процесс ЕІТ в Λ -системе атомов Cs с использованием обычных (не MI) атомных уровней. Пары атомов Cs содержались в ячейке толщиной L в интервале λ - 3λ , где $\lambda = 852$ нм. Так же, как и в настоящей работе, в спектрах пропускания для пробного излучения присутствовали VSOP-резонансы, а при наличии связывающего излучения формировались ЕІТ (DR)-резонансы на частотах VSOP-резонансов. Там же приведены теоретические кривые, которые содержат EIT (DR)-резонансы на частотах VSOP-резонансов, на которых отчетливо видно сужение спектральной ширины EIT (DR)-резонанса и увеличение пропускания (рис. 9 и рис. 10 в работе [22]). Отчетливо наблюдается увеличение поглощения справа и слева от DR-резонансов, как это имеет место в нашем случае для DR₅ на рис. 3. Минимальная ширина EIT (DR)-резонанса составила 4 МГц (рис. 3 в работе [22]), что меньше радиационной ширины γ_N уровня атома Cs $6P_{3/2}$, $\gamma_N/2\pi \approx 5.2$ МГц, в то время как спектральная ширина VSOP-резонанса больше γ_N .

На рис. 4 кривая (1) показывает экспериментальный спектр пропускания пробного излучения, содержащий темный резонанс DR₅ в продольном магнитном поле 900 Гс (конфигурация частот ν_P и ν_C такая же, как это показано на левой вставке рис. 2). Для демонстрации того, что сужение темного резонанса DR₅ происходит в результате когерентного процесса в Λ -системе, приведена кривая (2), кото-



Рис. 4. ⁸⁵Rb, D_2 -линия, B = 900 Гс, кривая (1) — спектр пропускания ν_P , содержащий DR₅, кривая (2) — спектр пропускания ν_P , содержащий усиленный VSOP_A-резонанс, когда используется лазер с частотой $\nu_{PUMP} = \nu_P$, кривая (3) — спектр пропускания ν_P , когда нет излучения ν_C , кривая (4) — расчетный спектр пропускания ν_P , кривая (5) реперный спектр ⁸⁷Rb при B = 0, переходы $1 \rightarrow 0', 1', 2'$. Левая верхняя вставка — профили DR₅, VSOP и VSOP_A и их спектральные ширины: 25, 45 и 95 МГц соответственно; правая — конфигурация частот ν_{PUMP} и ν_P для формирования усиленного VSOP_A-резонанса

рая показывает спектр пропускания пробного излучения, содержащий усиленный VSOP_A-резонанс, в случае, когда используется второй (в этом случае связывающее поле правильнее называть накачивающее поле) лазер с частотой ν_{PUMP} , равной частоте ν_P (конфигурация частот ν_{PUMP} и ν_P показана на правой вставке рис. 4). В этом случае происходит дополнительная оптическая накачка, излучением *v*_{PUMP} мощностью 15 мВт, которая переводит часть атомной населенности с уровня $|2, -2\rangle$ на уровень $F_q = 3$. Это обусловливает уменьшение поглощения с уровня $|2,-2\rangle$ и увеличение амплитуды $VSOP_A$ (amplified — усиленный). Оптическая накачка не является когерентным процессом, поэтому, наряду с увеличением амплитуды VSOP_A-резонанса, вместо его спектрального сужения (как это происходит в случае DR в А-системе [22]) происходит значительное спектральное уширение $VSOP_A$, обусловленное, в частности, лазерной интенсивностью (так называемое «полевое» уширение) [19]. На рис. 4 кривая (3) показывает спектр пропускания только пробного излучения: формируются VSOP-резонансы на частоте MI с номером (5) и с номерами 1 и 2 (см. диаграмму на рис. 1a). Кривая (4) показывает расчетный спектр пропускания только пробного излучения: наблюдается хорошее согласие расчетных амплитуд VSOP-резонансов и их частотных положений с экспериментальной кривой (3). На левой вставке приведены профили DR₅, VSOP и VSOP_A и их спектральные ширины 25, 45 и 95 МГц соответственно. Еще раз отметим, что в отличие от когерентного процесса ЕІТ, когда увеличение амплитуды DR происходит с уменьшением его спектральной ширины [22] (см. вставку на рис. 4), увеличение амплитуды VSOP_A-резонанса происходит с существенным увеличением его спектральной ширины. Кривая (5) показывает реперный спектр атома ⁸⁷Rb, переходы $1 \rightarrow 0', 1', 2'$.

На рис. 5 кривая (1) показывает экспериментальный спектр пропускания пробного излучения, содержащий темный резонанс DR₄ со спектральной шириной 20 МГц, при магнитном поле B = 1 кГс. На рис. 5 кривая (2) показывает спектр пропускания только пробного излучения. В этом случае регистрируются только VSOP-резонансы со спектральной шириной 30–40 МГц: отмечены VSOP-резонансы на переходах с номерами (4) и (5) и с номерами 1, 2, 3. Кривая (3) показывает расчетный спектр пропус-



Рис. 5. ⁸⁵Rb, D_2 -линия, B = 1 кГс, кривая (1) — спектр пропускания пробного излучения, содержащий темный резонанс DR₄, кривая (2) — спектр пропускания пробного излучения, когда нет излучения $\nu_{\rm C}$, кривая (3) — расчетный спектр пропускания пробного излучения, кривая (4) — реперный спектр ⁸⁷Rb, переходы $1 \rightarrow 0', 1', 2'$ при B = 0. Вставка профили резонансов DR₄ и VSOP, в их формировании участвует MI с номером 4, указанным в кружке

кания только пробного излучения: наблюдается хорошее согласие расчетных амплитуд и частотных положений VSOP-резонансов с экспериментальной кривой (2). При полях 1 кГс амплитуда VSOP под номером ④ в 1.5 раза меньше амплитуды VSOP под номером ⑤. На вставке рис. 5 приведены профили DR₄ и VSOP-резонанса. Амплитуда DR₄ в 8.5 раза больше амплитуды VSOP-резонанса, в то время как спектральная ширина DR₄ в 1.5 раза меньше, что характерно для когерентного процесса EIT [22]. Кривая (4) показывает реперный спектр атома ⁸⁷Rb.

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Кратко напомним, что модификация вероятности атомного перехода в магнитном поле происходит из-за эффекта «перемешивания» магнитных подуровней: возмущение, индуцированное магнитным полем, связывает магнитные подуровни $m_F - m_{F'} =$ $= \Delta m_F = 0$ (штрихом отмечен магнитный подуровень другого, близкого по частоте, перехода); для этих переходов должны выполняться определенные правила отбора (пояснения показаны на рис. 5 в работе [10]). Формулы (1) и (2) для вероятности атомного перехода, приведенные в работе [8], при использовании $\Delta F = +2$ дают значительные величины для вероятности перехода для σ^+ -излучения и малые величины для σ^- -излучения. При использовании $\Delta F = -2$ ситуация прямо противоположная (важно отметить, что эти особенности подтверждаются и экспериментально [7,8]).

Несмотря на некоторую схожесть процессов когерентного пленения населенности (СРТ) и ЕІТ, которая заключается в том, что оба процесса приводят к увеличению пропускания паров атомов на частоте пробного излучения при наличии связывающего излучения, имеются и существенные различия [24–26]. Резонансы, которые формируются в результате процесса СРТ, называют DR (спектральная ширина которого может на многие порядки быть меньше по величине, чем радиационная ширина верхнего уровня Λ -системы), а резонанс, формируемый в результате процесса ЕІТ, называют ЕІТ-резонанс (спектральная ширина которого того же порядка по величине, что и радиационная ширина верхнего уровня

А-системы) [27, 28]. Различие в этих процессах особенно ярко проявляется в резонансной флуоресценции с верхнего уровня Л-системы, которая в случае СРТ может полностью отсутствовать (это объясняет название DR), в случае же ЕІТ из-за сильного связывающего излучения резонансная флуоресценция с верхнего уровня Л-системы не может быть нулевой. В настоящей статье реализован процесс EIT, который формируется в сильном связывающем поле (в отличие от процесса СРТ, где используется слабое связывающее поле), что приводит к расщеплению возбужденного уровня и просветлению на резонансной частоте [24]. С приведенным разъяснением механизма просветления на резонансной частоте называем регистрируемый нами резонанс DR (при этом понимая различие с DR, формируемым в СРТ). При сравнении DR с результатами аналогичных работ, в которых, однако, используется термин EIT-резонанс, мы пользуемся обозначением EIT (DR)-резонанс.

Для качественного описания процесса ЕІТ приведем формулу из работы [26]. Отношение поглощения $\alpha(\Omega_C)$ на частоте пробного излучения ν_P , на которой наблюдается DR (в присутствии излучения ν_C), к поглощению $\alpha(0)$ (когда излучения ν_C нет) в предположении малой интенсивности излучения ν_P и нулевых частотных расстройках описывается выражением

$$\frac{\alpha(\Omega_C)}{\alpha(0)} = \frac{K}{1 + \Omega_C^2 / 4\Gamma_{21}\gamma_N},\tag{1}$$

где K — константа, γ_N — радиационная ширина уровня, в нашем случае уровня атома ⁸⁵Rb, $5P_{3/2}, \gamma_N/2\pi \approx 6$ МГц, $\Delta\omega_D$ — доплеровская ширина, которая входит в константу K, Ω_C — частота Раби для излучения ν_C, Γ_{21} — скорость дефазировки когерентности двух нижних атомных уровней в Λ -системе (см. вставку на рис. 2), которая обусловлена, в частности, столкновениями атомов со стенками МЯ. Случай $\alpha(\Omega_C) = 0$ соответствует полному просветлению и большой величине амплитуды DR, которая, однако, уменьшается при возрастании величины Γ_{21} . Для ширины EIT (DR) приведем простое выражение [27, 28]:

$$\gamma_{DR} \simeq 2\Gamma_{21} + \Omega_C^2 / \gamma_N. \tag{2}$$

Кратко поясним ситуацию с выбором толщины ячейки $L = 2\lambda = 1.56$ мкм. Как показано в работе [20], при толщинах ячейки с парами атомов $L = n\lambda$ (где n — целое число) в спектре пропускания возникают VSOP-резонансы, демонстрирующие уменьшение поглощения (вплоть до n = 10), которые расположены точно на частоте атомных переходов. При формировании DR-резонанса на частоте атомных переходов оба резонанса «работают» на уменьшение поглощения. А при $L = (2n+1)\lambda/2$ VSOP-резонансы, которые также расположены точно на частоте атомных переходов, демонстрируют увеличение поглощения, и при формировании DR-резонанса на той же частоте оба резонанса «работают» в противоположном направлении (рис. 7 в работе [29]). Малая толщина ячейки позволяет использовать сильные постоянные магниты, у которых недостаток в том, что формируются сильно неоднородные магнитные поля и градиент вблизи поверхности магнита может достигать 100–150 Гс/мм, однако при малой толщине столба паров магнитное поле можно считать практически однородным. Малая толщина ячейки приводит к частым столкновениям атомов со стенками ячейки и увеличению Γ_{21} , как следствие, происходит ухудшение контраста DR (см. формулу (1)), а также уширение спектральной ширины DR (см. формулу (2)). Поэтому толщина $L = 2\lambda$ или 3λ оптимальна для формирования DR.

На приведенных выше рис. 3–5 DR формируется на частоте, которая совпадает с частотой VSOP-резонанса (для формирования DR_5 частота ν_C настроена точно на переход $|3, -2\rangle \rightarrow |4', -1'\rangle$), однако при наличии частотной расстройки частоты связывающего излучения ν_C от точного резонанса на $\Delta \sim$ $\sim 20\text{--}30~\mathrm{M}\Gamma$ ц DR формируется уже на смещенной частоте. Как показано в работе [17], в случае, когда используются микроячейки, спектральная ширина DR-резонанса возрастает, а контраст DR ухудшается (поскольку величина Γ_{21} возрастает), и при большой частотной расстройке $\Delta \approx 200 \ \mathrm{MGm}$ DR вовсе не формируется. Заметим, что ухудшение параметров DR даже при небольшом увеличении расстройки Δ частоты излучения ν_C от резонанса соответствующего атомного перехода проявляется только при использовании МЯ (в обычных ячейках сантиметровой длины такого эффекта нет). Влияние расстройки Δ на параметры DR тем сильнее, чем меньше толщина МЯ.

Как отмечалось выше, резонансы DR_5 и DR_4 формируются, только когда связывающее излучения ν_C имеет поляризацию σ^+ (излучение с поляризацией σ^+ также необходимо для формирования MI-переходов с номерами (4) и (5)), а при поляризации σ^- связывающего излучения ν_C DR имеет нулевую амплитуду. На рис. 6*a* в левой и правой частях приведены Λ -системы атома ⁸⁵Rb и возможные конфигурации для поляризации σ^+ и σ^- связывающего



Рис. 6. *a*) В левой и правой частях приведены Λ -системы атома ⁸⁵Rb и возможные конфигурации для поляризации σ^+ и σ^- связывающих излучений ν_{C5} и ν_{C4} для формирования DR₅ и DR₄ соответственно. DR₅ и DR₄ не формируются, когда излучения ν_{C5} и ν_{C4} имеют поляризацию σ^- . *б*) Зависимости от *B* вероятностей для переходов на частотах ν_{C5} и ν_{C4} при поляризации σ^+ — кривые 1 и 2 для DR₅ и DR₄ соответственно. Кривые 1' и 2' показывают зависимости от *B* вероятностей для переходов на частотах ν_{C5} и ν_{C4} при поляризации σ^- для DR₅ и DR₄ соответственно

излучения ν_{C5} и ν_{C4} для формирования DR₅ и DR₄ соответственно. На рис. 66 приведены вероятности для переходов на частотах ν_{C5} и ν_{C4} (для формирования DR₅ и DR₄ соответственно) с поляризациями σ^+ (кривые 1 и 2) и σ^- (кривые 1' и 2') для DR₅ и DR₄ соответственно в зависимости от магнитного поля. Как видно, вероятности переходов на частотах ν_{C5} и ν_{C4} при поляризации σ^+ (кривые 1 и 2) растут с возрастанием магнитного поля, а кривые 1' и 2', показывающие вероятности переходов на частотах ν_{C5} и ν_{C4} при поляризации σ^- , с возрастанием *В* стремятся к нулю, что подтверждает эксперимент по формированию DR.

Варьирование величины магнитного поля на представленных рис. 3–5 проведено с целью показать, что при увеличении магнитного поля амплитуда DR меняется слабо, в то время как при использовании обычных атомных переходов при увеличении магнитного поля до ~ 1000 Гс амплитуда EIT (DR)-резонанса, как правило, начинает быстро уменьшаться [30, 31]. Важно провести сравнение процесса ЕІТ и формирования DR с использованием обычных атомных уровней 85 Rb, D_2 -линии, реализованного в работе [30], с нашим случаем с использованием МІ-переходов. В работе [30] показано, что в продольном магнитном поле в спектре пропускания пробного излучения одновременно формируются пять DR-резонансов, которые расположены эквидистантно по частоте, однако амплитуды достаточно малы и их контраст составляет 1–2%. Интенсивность связывающего излучения составляет 350 мВт/см², что примерно в 2.5 раза больше, чем в работе [30]. Если предположить, что увеличение интенсивности связывающего излучения в работе [30] приведет к увеличению ЕІТ-резонанса в 2-3 раза, тем не менее различие в амплитудах с нашим случаем продолжает оставаться значительным. Что касается различия в величинах магнитного поля ~ 50 Гс в работе [30] и 770–1000 Гс в нашем случае, то мы провели теоретические расчеты для вероятности атомных переходов для пяти связывающих ν_C излучений, используемых в [30], в зависимости от величины магнитного поля. С увеличением магнитного поля B > 800 Гс вероятности для этих переходов начинают быстро уменьшаться (вероятности переходов для пяти пробных ν_P частот слабо меняются в интервале 200–1000 Гс). Частота Раби Ω_C пропорциональна произведению напряженности электрического поля ЕС и матричного элемента дипольного момента перехода на частоте ν_C [26]. Квадрат матричного элемента дипольного момента перехода на частоте ν_C определяет вероятность атомного перехода на частоте ν_C , поэтому уменьшение вероятности приводит к уменьшению Ω_C . Это означает, что приведенные на рис. 8b в работе [30] при 50 Гс амплитуды EIT-резонансов будут такими же малыми и при B > 800 Гс. Также одновременно пять маленьких EIT (DR)-резонансов формируются при использовании ⁸⁵Rb, *D*₁-линии, и магнитного поля $B \sim 1000 \ \Gamma c$ [31]. Следовательно, в таких сильных полях применение MI-переходов для процесса ЕІТ более предпочтительно, чем применение обычных атомных переходов ⁸⁵Rb. Таким образом, преимуществом использования МІ-переходов для формирования DR является наличие одного резонанса (т. е. возможность селективного использования одного МІ-перехода с номером (1)–(5)), а также почти в 10 раз большая амплитуда DR-резонанса. Дополнительного увеличения амплитуды DR можно достичь увеличением частоты Раби Ω_C , однако при этом, как видно из формулы (2), будет происходить дополнительное спектральное уширение.

Отметим, что в магнитном поле в спектре пропускания пробного излучения в парах атомов Cs, D_2 -линии, одновременно формируются семь EIT-резонансов, которые расположены эквидистантно по частоте, однако их амплитуды малы [17]. Ожидается, что использование МІ-переходов $F_g = 3 \rightarrow F_e =$ = 5 Cs, D_2 -линии, существенно улучшит параметры EIT-резонансов.

Вероятности МІ-переходов атомов щелочных металлов на D_2 -линии, сравнимые по величине и даже превышающие вероятности обычных атомных переходов, достигаются в интервале магнитный полей $0.1B_0 < B < 3B_0$, где $B_0 = A_{hfs}/\mu_B$, A_{hfs} — магнитная дипольная константа для основного уровня атома, μ_B — магнетон Бора [32, 33]. Для атома ${}^{85}\mathrm{Rb}$ величина $B_0({}^{85}\mathrm{Rb}) = 0.7$ кГс, для атома $^{87}{\rm Rb}$ величина $B_0(^{87}{\rm Rb})=2.4$ кГс, для атома Cs величина $B_0(^{133}\text{Cs}) = 1.7$ кГс и для атома ³⁹К величина $B_0(^{39}\text{K}) = 165$ Гс. Максимальные вероятности МІ-переходов достигаются при магнитных полях $B \sim (0.3-0.4)B_0$. При $B \gg B_0$ начинается разрыв связи между полным угловым моментом электрона J и магнитным моментом ядра I и расщепление атомных уровней описывается проекциями m_J и m_I [32]. Это приводит к тому, что число регистрируемых атомных переходов щелочных металлов на D_2 -линии при использовании излучений σ^+ и σ^- сокращается до фиксированного числа (так называемый режим Пашена – Бака на сверхтонкой структуре (ПБС)) [10]. В режиме ПБС вероятности МІ-переходов атомов щелочных металлов на *D*₂-линиях практически равны нулю, следовательно, в режиме ПБС МІ-переходы отсутствуют.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе продемонстрирована перспективность применения МІ-переходов ⁸⁵Rb, D_2 -линии, $F_g = 2 \rightarrow \rightarrow F_e = 4$ для формирования темных резонансов DR в процессе ЕІТ в сильных магнитных полях. Это обусловлено следующим: 1) вероятность МІ-перехода в интервале магнитных полей 0.2–1 кГс превосходит вероятность «обычного» атомного перехода, следовательно, целесообразно его использование для перехода на частоте связывающего или пробного лазерных излучений в Λ -системе; 2) продемонстрировано, что при $B \sim 1$ кГс DR-резонансы, фор-

ми (Ф) и (Б), имеют большой контраст и значительные частотные сдвиги (в несколько ГГц) относительно начального положения при нулевом магнитном поле. Это может быть использовано для формирования частотного репера и стабилизации частоты лазера на сильно смещенной частоте [12,13]. В работе [34] приведен простой метод определения стабильности частоты лазера с использованием DR.

Отмечено существенное преимущество формирования DR-резонансов при использовании MI-переходов вместо обычных атомных переходов 85 Rb, D_2 -линии, в частности, амплитуда DR при использовании MI значительно больше.

Экспериментально продемонстрировано, что для эффективного формирования DR пробное и связывающее излучения должны иметь ту же круговую поляризацию σ^+ ; в случае, когда связывающее излучение имеет поляризацию σ^- , DR не формируется. Это согласуется также с приведенными расчетными кривыми.

Следует отметить, что при использовании когерентно связанных излучений (пробного и связывающего), а также сантиметровой ячейки, заполненной парами Rb, возможно на несколько порядков уменьшить спектральную ширину DR [27, 28, 35]. В работе [36] продемонстрировано, что наличие буферного газа в сантиметровой ячейке с парами атомов Rb в магнитном поле приводит к исчезновению VSOP-резонансов (это может быть удобно в ряде случаев), но поскольку используются два когерентно не связанных излучения, ширина DR составляет 10 МГц, что всего в 2 раза у́же DR в нашем случае, когда используется микроячейка и столкновения атомов со стенками дополнительно уширяют DR.

Отметим, что МІ-переходы D_2 -линий Cs, K и Na также могут быть успешно применены для формирования DR/EIT-резонансов в процессе EIT/CPT. Недавно изготовленные стеклянные наноячейки [37,38], которые дешевле и проще в изготовлении, чем МЯ (из технического сапфира), сделают технику формирования и применения МІ-переходов, в частности для получения DR, доступной широкому кругу исследователей.

Благодарности. Авторы благодарят Г. Ахумяна за некоторые из приведенных расчетных кривых.

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по науке Министерства образования, науки, культуры и спорта Республики Армения в рамках научного проекта № 19YR-1C017.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. J. Kitching, Appl. Phys. Rev. 5, 031302 (2018).
- P. Tremblay, A. Michaud, M. Levesque, S. Thériault, M. Breton, J. Beaubien, and N. Cyr, Phys. Rev. A 42, 2766 (1990).
- A. Sargsyan, A. Tonoyan, G. Hakhumyan, A. Papoyan, E. Mariotti, and D. Sarkisyan, Laser Phys. Lett. 11, 055701 (2014).
- S. Scotto, D. Ciampini, C. Rizzo, and E. Arimondo, Phys. Rev. A 92, 063810 (2015).
- S. Scotto, Rubidium Vapors in High Magnetic Fields, Atomic Physics [physics.atom-ph], Université Paul Sabatier, Toulouse III (2016).
- A. Sargsyan, E. Klinger, G. Hakhumyan, A. Tonoyan, A. Papoyan, C. Leroy, and D. Sarkisyan, J. Opt. Soc. Amer. B 34, 776 (2017).
- А. Саргсян, А. Тоноян, Г. Ахумян, Д. Саркисян, Письма в ЖЭТФ 106, 669 (2017).
- A. Tonoyan, A. Sargsyan, E. Klinger, G. Hakhumyan, C. Leroy, M. Auzinsh, A. Papoyan, and D. Sarkisyan, Europhys. Lett. **121**, 53001(2018).
- A. Sargsyan, A. Amiryan, A. Tonoyan, E. Klinger, and D. Sarkisyan, Phys. Lett. A 390, 127114 (2021).
- А. Саргсян, Б. Глушко, Д. Саркисян, ЖЭТФ 147, 668 (2015).
- Д. Саркисян, Г. Ахумян, А. Саргсян, ЖЭТФ 158, 771 (2020).
- A. Sargsyan, A. Tonoyan, R. Mirzoyan, D. Sarkisyan, A. Wojciechowski, and W. Gawlik, Opt. Lett. 39, 2270 (2014).
- R. S. Mathew, F. Ponciano-Ojeda, J. Keaveney, D. J. Whiting, and I. G. Hughes, Opt. Lett. 43, 4204 (2018).
- V. V. Vassiliev, S. A. Zibrov, and V. L. Velichansky, Rev. Sci. Instrum. 77, 013102 (2006).
- V. V. Yashchuk, D. Budker, and J. R. Davis, Rev. Sci. Instrum. **71**, 341 (2000).
- A. Sargsyan, A. Tonoyan, A. Papoyan, and D. Sarkisyan, Opt. Lett. 44, 1391 (2019).
- A. Sargsyan, Y. Pashayan-Leroy, C. Leroy, S. Cartaleva, and D. Sarkisyan, J. Mod. Opt. 62, 769 (2015).
- J. Keaveney, A. Sargsyan, U. Krohn, I. G. Hughes, D. Sarkisyan, and C. S. Adams, Phys. Rev. Lett. 108, 173601 (2012).

- 19. C. Andreeva, S. Cartaleva, L. Petrov, S. M. Saltiel, D. Sarkisyan, T. Varzhapetyan, D. Bloch, and M. Ducloy, Phys. Rev. A 76, 013837 (2007).
- A. Sargsyan, G. Hakhumyan, A. Papoyan, D. Sarkisyan, A. Atvars, and M. Auzinsh, Appl. Phys. Lett. 93, 021119 (2008).
- A. Sargsyan, G. Hakhumyan, C. Leroy, Y. Pashayan-Leroy, A. Papoyan, and D. Sarkisyan, Opt. Lett. 37, 1379 (2012).
- 22. A. Sargsyan, C. Leroy, Y. Pashayan-Leroy, D. Sarkisyan, D. Slavov, and S. Cartaleva, Opt. Comm. 285, 2090 (2012).
- 23. P. R. S. Carvalho, L. E. E. de Araujo, and J. W. R. Tabosa, Phys. Rev. A 70, 063818 (2004).
- 24. T. Zanon-Willette, E. De Clercq, and E. Arimondo, Phys. Rev. A 84, 062502 (2011).
- 25. S. Khan, M. P. Kumar, V. Bharti, and V. Natarajan, Eur. Phys. J. D 71, 38 (2017).
- 26. J. Gea Banacloche, Y. Q. Li, S. Z. Jin, and Min Xiao, Phys. Rev. A 51, 576 (1995).
- 27. R. Wynands and A. Nagel, Appl. Phys. B, Lasers Opt. 68, 1(1999).
- 28. M. Fleischhauer, A. Imamoglu, and J. P. Marangos, Rev. Mod. Phys. 77, 633 (2005).
- **29**. Д. Саркисян, А. Саргсян, Дж. Кевени, Ч. С. Адамс, ЖЭТФ **146**, 13 (2014).
- 30. S. Mitra, S. Dey, M. M. Hossain, P. N. Ghosh, and B. Ray, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. 46, 075002 (2013).
- 31. А. Саргсян, Р. Мирзоян, Д. Саркисян, Письма в ЖЭТФ 96, 333 (2012).
- 32. B. A. Olsen, B. Patton, Y. Y. Jau, and W. Happer, Phys. Rev. A 84, 063410 (2011).
- 33. M. Zentile, J. Keaveney, L. Weller, D. J. Whiting, C. S. Adams, and I. G. Hughes, Comput. Phys. Commun. 189, 162 (2015).
- 34. A. Sargsyan, A. V. Papoyan, D. Sarkisyan, and A. Weis, Appl. Phys. 48, 20701 (2009).
- 35. L. Ma and G. Raithel, J. Phys. Commun. 4, 095020 (2020).
- 36. H. Cheng, H.-M. Wang, S.-S. Zhang, P.-P. Xin, J. Luo, and H.-P. Liu, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. 50, 095401(2017).
- 37. T. Peyrot, C. Beurthe, S. Coumar, M. Roulliay, K. Perronet, P. Bonnay, C. S. Adams, A. Browaeys, and Y. R. P. Sortais, Opt. Lett. 44, 1940 (2019).
- 38. T. F. Cutler, W. J. Hamlyn, J. Renger, K. A. Whittaker, D. Pizzey, I. G. Hughes, V. Sandoghdar, and C. S. Adams, Phys. Rev. Appl. 14, 034054 (2020).

ДИФРАКЦИОННАЯ СТРУКТУРА КВАНТОВЫХ ФАНТОМНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ

Д. А. Балакин^{*}, А. В. Белинский^{**}

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет 119991, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 7 февраля 2021 г., после переработки 17 февраля 2021 г. Принята к публикации 24 февраля 2021 г.

Рассмотрено влияние дифракции, обусловленное конечной шириной накачки, освещающей нелинейный кристалл, в котором происходит параметрическое рассеяние, на пространственное разрешение фантомных изображений. Даны необходимые формальные соотношения, предложен алгоритм расчета и проведено численное моделирование, учитывающее влияние этого искажающего фактора на качество фантомных изображений.

DOI: 10.31857/S004445102107004X

1. ВВЕДЕНИЕ

Открытие и реализация параметрического рассеяния света, в ходе которого рождаются жестко коррелированные пары фотонов, породило множество новых направлений современной квантовой физики и квантовой нелинейной оптики [1–6]. Спектр этих новшеств необычайно широк: от фундаментальнейших вопросов квантовой теории, например, экспериментальной проверки теоремы Белла [7–15], до чисто прикладных задач, связанных, например, с безэталонной калибровкой фотоприемников в режиме счета фотонов [16].

В свое время значительную часть оптических приложений параметрического рассеяния было предложено называть двухфотонной оптикой [17]. Дело в том, что «обычные» изображения формируются и регистрируются обычной прямой фиксацией одиночных фотонов или их групп. В двухфотонной же оптике информативными являются только одновременно регистрируемые коррелированные фотонные пары. Это дает целый ряд преимуществ, связанных с запутанностью фотонов пары, например, в подавлении шума и др. Примером такого рода являются изображения, позже названные фантомными потому, что они появляются не в объектном канале, в котором происходит освещение регистрируемого объекта, а в сопряженном канале [18]. Корреляция носителей света в этих каналах позволяет восстанавливать изображение объекта.

В настоящее время известно много разновидностей схем формирования фантомных изображений [18-25], но почти всегда наиболее весомым фактором, ограничивающим их пространственное разрешение, является дифракция [26–28]. Приближенные оценки ее влияния рассмотрены в работах [26, 28], но строгого решения задачи до сих пор не существует. Мы попытались восполнить этот недостаток прямым аналитическим и численным моделированием процесса формирования квантовых фантомных изображений с помощью трехфотонного параметрического рассеяния света. В идеале, имея характерный объект регистрации и основные параметры нелинейно-оптической системы, хотелось бы получать моделируемое изображение и оценивать его качество, не тратя время и средства на натурный эксперимент. Этому и посвящена настоящая работа.

2. ОПТИЧЕСКАЯ СХЕМА

Для формирования фантомных изображений необходим источник коррелированных световых пучков, один из которых взаимодействует с объектом, а другой — нет, см. рис. 1. При формировании квантовых фантомных изображений для этого, как

^{*} E-mail: balakin d a@physics.msu.ru

^{**} E-mail: belinsky@inbox.ru



Рис. 1. Формирование квантового фантомного изображения. NC — нелинейный кристалл, ω_p — луч накачки, ω_s и ω_i — лучи запутанных фотонов (которые расходятся вследствие использования неколлинеарного параметрического рассеяния), О — исследуемый объект, BD — собирающий детектор в объектном канале, L — линза, CCD — матрица датчиков в восстанавливающем канале, С — коррелятор интенсивностей (схема совпадений)

правило, используются параметрические процессы преобразования фотонов накачки в нелинейном кристалле. При этом в объектном канале детектор дает информацию только о полной интенсивности прошедшего излучения. Фотоны, направленные в восстанавливающий канал, не взаимодействуют с объектом, но регистрируются матрицей фотодетекторов, при помощи выходного сигнала которой определяется пространственная корреляционная функция интенсивности между двумя каналами.

Одним из важных доводов в пользу использования квантовых фантомных изображений является создание максимально щадящих условий освещения исследуемого объекта, когда воздействие излучения на объект (иногда необратимое) минимально [19].

Качество изображения — его пространственное разрешение с учетом уровня шумов — является основной характеристикой практически любой оптической системы. В квантовых фантомных изображениях ему в последнее время уделяется значительное внимание, что обусловлено не только существенными пробелами в теории, но и неудовлетворительным пространственным разрешением, достигнутым в экспериментах. При этом основной ограничитель пространственного разрешения — дифракция.

3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФРАКЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ КВАНТОВЫХ ФАНТОМНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ

Для изучения влияния дифракции на формирование фантомного изображения вначале рассмотрим параметрическое рассеяние фотонов накачки в нелинейном кристалле. Будем считать, что накачка неистощима, а частоты сигнальных и холостых фотонов одинаковы.

Для получения системы уравнений, моделирующих параметрическое рассеяние фотонов накачки в нелинейном кристалле, рассмотрим оператор импульса электромагнитного поля, аналогичный рассмотренному в [29]:

$$\hat{G} = \hbar \int d\mathbf{r}' \left(-igA_p(\mathbf{r}')\hat{A}_s^{\dagger}(\mathbf{r}', z)\hat{A}_i^{\dagger}(\mathbf{r}', z) + \text{H.c.} + \frac{1}{2k} \sum_{j=i,s} \frac{\partial \hat{A}_j^{\dagger}(\mathbf{r}', z)}{\partial \mathbf{r}'} \frac{\partial \hat{A}_j(\mathbf{r}', z)}{\partial \mathbf{r}'} \right), \quad (1)$$

где параметр g определяется оптической нелинейностью среды, $A_p(\cdot)$ — пространственное распределение амплитуды накачки, k — волновое число рождающихся фотонов.

В работах [30,31] был предложен формализм оператора импульса и отмечено, что хотя при изучении временной эволюции квантовой системы удобнее работать с гамильтонианом, при изучении свойств системы, связанных с распространением частиц вдоль оси z с фиксированной по модулю скоростью, предпочтительно использование оператора импульса. Позднее этот прием был успешно использован авторами статьи [29] для моделирования распространения света в нелинейном многослойном фотонном кристалле. В рассматриваемом случае уравнения эволюции имеют вид

$$i\hbar \frac{\partial \hat{A}_{s,i}(\mathbf{r}_{\perp}, z)}{\partial z} = \left[\hat{G}, \hat{A}_{s,i}(\mathbf{r}_{\perp}, z)\right], \qquad (2)$$

где $\hat{A}_{s,i}$ — полевые операторы сигнальных (s) и холостых (i) фотонов, направление оси z совпадает с направлением распространения фотонов, вектор \mathbf{r}_{\perp} перпендикулярен ему. Операторы $\hat{A}_{s,i}(\mathbf{r}_{\perp}, z)$ и $\hat{A}_{s,i}^{\dagger}(\mathbf{r}_{\perp}, z)$ удовлетворяют коммутационным соотношениям:

$$\begin{bmatrix} \hat{A}_{j}^{\dagger}(\mathbf{r}_{\perp}, z), \hat{A}_{k}(\mathbf{r}_{\perp}', z) \end{bmatrix} = -\delta_{jk}\delta(\mathbf{r}_{\perp} - \mathbf{r}_{\perp}'), \\ \begin{bmatrix} \hat{A}_{j}(\mathbf{r}_{\perp}, z), \hat{A}_{k}(\mathbf{r}_{\perp}', z) \end{bmatrix} = 0,$$
(3)

где $j,k \in \{s,i\}$. Заметим, что обычно при изучении в картине Гейзенберга распространения квантовых
частиц решается уравнение Гейзенберга для соответствующих полевых операторов при фиксированном волновом векторе, после чего пространственная координата вдоль направления распространения и время связываются через скорость распространения. Тем самым частота частицы и ее волновой вектор оказываются связанными. Напротив, при использовании оператора импульса и уравнений (2) рассматриваются полевые операторы при фиксированной частоте и заданном направлении распространения [31]. Таким образом, моды с определенным волновым числом k (например, $\exp(-ikz)$) заменяются на моды с определенной частотой ω (например, $\exp(-i\omega t)$), распространяющиеся в заданном направлении. Подстановкой оператора импульса (1) в уравнения эволюции (2) и последующим использованием коммутационных соотношений получаем, что в указанном приближении нелинейный процесс описывается следующей системой уравнений в частных производных, см., например, [32–36]:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{i}{2k} \Delta_{\perp} \end{pmatrix} \hat{A}_{s}(\mathbf{r}_{\perp}, z) = g A_{p}(\mathbf{r}_{\perp}) \hat{A}_{i}^{\dagger}(\mathbf{r}_{\perp}, z),$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{i}{2k} \Delta_{\perp} \end{pmatrix} \hat{A}_{i}(\mathbf{r}_{\perp}, z) = g A_{p}(\mathbf{r}_{\perp}) \hat{A}_{s}^{\dagger}(\mathbf{r}_{\perp}, z),$$

$$0 \leq z \leq l, \quad \hat{A}_{s,i}(\mathbf{r}_{\perp}, 0) = A_{s,i}^{(in)}(\mathbf{r}_{\perp}),$$

$$(4)$$

где l — толщина кристалла, Δ_{\perp} — поперечный лапласиан. Для простоты мы рассматриваем коллинеарный процесс. Дело в том, что при втором типе параметрического рассеяния сигнальный и холостой пучки не вырождены по поляризации, поэтому их можно разделить поляризационной призмой даже в случае коллинеарного процесса.

Отметим также, что система уравнений (4) аналогична соответствующей системе для комплексных амплитуд в классическом описании. Линейность уравнений позволяет заменить комплексные амплитуды полей соответствующими операторами в представлении Гейзенберга благодаря отсутствию в системе произведений операторов, вследствие чего некоммутативность операторов не влияет на результат.

В силу малой толщины кристалла по сравнению с длиной пути света от кристалла до детекторов для упрощения системы уравнений (4) можно пренебречь дифракцией в кристалле, т. е. решать систему

$$\frac{\partial}{\partial z} \hat{A}_s(\mathbf{r}_{\perp}, z) = g A_p(\mathbf{r}_{\perp}) \hat{A}_i^{\dagger}(\mathbf{r}_{\perp}, z), \\
\frac{\partial}{\partial z} \hat{A}_i(\mathbf{r}_{\perp}, z) = g A_p(\mathbf{r}_{\perp}) \hat{A}_s^{\dagger}(\mathbf{r}_{\perp}, z), \\
0 \le z \le l. \quad (5)$$

Обозначим полевые операторы на выходе кристалла $\hat{A}_{s,i}^{(out)}(\mathbf{r}_{\perp})$. В силу (5) они равны

$$\hat{A}_{s,i}^{(out)}(\mathbf{r}_{\perp}) = \hat{A}_{s,i}^{(in)}(\mathbf{r}_{\perp}) \operatorname{ch}\left(|gA_{p}(\mathbf{r}_{\perp})|l\right) + \hat{A}_{i,s}^{(in)\dagger}(\mathbf{r}_{\perp})\frac{gA_{p}(\mathbf{r}_{\perp})}{|gA_{p}(\mathbf{r}_{\perp})|}\operatorname{sh}\left(|gA_{p}(\mathbf{r}_{\perp})|l\right).$$
(6)

Как показано в [18], корреляционная функция флуктуаций интенсивности в каналах равна

$$G(\mathbf{r}'_{\perp}, \mathbf{r}_{\perp}) = \left| \int d\mathbf{r}''_{\perp} d\mathbf{r}'''_{\perp} h_1(\mathbf{r}'_{\perp}, \mathbf{r}''_{\perp}) h_2(\mathbf{r}_{\perp}, \mathbf{r}''_{\perp}) \times \left\langle A_s^{(out)}(\mathbf{r}''_{\perp}) A_i^{(out)}(\mathbf{r}'''_{\perp}) \right\rangle \right|^2, \quad (7)$$

где усреднение выполняется при вакуумном состоянии полей на входе в кристалл, а h_1 и h_2 — передаточные функции каналов. Для получения формируемого изображения функцию (7) далее необходимо проинтегрировать по \mathbf{r}'_{\perp} , поскольку собирающий детектор в объектном канале регистрирует весь световой пучок и не обладает пространственным разрешением.

Пусть в объектном канале объект, описываемый амплитудным коэффициентом пропускания $T(\mathbf{r}_{\perp})$, находится на расстоянии s_s от кристалла и сразу за ним расположен собирающий детектор, тогда в приближении Френеля (§ 32 в [37])

$$h_1(\mathbf{r}'_{\perp}, \mathbf{r}''_{\perp}) = \frac{k}{2\pi i} \frac{\exp(iks_s)}{s_s} T(\mathbf{r}'_{\perp}) \times \\ \times \exp\left(\frac{ik(\|\mathbf{r}'_{\perp} - \mathbf{r}''_{\perp}\|^2)}{2s_s}\right). \quad (8)$$

Если в восстанавливающем канале нет линз, а матрица датчиков расположена на расстоянии *s* от кристалла, то в приближении Френеля

$$h_2(\mathbf{r}_{\perp}, \mathbf{r}_{\perp}^{\prime\prime\prime}) = \frac{k}{2\pi i} \frac{\exp(iks)}{s} \times \\ \times \exp\left(\frac{ik(\|\mathbf{r}_{\perp} - \mathbf{r}_{\perp}^{\prime}\|^2)}{2s}\right), \quad (9)$$

а если в восстанавливающий канал помещена тонкая линза с фокусным расстоянием f = s/2 (например, линза находится на расстояниях 2f от матрицы датчиков и от объекта вдоль осей каналов), то в приближении Френеля (§ 35 в [37])

$$h_2(\mathbf{r}_{\perp}, \mathbf{r}_{\perp}^{\prime\prime\prime}) = \frac{k}{2\pi i} \frac{\exp(iks)}{s} \exp\left(\frac{ik(\|\mathbf{r}_{\perp} - \mathbf{r}_{\perp}^{\prime\prime\prime}\|^2)}{2s}\right) \times \\ \times \exp\left(-\frac{ik\|\mathbf{r}_{\perp}^{\prime\prime\prime}\|^2}{2f}\right).$$
(10)



Рис. 2. Моделирование формирования квантовых фантомных изображений согласно формуле (12). Размер изображений 6×6 мм. Слева — распределение прозрачности объекта $T(\cdot)$ (щель шириной 0.16 мм), справа — корреляционная функция $G(\cdot)$



Рис. 3. Профиль изображения щели на рис. 2, ср. с рис. 5 из [38], (сплошная линия) и профиль распределения прозрачностей самой щели (штриховая)

С учетом (6)

$$\langle A_s^{(out)}(\mathbf{r}_{\perp}'') A_i^{(out)}(\mathbf{r}_{\perp}''') \rangle = \operatorname{ch} \left(|gA_p(\mathbf{r}_{\perp}'')| l \right) \times \\ \times \frac{gA_p(\mathbf{r}_{\perp}'')}{|gA_p(\mathbf{r}_{\perp}'')|} \operatorname{sh} \left(|gA_p(\mathbf{r}_{\perp}'')| l \right) \delta(\mathbf{r}_{\perp}'' - \mathbf{r}_{\perp}''').$$
(11)

Таким образом, при $s = s_s$ формируемое фантомное изображение в случае конфигурации восстанавливающего канала, охарактеризованной передаточной функцией (10), описывается функцией

$$G(\mathbf{r}_{\perp}) = \frac{k^4}{16\pi^4 s^4} \int d\mathbf{r}'_{\perp} |T(\mathbf{r}'_{\perp})|^2 \left| \int d\mathbf{r}''_{\perp} \times \\ \times \exp\left(\frac{ik(\|\mathbf{r}'_{\perp} - \mathbf{r}''_{\perp}\|^2 + \|\mathbf{r}_{\perp} - \mathbf{r}''_{\perp}\|^2)}{2s}\right) \times \\ \times \exp\left(-\frac{ik\|\mathbf{r}''_{\perp}\|^2}{2f}\right) \times \\ \times \operatorname{ch}\left(gA_0 l \exp\left(-\frac{\|\mathbf{r}''_{\perp}\|^2}{2a^2}\right)\right) \times \\ \times \operatorname{sh}\left(gA_0 l \exp\left(-\frac{\|\mathbf{r}''_{\perp}\|^2}{2a^2}\right)\right) \right|^2, \quad (12)$$

где рассмотрено усиление в поле фокусированного гауссовского пучка накачки, $A_p(\mathbf{r}_{\perp}) = A_0 \exp\left(-\|\mathbf{r}_{\perp}\|^2/(2a^2)\right)$, и учтено, что g, A_0, a положительные числа. В случае же передаточной функции (9)

$$G(\mathbf{r}_{\perp}) = \frac{k^4}{16\pi^4 s^4} \int d\mathbf{r}'_{\perp} |T(\mathbf{r}'_{\perp})|^2 \left| \int d\mathbf{r}''_{\perp} \times \exp\left(\frac{ik(\|\mathbf{r}'_{\perp} - \mathbf{r}''_{\perp}\|^2 + \|\mathbf{r}_{\perp} - \mathbf{r}''_{\perp}\|^2)}{2s}\right) \times \exp\left(\frac{ik(\|\mathbf{r}'_{\perp} - \mathbf{r}''_{\perp}\|^2 + \|\mathbf{r}_{\perp} - \mathbf{r}''_{\perp}\|^2)}{2s}\right) \times \cosh\left(gA_0 l \exp\left(-\frac{\|\mathbf{r}''_{\perp}\|^2}{2a^2}\right)\right) \times \sin\left(gA_0 l \exp\left(-\frac{\|\mathbf{r}''_{\perp}\|^2}{2a^2}\right)\right) \right|^2.$$
(13)

Заметим, что если бы в формуле (12) отсутствовал связанный с накачкой множитель (последние две строки), то она бы, с точностью до постоянного для всего изображения множителя, соответствовала формированию обычного изображения равномерно освещенного объекта удаленной от него на расстояние *s* тонкой линзой с тем же фокусным расстоянием f = s/2 в плоскости на расстоянии *s* от линзы в отсутствие вакуумных флуктуаций.

Поскольку внутренний интеграл в (12) не берется аналитически, для моделирования формирования фантомных изображений использованы численные методы. Для расчета заметим, что при фиксированном r'_{\perp} внутренний интеграл в (12) может быть вычислен как свертка функции

$$\frac{k \exp(iks)}{2\pi i s} \exp\left(\frac{ik(\|\cdot\|^2)}{2s}\right)$$

с произведением функции

$$\operatorname{ch}\left(gA_0l\exp\left(-\frac{\|\cdot\|^2}{2a^2}\right)\right) \times \\ \times \operatorname{sh}\left(gA_0l\exp\left(-\frac{\|\cdot\|^2}{2a^2}\right)\right)\exp\left(-\frac{ik\|\cdot\|^2}{s}\right)$$



Рис. 4. Моделирование формирования квантовых фантомных изображений оптических мир и щели согласно формуле (12). Расстояния между щелями мир 0.01, 0.02, 0.05, 0.1 мм (верхняя пара изображений; 50, 25, 10 и 5 штрихов на миллиметр), 0.02, 0.03, 0.04, 0.05 мм (средняя пара изображений; 25, 16.7, 12.5 и 10 штрихов на миллиметр). Ширина щели 0.16 мм. В левом столбце распределения прозрачностей объектов $T(\cdot)$, в правом — корреляционные функции $G(\cdot)$

и сдвинутой на r'_{\perp} функции

$$\frac{k \exp(iks)}{2\pi i s} \exp\left(\frac{ik(\|\cdot\|^2)}{2s}\right)$$

Это позволило выполнить расчеты по формуле (12) вычислением дискретной свертки массива значений внутреннего интеграла при фиксированном значении r'_{\perp} и при всех значениях r_{\perp} , принадлежащих выбранной сетке с постоянным шагом, а затем суммированием поэлементных квадратов модулей полученных массивов с весами, равными коэффициентам пропускания по интенсивности соответствующих пикселей освещаемого объекта.



Рис. 5. Профиль изображения щели на рис. 4 (сплошная линия) и профиль распределения прозрачностей самой щели (штриховая)

Результаты вычисления по формуле (12) сформированных фантомных изображений показаны на рис. 2–4. Использованные значения параметров: $a = l = 3 \text{ мм}, k \approx 8.95 \cdot 10^3 \text{ мм}$ (соответствует длине волны 702.2 нм), $gA_0l = 1$.

На рис. 2, 3 s = 1500 мм, $s_s = 1000$ мм, f = 500 мм. Степень размытия, полученная в результате компьютерного моделирования, согласуется с экспериментально наблюденной степенью размытия, полученной в [38], см. рис. 3.

На рис. 4, 5 $s = s_s = 500$ мм, f = s/2.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, нам удалось смоделировать формирование фантомных изображений дифракционно-ограниченной квантовой нелинейно-оптической системой. Задавая произвольный объект регистрации, мы получаем его компьютерное изображение. При этом сразу можно менять параметры системы, добиваясь оптимальных характеристик и качества изображения. Но это только начало работы. Не представляет принципиальной сложности вместо идеальной линзы установить реальный объектив, что позволит учесть не только дифракционные ограничения, но и аберрационные искажения. Интересно также исследовать влияние пространственной конфигурации накачки. Но это предмет дальнейшей работы. А к каким выводам можно прийти уже сейчас?

Подводя итоги, можно заключить, что компьютерное моделирование снова подтверждает утверждение о бо́льшем влиянии дифракции на фантомные изображения по сравнению с обычными. В самом деле, как отмечено выше, по дифракционным свойствам фантомное изображение, полученное по схеме рис. 1, аналогично изображению, сформированному на расстоянии от объекта, равном сумме оптических длин каналов, что увеличивает влияние дифракции по сравнению с обычным изображением приблизительно во столько раз, во сколько сумма оптических длин каналов превышает оптическую длину объектного канала. Вместе с тем использование гауссовского пучка накачки ограничивает поперечные размеры пучка более «мягко», чем это делало бы размещенное на месте нелинейного кристалла зеркало или объектив с резкими границами, что, напротив, несколько уменьшает обусловленное дифракцией размытие. Но все зависит, конечно, от апертуры оптики.

Однако это не означает бесперспективности усилий по получению фантомных изображений высокого качества. Так, в работах [39, 40] предложено дополнительное формирование и регистрация в объектном канале изображения исследуемого объекта, что позволяет ослабить влияние дифракции при использовании для последующей математической обработки пары полученных изображений методом редукции измерения к виду, свойственному измерениям распределения прозрачности объекта. А в работе [41] показаны возможные преимущества в этом плане встречного четырехфотонного смешения за счет снятия ограничений на соблюдение фазового синхронизма для эффективной генерации сигнального и холостого пучков.

ЛИТЕРАТУРА

- **1**. Д. Н. Клышко, Письма в ЖЭТФ **6**, 490 (1967).
- С. А. Ахманов, В. В. Фадеев, Р. В. Хохлов и др., Письма в ЖЭТФ 6, 575 (1967) [S. A. Akhmanov, V. V. Fadeev, R. V. Khokhlov et al., JETP Lett. 6, 85 (1967)].
- S. E. Harris, M. K. Oshman, and R. L. Byer, Phys. Rev. Lett. 18, 732 (1967), doi:10.1103/physrevlett. 18.732.
- D. Magde and H. Mahr, Phys. Rev. Lett. 18, 905 (1967), doi:10.1103/physrevlett.18.905.
- D. Magde and H. Mahr, Phys. Rev. **171**, 393 (1968), doi:10.1103/physrev.171.393.
- Д. Н. Клышко, Фотоны и нелинейная оптика, Наука, Москва (1980) [D. N. Klyshko, Photons and Nonlinear Optics, CRC Press (1988)].

- J. S.Bell, Physics 1(3), 195 (1964), doi:10.1103/ physicsphysiquefizika.1.195.
- J. F. Clauser, M. A. Horne, A. Shimony et al., Phys. Rev. Lett. 23, 880 (1969), doi:10.1103/physrevlett. 23.880.
- 9. A. Aspect, in *Quantum* [Un]speakables, ed. by R. A. Bertlmann and A. Zeilinger (2002), p. 119, doi: 10.1007/978-3-662-05032-3_9; arXiv:quant-ph/ 0402001.
- 10. А. В. Белинский, Д. Н. Клышко, УФН 163, (1993),doi:10.3367/UFNr.0163.199308a.0001. ν. [A. Belinskii and D. N. Klvshko. Phys. Usp. 36. 653(1993),doi:10.1070/ PU1993v036n08ABEH002299].
- X. Ma, J. Kofler, and A. Zeilinger, Rev. Mod. Phys. 88, 015005 (2016), doi:10.1103/revmodphys. 88.015005.
- Н. Жизан, Квантовая случайность. Нелокальность, телепортация и другие квантовые чудеса, Альпина нон-фикши, Москва (2016) [N. Gisin, Quantum Chance: Nonlocality, Teleportation and Other Quantum Marvels, Springer-Verlag (2014)].
- А. В. Белинский, А. А. Клевцов, УФН 188, 335 (2018), doi:10.3367/UFNr.2017.09.038210 [A. V. Belinsky and A. A. Klevtsov, Phys. Usp. 61, 313 (2018), doi:10.3367/UFNe.2017.09.038210].
- M. Proietti, A. Pickston, F. Graffitti et al., Sci. Adv. 5(9), eaaw9832 (2019), doi:10.1126/sciadv.aaw9832.
- А. В. Белинский, УФН 190, 1335 (2020), doi: 10.3367/UFNr.2020.05.038767 [A. V. Belinsky, Phys. Usp. 63, 1256 (2020), doi:10.3367/UFNe.2020.05. 038767].
- 16. Д. Н. Клышко, А. Н. Пенин, УФН 152, 653 (1987), doi:10.3367/ufnr.0152.198708e.0653 [D. N. Klyshko and A. N. Penin, Sov. Phys. Usp. 30, 716 (1987)].
- А. В. Белинский, Д. Н. Клышко, ЖЭТФ 105, 487 (1994) [A. V. Belinskii and D. N. Klyshko, JETP 78, 259 (1994)].
- А. Гатти, Э. Брамбилла, М. Баке и др., в Квантовое изображение, под ред. М. И. Колобова (ориг.),
 А. С. Чиркина (пер.), Физматлит, Москва (2009),
 с. 96 [A. Gatti, E. Brambilla, M. Bache et al., in Quantum Imaging, ed. by M. I. Kolobov, Springer (2007), p. 79].
- M. G. Basset, F. Setzpfandt, F. Steinlechner et al., Laser & Photon. Rev. 13, 1970042 (2019), doi: 10.1002/lpor.201970042.

- J. H. Shapiro and R. W. Boyd, Quant. Inf. Process. 11, 949 (2012), doi:10.1007/s11128-011-0356-5.
- B. I. Erkman and J. H. Shapiro, Adv. Opt. Photon.
 2, 405 (2010), doi:10.1364/aop.2.000405.
- 22. D. Duan, Sh. Du, and Yu. Xia, Phys. Rev. A 88, 053842 (2013), doi:10.1103/physreva.88.053842.
- D.-J. Zhang, H.-G. Li, Q.-L. Zhao et al., Phys. Rev. A 92, 013823 (2015), doi:10.1103/physreva.92. 013823.
- A. S. Chirkin, P. P. Gostev, D. P. Agapov et al., Laser Phys. Lett. 15, 115404 (2018), doi:10.1088/1612-202x/aae4a6.
- 25. А. С. Чиркин, Письма в ЖЭТФ 102, 444 (2015)
 [A. S. Chirkin, JETP Lett. 102, 404 (2015), doi: 10.1134/S0021364015180046].
- 26. А. В. Белинский, Вестник Московского унив. Серия 3. Физика, астрон. № 5, 3 (2018) [A. V. Belinsky, Moscow Univ. Phys. Bull. 73(5), 447 (2018), doi: 10.3103/S0027134918050053].
- 27. P.-A. Moreau, P. A. Morris, E. Toninelli et al., Sci. Rep. 8, 13183 (2018), doi:10.1038/s41598-018-31429-y.
- P.-A. Moreau, E. Toninelli, P. A. Morris et al., Opt. Express 26, 7528 (2018), doi:10.1364/oe.26.007528.
- 29. A. S. Chirkin and E. V. Makeev, J. Opt. B: Quant. Semiclass. Opt. 7, S500 (2005), doi:10.1088/ 1464-4266/7/12/010.
- 30. B. Huttner, S. Serulnik, and Y. Ben-Aryeh, Phys. Rev. A 42, 5594 (1990), doi:10.1103/physreva.42. 5594.

- M. Toren and Y. Ben-Aryeh, Quant. Opt.: J. Europ. Opt. Soc., Part B 6, 425 (1994), doi:10.1088/0954-8998/6/5/006.
- 32. С. А. Ахманов, А. В. Белинский, А. С. Чиркин, КЭ 15, 873 (1988) [S. A. Akhmanov, A. V. Belinskii, and A. S. Chirkin, Sov. J. Quant. Electron. 15, 873 (1988)].
- 33. М. И. Колобов, И. В. Соколов, ЖЭТФ 96, 1945 (1989) [М. І. Kolobov and I. V. Sokolov, JETP 69, 1097 (1989)].
- **34**. А. В. Белинский, А. С. Чиркин, ЖТФ **59**(4), 174 (1989).
- 35. А. В. Белинский, А. С. Чиркин, Вестник Московского унив. Серия 3. Физика, астрон. № 30, 38 (1989)
 [А. V. Belinskii and А. S. Chirkin, Moscow Univ. Phys. Bull. 30(3), 38 (1989)].
- 36. А. В. Белинский, А. С. Чиркин, КЭ 16, 2551 (1989) [A. V. Belinsky and A. S. Chirkin, Sov. J. Quant. Electron. 19, 1638 (1989)].
- **37**. А. Н. Матвеев, *Оптика*, Высш. школа, Москва (1985) [А. N. Matveev, *Optics*, Mir, Moscow (1988)].
- 38. Y.-H. Kim and Y. Shih, Found. Phys. 29, 1849 (1999), doi:10.1023/a:1018890316979.
- 39. Д. А. Балакин, А. В. Белинский, Вестник Московского унив. Серия 3. Физика, астрон. № 4, 12 (2020)
 [D. A. Balakin and A. V. Belinsky, Moscow Univ. Phys. Bull. 75(4), 12 (2020)].
- 40. D. A. Balakin and A. V. Belinsky, Quant. Inf. Process. 19(9), 316 (2020), doi:10.1007/s11128-020-02820-4.
- 41. А. В. Белинский, Р. Сингх, ЖЭТФ 159, 258 (2021)
 [A. V. Belinsky and R. Singh, JETP 132, 212 (2021)].

ЭЛЕКТРОРОЖДЕНИЕ КАОНОВ НА ПРОТОНЕ

М. В. Егоров^{а, b*}, В. И. Постников^а

^а ФГУП «Российский федеральный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. академ. Е. И. Забабахина» 456770, Снежинск, Россия

> ^b Лаборатория теоретической и математической физики, Томский государственный университет 634050, Томск, Россия

> > Поступила в редакцию 10 декабря 2020 г., после переработки 16 февраля 2021 г. Принята к публикации 24 февраля 2021 г.

Представлена модель электророждения каонов в процессах $p(e, e'K^+)\Lambda$, $p(e, e'K^+)\Sigma^0$ и $p(e, e'K^0)\Sigma^+$ в области импульсных передач Q^2 до 2.5 ГэВ². Амплитуда электророждения строится на основе *s*-, *t*-, *u*-борновских и *s*-, *u*-резонасных вкладов, рассчитываемых в древесном приближении. Унитарность амплитуды электророждения частично восстанавливается с помощью введения импульсной зависимости адронных ширин распада резонансов и введения дополнительной эффективной ширины, учитывающей влияние связывания не содержащих странность открытых каналов. Отличительной особенностью расчетов является учет продольной электромагнитной связи фотонов с адронами и введение сильно Q^2 -зависимых факторов подавления борновских и резонансных компонент амплитуды электророждения. Данный подход позволяет с хорошей точностью описать имеющиеся в литературе экспериментальные данные по угловому и Q^2 -распределению для реакций $p(e, e'K^+)\Lambda$, $p(e, e'K^+)\Sigma^0$. Также данная модель правильно воспроизводит зависимость отношений $\sigma(\Sigma^0)/\sigma(\Lambda)$ отдельно для продольно и поперечно поляризованных компонент сечения электророждения каонов в процессах $p(e, e'K^+)\Lambda$, $p(e, e'K^+)\Sigma^0$.

DOI: 10.31857/S0044451021070051

1. ВВЕДЕНИЕ

Индуцированное электромагнитным взаимодействием рождение ассоциированной странности $\gamma \rightarrow$ $\rightarrow s\bar{s}$ служит основным источником информации о резонансных состояниях барионов, слабо связанных с каналом упругого *πN*-рассеяния, но имеющих открытый каон-гиперонный канал распада. Несмотря на большое количество накопленных данных по πN -рассеянию, одиночному и двойному фоторождению легких π - и η -мезонов, до конца не ясна роль заметной части предсказанных конституентной кварковой моделью [1] резонансных состояний барионов, особенно в области масс около 2 ГэВ, что известно как проблема «недостающих резонансов». Образование каон-гиперонных пар на нуклоне в электромагнитном поле при больших передачах квадрата 4-импульса Q^2 характеризуется высокой чувствительностью к деталям механизма фото- и электророждения, а также влиянием партонной структуры нуклона-мишени и переходных формфакторов, зависящих от Q^2 . Особенно заметна роль этих структур в реакциях электророждения каонов в резонансой области энергий фотонов $E_{\gamma}^{lab} \in 1$ –3 ГэВ. Влияние внутренней структуры участвующих в реакции электророждения каонов частиц может быть эффективно учтено с помощью формфакторов, введение которых, как известно, подавляет нефизический рост борновских и резонансных амплитуд электрои фоторождения, рассчитываемых в древесном приближении, с ростом полной энергии системы. Необходимость корректного расчета таких формфакторов подавления в реакциях электророждения каонов отмечалась ранее в работах [2,3].

Отдельное направление исследований в области электророждения каонов заключается в извлечении информации об энергиях связи и в целом о механизмах каон-нуклонного, гиперон-нуклонного и многочастичного гиперон-гиперон-нуклонного взаимодействий в ядерной материи. Полноценное изуче-

^{*} E-mail: egorovphys@mail.ru

ние механизмов указанных взаимодействий в данном случае возможно только после выполнения ряда требований, предъявляемых к процессам образования каон-гиперонных пар, среди которых наличие невозмущенного сильным взаимодействием начального состояния ядра-мишени, импульсный характер образования конечных частиц и достаточно высокие импульсы образующихся каонов. Этими свойствами и характеризуются реакции электро- и фоторождения каонов. По этой причине пристальное внимание к деталям оператора электророждения каонов на нуклонах позволяет в дальнейшем избежать возможных неопределенностей модели электророждения каонов на легких ядрах в части однонуклонного оператора электророждения.

В данной работе мы расширяем изобарную модель [4] в область $Q^2 > 0$ для каналов электророждения $K^+\Lambda$, $K^+\Sigma^0$ и $K^0\Sigma^+$ на протоне. Отметим, что моделей с полноценным учетом сильной связи каонгиперонного канала с каналами, не содержащими странность, по-прежнему нет. Вместо этого частичное восстановление унитарности амплитуды фотои электророждения каонов достигается введением импульсной зависимости адронных ширин распада промежуточных резонансных состояний барионов [4, 5]. Рассчитываемые по таким адронным ширинам константы связей эффективно учитывают влияние связывания каналов. Тем не менее, несмотря на простоту, такие модели передают основные особенности сечений фото- и электророждения каонов на нуклоне. Резонансные вклады в представленной модели рассчитываются по выражениям для вершинных функций работы [6], борновские продольные и поперечные вклады находятся с помощью CGLNамплитуд работ [3,5]. При этом продольно поляризованные резонансные вклады нивелированы с помощью соответствующего выбора продольных электромагнитных констант связей, что также выгодно отличает данную модель от BS3-модели работы [5] отсутствием необходимости в поиске плохо контролируемых параметров. Полученная модель позволяет единым образом описывать сечения фотои электророждения каонов на протоне в трех зарядовых каналах. К отличительным особенностям модели также относится тот факт, что s-, t-, uборновские компоненты амплитуды электророждения сильно подавлены специально подобранными Q²-зависимыми факторами подавления. В результате удается правильно передать поведение полных и дифференциальных сечений в области высоких энергий $E_{\gamma}^{lab} > 2$ ГэВ и высоких импульсных передач $Q^2 \rightarrow 2.5$ ГэВ². Кроме того, в данной работе уделяется особое внимание описанию многочисленных экспериментальных данных по электророждению каонов на протоне в области малых углов вылета каонов в системе центра масс (ЦМ, СМ). Калибровка модели в первую очередь именно на эти данные позволит использовать развитый в настоящей работе подход к описанию данных по электророждению каонов на легких ядрах с учетом механизмов взаимодействия гиперонов с ядерным окружением.

2. ОДНОКАНАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ЭЛЕКТРОРОЖДЕНИЯ

Отличие электророждения от фоторождения проявляется в кинематических соотношениях, связывающих полную энергию системы W с энергией фотонов ω_{γ} , заданной в системе центра масс:

$$-Q^{2} \equiv k^{2} = \omega_{\gamma}^{2} - \mathbf{k}^{2},$$

$$\omega_{\gamma} = \frac{W^{2} - Q^{2} - M_{N}^{2}}{2W},$$

$$E_{\gamma}^{lab} = \omega_{\gamma} \frac{W}{M_{N}}.$$
(1)

В расчетах по формулам (1) используется масса нуклона M_N . Связь энергии фотонов в системе центра масс и в лабораторной системе позволяет устанавливать характерные отличия данных по фотои электророждению при одинаковой энергии E_{γ}^{lab} . Для виртуальных фотонов по-прежнему справедлива лоренцева калибровка $\epsilon_{\mu}k_{\mu} = 0$, из которой можно определить временную компоненту 4-вектора поляризации ϵ_{μ} . В отличие от фоторождения взаимодействие виртуальных фотонов γ_V с протоном-мишенью в рассматриваемых процессах,

$$e + p(-\mathbf{k}) \to \gamma_V(\boldsymbol{\epsilon}_{\lambda}, \mathbf{k}) + p(-\mathbf{k}) \to$$
$$\to e' + \begin{cases} K^+(\mathbf{q}) + \Lambda(-\mathbf{q}), \\ K^+(\mathbf{q}) + \Sigma^0(-\mathbf{q}), \\ K^0(\mathbf{q}) + \Sigma^+(-\mathbf{q}), \end{cases}$$
(2)

характеризуется не только кинематическими особенностями, но и проявлением так называемой продольной электромагнитной связи. Первые упоминания о существенной роли продольной электромагнитной компоненты амплитуды электророждения, характеризуемой условием $\epsilon_0 \equiv \epsilon_z \neq 0$, и соответствующие расчеты при $Q^2 = 0.035-0.055$ ГэВ² приведены в работе [7]. Изобарная модель электророждения каонов в канале $K^+\Lambda$ в широкой области энергий с учетом продольной электромагнитной компоненты развита в работе [5]. Из этих работ следует, что только учет дополнительной компоненты в амплитуде электророждения, рассчитываемой с использованием собственных продольных констант связей фотонов с адронами, позволяет описать неполяризованное сечение электророждения каонов в области $Q^2 > 0.5 \ \Gamma \Rightarrow B^2$. Наличие этой связи играет роль дополнительной степени свободы, которая позволяет лучше согласовывать между собой расчеты дифференциальных сечений $d\sigma/d\Omega$ и $d\sigma/dQ^2$.

Ненулевая продольная поляризация $\epsilon_0 \equiv \epsilon_z = +1$ фотона играет роль дополнительной степени свободы, связанной с измеряемой в опыте продольной компонентой сечения $\sigma_L(Q^2)$, существенно зависящего от Q^2 . Важно подчеркнуть, что для неполяризованного сечения электророждения каонов появление продольной электророждения каонов появление продольной электророждения каонов появление продольной электророждения каонов в системе центра масс, где угол θ_{CM}^K отсчитывается между 3-импульсом каона **q** и осью симметрии, вдоль которой направлен 3-импульс фотона **k**, имеет вид

$$\frac{d\sigma(Q^2)}{d\Omega_{CM}^K} = \frac{d\sigma_T(Q^2)}{d\Omega_{CM}} + \varepsilon \frac{d\sigma_L(Q^2)}{d\Omega_{CM}}.$$
(3)

Измерения в опытах дифференциального сечения электророждения каонов $d\sigma(Q^2)/d\Omega_{CM}^K$ при различных степенях поперечной поляризации $\varepsilon \in [0, ..., 1]$ пучка фотонов позволяют извлекать информацию о дифференциальных сечениях электророждения каонов фотонами отдельно с поперечной $d\sigma_T(Q^2)/d\Omega_{CM}$ и с продольной $d\sigma_L(Q^2)/d\Omega_{CM}$ поляризацией. Как отмечалось выше, в формуле (3) каждое из слагаемых в правой части имеет вклад продольной электромагнитной связи для $\epsilon_{-1}, \epsilon_1 =$ = +1 в σ_T и для $\epsilon_0 =$ +1 в σ_L . Дифференциальное сечение (3) связано с амплитудой электророждения T^{λ} формулой

$$\frac{d\sigma(Q^2)}{d\Omega_{CM}^K} = \frac{q(W - \omega_\gamma)(W - \omega_K)}{16\pi^2 \omega_\gamma W^2} \times \frac{1}{2} \Big(|T^{\lambda = \pm 1}|^2 + 2\varepsilon |T^{\lambda = 0}|^2 \Big), \quad (4)$$

в которой ω_K — энергия каона. В данном подходе амплитуда электророждения строится с использованием амплитуды фоторождения ($Q^2 = 0$), полученной ранее в модели [4]. Наполнение амплитуды осуществлено с использованием набора эффективных мезон-барионных лагранжианов, характеризующих обмен нуклоном и каонами в *s*-, *t*-каналах (борновские слагаемые) и обмен резонансами в *s*-, u-каналах (резонансные слагаемые). Соответствующие этим обменам диаграммы Фейнмана представлены, например, в работе [3]. Резонансная часть амплитуды $\lambda = \pm 1$ находится [6] в удобном факторизованном виде:

$$T^{\lambda=\pm 1} = V^{E/M}_{\gamma N \to N^*} G_{N^*}(\Gamma_t, M, W) V_{N^* \to KN}, \qquad (5)$$

отражающем электромагнитную $V_{\gamma N \to N^*}$ и адронную $V_{N^* \to KN}$ вершинные функции. Связь этих функций с соответствующими электромагнитными и адронными константами связи дается выражениями

$$V_{\gamma N \to N^{*}}^{E} = \frac{g^{E}}{2M^{j-1}} \left(\sigma_{1/2,J}^{[j]} \cdot \left[k^{[j-1]} \otimes \epsilon_{\lambda}^{[1]} \right]^{[j]} \right), \\ j = 2J - L; \\ V_{\gamma N \to N^{*}}^{M} = \frac{g^{M}}{2M^{j}} \left(\sigma_{1/2,J}^{[j]} \cdot \left[k^{[j]} \otimes \epsilon_{\lambda}^{[1]} \right]^{[j]} \right), \\ j = L; \\ V_{N^{*} \to KN} = -i \frac{f_{K\Lambda(\Sigma)R}}{m_{K}^{L}} \left(\sigma_{J,1/2}^{[L]} \cdot q^{[L]} \right), \end{cases}$$
(6)

содержащими явно зависимость от спина J и L орбитального момента адронного резонанса. Для резонансов с изоспином T = 1/2 каждая из констант $g^{E/M}$, в свою очередь, распадается [6] на сумму $k_s^{E/M}$ изоскалярной и $k_v^{E/M}$ изовекторной компонент. Пропагатор в (5) обозначен как G_{N^*} и является функцией полной адронной ширины распада резонанса Γ_t , массы резонанса M и полной энергии системы W. Борновские слагаемые амплитуды фоторождения рассчитываются в нерелятивистском приближении на основе BS1-модели [3] с использованием CGLN-амплитуд $f_i(-Q^2, s, t, u)$. При этом каждая из амплитуд T^{λ} дается суммой шести компонент:

$$T^{\lambda} = f_{1}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\lambda} - if_{2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{q}} \,\boldsymbol{\sigma} \cdot [\hat{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\epsilon}_{\lambda}] + f_{3}\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{k}} \,\hat{\mathbf{q}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\lambda} + f_{4}\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{q}} \,\hat{\mathbf{q}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\lambda} + f_{5}\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{k}} \,\hat{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\lambda} + f_{6}\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{q}} \,\hat{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}.$$
(7)

Единичные 3-векторы обозначены символом [^]. Продольная электромагнитная связь виртуальных фотонов с адронами рассчитывалась с использованием калибровочно-инвариантных амплитуд работы [5] для борновских и резонансных вкладов. Выражение для продольных $T^{\lambda=0}$ компонент идентично формуле (7). Как отмечалось в работе [4], изза достаточно высокой роли в сечении воссозданных таким образом борновских компонент амплитуд фоторождения обнаруживают нефизический рост сечения $d\sigma/dQ^2$ при $Q^2 \rightarrow 0.5$ –3 ГэВ². Указанный рост сечения, отмеченный также в работе [3], должен сокращаться с резонансными вкладами в полной амплитуде электророждения, но в практических расчетах не удается полностью исключить нефизический рост сечения в области больших энергий системы W и больших переданных импульсов Q^2 . По всей видимости, причиной этого является нетривиальная импульсная зависимость используемых в расчетах калибровочно-инвариантных амплитуд. В данной модели для s-, t-, u-борновских слагаемых используется продолженная в область $Q^2 > 0$ функциональная форма для факторов подавления $F(v, \Lambda_v, k^2)$:

$$F(v, \Lambda_v, k^2) = \frac{\Lambda'_v^4}{k^4 + \Lambda'_v^4} \exp\left(-\kappa_x \frac{k^4}{\Lambda'_v^4}\right) \times \\ \times \left(\frac{\Lambda_v^4}{(v - M_v^2)^2 + \Lambda_v^4}\right)^{\text{deg}} \exp\left(-\frac{(v - M_v^2)^2}{\Lambda_v^4}\right). \tag{8}$$

При $Q^2 = 0$ функциональная зависимость (8) идентична использованным ранее в работах [3,8] выражениям. В формуле (8) используются шесть различных параметров обрезания Λ_v и Λ'_v для каналов $v \in [s, t, u]$, а также массы M_v , равные массам нуклона, каона и гиперона в соответствующих s-. *t*- и *u*-каналах. Такую же функциональную форму имеют формфакторы подавления в t-каналах с обменом тяжелым $K^*(892)$ ($K^*(892)$ в t-канале) мезоном и $K_1(1270)$ ($K^{*1}(1270)$ в *t*-канале) мезонным резонансом. Соответствующие параметры обрезания обозначаются как Λ_{t^*} и $\Lambda_{t^{*1}}$ и наряду с параметрами Λ_v отражены в табл. 1. Дополнительный параметр κ_x , где $x \in [\Lambda, \Sigma]$, в показателе зависящей от k^2 экспоненты отличен от единицы только в расчетах продольно поляризованных сечений в каналах $t - K^*(892)$ и $t - K^{*1}(1270)$ и различен для конечных состояний $K\Lambda$ и $K\Sigma$.

На рис. 1 сплошными линиями даны зависимости $F(v, \Lambda_v, k^2 = 0)$ в различных каналах в кинематике W=1.84ГэВ, $\theta^K_{CM}=0$ для случая фоторождения. Виден характерный рост формфактора в t-, *и*-борновских и $t - K^*(892)$ -каналах. Штриховыми линиями на рис. 1 представлены результаты расчетов с формфакторами $F(v, \Lambda_v, k^2)$ в случае электророждения, которые дают существенное подавление с ростом Q^2 . Отметим, что при выбранных параметрах обрезания в s-канале соответствующий формфактор оказывается близким к нулю из-за подавляющего действия экспоненты $\exp\left(-(s-M_N^2)^2/\Lambda_s^4\right)$. В данной работе параметры обрезания, используемые в расчетах, подобраны так, что доминирующий вклад в сечение в широкой области импульсных передач возникает в каналах $t - K^*(892)$ и



Рис. 1. Формфакторы $F(v, \Lambda_v, k^2)$, рассчитываемые по формуле (8) в s-, t-, u-каналах в кинематике W = 1.84 ГэВ, $\theta_{CM}^K = 0$. Приведены результаты расчетов с $Q^2 = 0$ (сплошные кривые) и с $Q^2 \neq 0$ (штриховые кривые)

t — K*1(1270). Сильное подавление t-, и-канальных борновских вкладов, играющих важную роль в области малых углов рождения каонов, вызвано осциллирующим характером используемых амплитуд [3], рост которых должен быть подавлен либо за счет специфической интерференции с другими компонентами амплитуды электророждения, либо за счет подходящего выбора параметров обрезания.

На нижнем левом рис. 2 фиолетовой кривой (штрих-двойной пунктир) представлены результаты расчетов по развиваемой в данной работе модели [4], успешно примененной для описания некоторых данных по фоторождению каон-гиперонных пар на протоне. Нефизический рост сечения $d\sigma_T(Q^2)/d\Omega_K^{CM}$ уже при малых $Q^2 \approx 0.5 \ \Gamma \to B^2$ приводит к необходимости введения дополнительной k^2 -зависимости в формфакторах подавления. Отметим некоторое отличие в расчетах σ_L -сечения в t-каналах, для которого используются несколько другие параметры обрезания, также приведенные в табл. 1. Кроме факторов подавления изменилось значение борновских констант связей $g_{KYN}/\sqrt{4\pi}, G_V(K^*(892))$ по сравнению со значениями, использовавшимися в расчетах [3,4]. Константа $g_{KYN}/\sqrt{4\pi}$ принимает во всех каналах $K^+\Lambda$, $K^+\Sigma^0$ и $K^0\Sigma^+$ одинаковое значение равное -3.55. Константа $G_V(K^*(892))$ принята равной -0.11, что близко к значению -0.107, используемому в работе [5]. Значения остальных констант, используемых при расчетах борновских слагаемых амплитуды фоторождения, по сравнению с расчетами [3,4] не менялись.

Параметры обрезания	s	t	u	$t - K^*(892)$	$t - K^{*1}(1270)$
$\Lambda,$ ГэВ	0.65	1.05	1	0.77	0.77
$\Lambda'_{\Lambda},$ ГэВ	0.28/1	0.55/0.3	0.65	0.8/0.7	0.8/0.7
Λ'_{Σ} , ГэВ	0.28/1	0.55/0.3	0.65	0.3/0.7	0.3/0.7
κ_{Λ}	1	1	1	1/0.14	1/0.14
κ_{Σ}	1	1	1	1/0.4	1/0.4
\deg	1	1	1	2	2

Таблица 1. Параметры факторов подавления, используемые в расчетах по формуле (8). Косой чертой разделены параметры, используемые отдельно при расчетах σ_T/σ_L -сечений

Таблица 2. Массы M [МэВ], адронные и электромагнитные константы связи (см. в тексте) промежуточных резонансов (со спином J и изоспином T), а также параметры обрезания Λ [ГэВ], используемые в расчетах факторов подавления по формуле (10). Через косую черту в колонке для f_{inel} в случае $P_{11}(1880)$ приведены значения для каналов Λ/Σ , а в случае $S_{31}(1900)$ и $P_{31}(1910)$ — значения для каналов Σ^+/Σ^0

$R_{2T \ 2J}(M)$	M	$f_{K\Lambda R}$	$f_{K\Sigma R}$	f_{inel}	Λ	k_s^M/k_v^M или g^M	k^E_s/k^E_v или g^E	g^L
$P_{11}(1440)$	1430	1.675	1.3	1.2	1	0.07/0.36	-/-	10^{-2}
$S_{11}(1535)$	1547	0.29	0.2	0.3	1	-/-	-0.09/-0.27	10^{-2}
$S_{11}(1650)$	1645	0.12	0.16	1.6	1	-/-	0.006/-0.12	$3 \cdot 10^{-2}$
$D_{15}(1675)$	1675	0.362	3.04	3.23	1	-0.3/0.6	-0.024/-0.023	-10^{-5}
$F_{15}(1680)$	1680	0	5.65	6.61	1	0.2/1.47	0.08/0.25	0
$D_{13}(1700)$	1725	1	1	70	1.614	-0.46/-0.54	-0.02/0.023	10^{-2}
$P_{11}(1710)$	1710	0.21	0.21	14	0.2	0/-0.24	-/-	1
$P_{13}(1720)$	1720	0.625	0.1	14	1.5	-0.06/-0.03	-0.025/0.02	10^{-2}
$F_{15}(1860)$	1860	1.6	0.916	20	1.5	0.2/1.47	0.08/0.25	10^{-2}
$D_{13}(1875)$	1875	2.5	0.5	7	1.5	0.1/0.1	-0.02/0.03	$2\cdot 10^{-3}$
$P_{11}(1880)$	1880	0.8	0.35	5.8/10	1.2	0.107/-0.22	-/-	0.1
$P_{13}(1920)$	1920	1.45	0.44	3	1.7	-0.145/-0.016	-/-	$2 \cdot 10^{-3}$
$F_{17}(1990)$	2020	1.5	2.5	7	1.1	0.004/0.6	0.04/-0.003	0
$F_{15}(2000)$	1980	0.05	0.824	8.5	1.5	0.2/1.47	0.08/0.25	0
$D_{15}(2060)$	2100	0.43	0.53	4	0.613	0.181/0.261	-0.19/0.09	0
$P_{11}(2100)$	2150	0.01	0.01	5	1.179	6.1/-0.125	-/-	1
$D_{13}(2120)$	2120	0.2	1.3	5	1.164	0.753/0.274	-0.267/0.175	1
$P_{33}(1600)$	1600	0	5	1	0.8	-0.24	0.13	1
$S_{31}(1620)$	1620	0	0.072	2.29	1	—	-0.13	1
$D_{33}(1700)$	1722	0	3.56	108.6	1.614	0.1	-0.2	10^{-2}
$S_{31}(1900)$	1860	0	1	2.5/4	0.7	-0.19	-0.25	1
$F_{35}(1905)$	1880	0	2.62	25.3	1	-0.72	-0.013	0
$P_{31}(1910)$	1910	0	0.8	3.2/3.4	1	0.11	—	1
$P_{33}(1920)$	1890	0	0.4	6	1	-0.14	-0.73	10^{-4}
$F_{37}(2200)$	2200	0	3.5	6.5	1.1	-0.72	-0.013	0



Рис. 2. (В цвете онлайн) Дифференциальные сечения процессов электророждения каонов на протоне в кинематике W = 1.84 ГэВ и $\theta_{CM}^{K} = 0$. Сверху: $d\sigma_L(Q^2)/d\Omega_K^{CM}$, продольно поляризованные сечения, снизу: $d\sigma_T(Q^2)/d\Omega_K^{CM}$, поперечно поляризованные сечения для процессов $p(e, e'K^+)\Lambda$ (слева) и $p(e, e'K^+)\Sigma^0$ и $p(e, e'K^0)\Sigma^+$ (справа). Пунктирные кривые (черные и синяя) — модель K-MAID [9], зеленые штриховые — модель BS3 [5]. Расчет с моделью [4] — фиолетовый штрих-двойной пунктир. Экспериментальные данные: [10] ($Q^2 = 0$), [11], [12]

В данной работе именно борновским слагаемым принадлежит ведущая роль в сечениях σ_L , что выгодно отличает данную модель от модели [5] снятием необходимости слабо обоснованного поиска многочисленных продольных констант связей виртуальных фотонов с возбужденными барионами. На рис. 2 сверху приведены результаты расчетов дифференциальных сечений $d\sigma_L/d\Omega$ процессов $p(e, e'K^+)\Lambda$ и $p(e, e'K^+)\Sigma^0$ в кинематике W = 1.84 ГэВ и $\theta_{CM}^K = 0.$ Слева сверху на рис. 2 черной пунктирной кривой отмечен вклад в сечение резонансных состояний нуклона, заметный при $Q^2 > 2.25$ ГэВ². Результаты расчетов для поперечной компоненты сечения электророждения каонов в той же кинематике даны на рис. 2 снизу для процессов $p(e, e'K^+)\Lambda$ и $p(e, e'K^+)\Sigma^0$. Слева снизу на рис. 2 черной пунктир-

ной кривой отображен расчет без учета продольной электромагнитной компоненты амплитуды электророждения каонов. Как показывают расчеты, только с учетом продольных компонент в амплитуде электророждения удается компенсировать недостаток сечения $\sigma_T(Q^2)$ в области $Q^2 = 0.5-2.5 \ \Gamma \Rightarrow B^2$, что согласуется с ожиданиями работ [5,7]. Для сравнения слева на рис. 2 приведены расчеты по модели K-MAID [9] (пунктирная черная кривая) и модели BS3 [5] (зеленые штриховые кривые). Согласия с данными удается достичь только с помощью нашей модели и модели BS3.

Расчет резонансных вкладов в амплитуду электророждения в целом не отличался от расчетов процессов фоторождения [4]. Как и ранее, предполагается, что полная адронная ширина распада резонан-



Рис. 3. (В цвете онлайн) Дифференциальное сечение $d\sigma_T/d\Omega$ в зависимости от полной энергии W при $Q^2 = 0.65$ ГэВ² для различных значений $\cos(\theta_{CM}^K)$, a) для реакции $p(e, e'K^+)\Lambda$, b) для $p(e, e'K^+)\Sigma^0$. Масштаб по осям графиков, относящихся к одной и той же реакции, одинаковый. Точки — экспериментальные данные [14]. Расчеты: черные сплошные кривые — данная работа, синие штриховые — модель [15], фиолетовые штрихпунктирные — модель Janssen B [16]

са $\Gamma_t(W)$ есть сумма трех компонент:

$$\Gamma_t(W) = \Gamma_{R \to K\Lambda}(W) + \Gamma_{R \to K\Sigma}(W) + \Gamma_{inel}(W), \quad (9)$$

каждая из которых зависит от полной энергии системы W. Введение компоненты $\Gamma_{inel}(W)$ с конс-

тантой связи f_{inel} позволяет эффективно учитывать влияние не содержащих странность неупругих каналов ($\pi N, \sigma N, \eta N, f_0 N, a_0 N$) распада барионных резонансов. Значение константы f_{inel} фиксировалось и не менялось для каналов $K^+\Lambda$, $K^+\Sigma$ и $K^0\Sigma^0$. Исключение составляет резонансы $P_{11}(1880)$ и $S_{31}(1900)$, $P_{31}(1910)$, для которых в зависимости от рассматриваемого канала менялось значение f_{inel} . Это обстоятельство можно считать сравнительно небольшой платой за пренебрежение корректным учетом связывания каналов. Факторы подавления, фигурирующие в адронных вершинах распада резонансов с полным спином J, выбирались в той же мульти-диполь-гауссовой форме, как и в расчетах фоторождения [4]:

$$F_{mG}(s, M, \Lambda, \Gamma_t(W); J) = \left(\frac{M^2 \Gamma^2(J, W)}{(s - M^2)^2 + M^2 \Gamma^2(J; W)}\right)^{J-1/2} \times \\ \times \exp\left(-\frac{(s - M^2)^2}{\Lambda^4}\right),$$
(10)
$$\Gamma(J, W) = \frac{\Gamma_t(W)}{\sqrt{2^{1/2J} - 1}}.$$

Как показали расчеты, зависимости (10) достаточно и в области $Q^2 > 0$, в которой роль резонансов заметна только в поперечно поляризованных сечениях $\sigma_T(Q^2)$, в чем можно убедиться, сопоставив между собой экспериментальные сечения в зависимости от W при фиксированных углах разлета частиц для фото- и электророждения. Только для некоторых резонансов, в частности для $D_{13}(1700)$, $D_{15}(1675)$, $D_{33}(1700)$ и $S_{31}(1900)$, была введена дополнительная k^2 -зависимость формфактора подавления в виде

$$\frac{\Lambda_R^4}{k^4 + \Lambda_R^4} \tag{11}$$

с параметром обрезания $\Lambda_R = 0.3$ ГэВ. Дополнительных, отличных от используемых в работе [4], факторов подавления для *s*-канальных резонансов, а также для *и*-канальных гиперонных резонансов не вводилось. Ввиду изменения параметров фоновых борновских вкладов, в модели электророждения используются некоторые другие параметры адронных констант связей резонансов, представленные в табл. 2. По сравнению с расчетами [4] изменения в резонансных константах коснулись практически всех наиболее важных резонансов: $F_{15}(1680)$, $P_{11}(1710)$, $F_{15}(1860)$, $D_{13}(1875)$, $P_{11}(1880), P_{13}(1920), F_{17}(1990), P_{11}(2100), P_{31}(1910),$ $P_{33}(1920)$. Кроме того, включение нового «недостающего» резонанса F₃₇(2200) стало необходимым для корректного описания полного сечения фоторождения $K^+\Sigma^0$ в области $E_{\gamma}^{lab} > 1.9$ Гэ
В дополнением модели. Также в табл. 2 даны электромагнитные константы: изоскалярная k_s и изовекторная k_v , рассчитываемые для магнитных М и электрических

E переходов резонансов с изоспином 1/2, и электромагнитные константы g^M и g^E , рассчитываемые отдельно для магнитных и электрических переходов резонансов с изоспином 3/2. Следует отметить, что указанные электромагнитные константы, как и параметры обрезания Л, фигурирующие в формуле (10), согласованы с более ранними расчетами, проведенными для фоторождения $\pi^0\pi^0$ и $\pi^0\eta$ на легких ядрах [13]. Как показали проведенные расчеты по модели электророждения [5], величина и знак продольных электромагнитных констант связей q^L могут быть важны для расчета сечений $\sigma_L(Q^2)$, в которых при варьировании параметров q^L обнаруживается сильнейшая интерференция резонансных и борновских вкладов. Как можно видеть из табл. 2, в данной работе с использованием модели [5] для расчета продольной компоненты в амплитуде электророждения большинство продольных электромагнитных констант q^L равно или близко к нулю. Как отмечалось выше, это позволяет избавиться от дополнительных плохо контролируемых параметров модели. Те продольные константы, значения которых равны единице, скорее, указывают на незаметную роль данного резонанса в рассматриваемых реакциях. Вклады гиперонных резонансов в *и*-каналах рассчитывались так же, как и в случае фоторождения по модели [4], без введения дополнительной k^2 -зависимости в формфакторы.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 3 представлены результаты расчетов неполяризованного дифференциального $d\sigma_T/d\Omega$ сечения как функции полной энергии W при $Q^2 =$ = 1 ГэВ² для различных значений $\cos(\theta_{CM}^{K})$. Из рисунка видно, что в области малых углов вылета частиц $\cos\left(\theta_{CM}^{K}\right)~=~0.05\text{--}0.9$ дифференциальное сечение хорошо воспроизводит экспериментальные данные. В области бо́льших углов разлета теория слегка переоценивает эксперимент для реакции $p(e, e'K^+)\Lambda$. Для электророждения каонов в процессе $p(e, e'K^+)\Sigma^0$ модель хорошо передает характер изменения экспериментальных данных при всех рассмотренных углах вылета частиц. Некоторая недооценка сечения процесса $p(e, e'K^+)\Sigma^0$ имеет место в области $\theta_{CM}^K \approx 90^\circ$ с ростом W. Отметим, что наши расчеты показывают наличие слабой интерференции между борновскими и s-канальными резонансами в поперечном сечении $d\sigma_T/d\Omega$, приводящей к характерным пиковым структурам в сечении



Рис. 4. (В цвете онлайн) а) Дифференциальное сечение $d\sigma/d\Omega_{CM}^{K}(Q^2)$ для различных значений степени поляризации $\varepsilon = 0.439, 0.662, 0.78.$ Эксперимент: [11]. б) Дифференциальное сечение $d\sigma/d\Omega_{CM}^{K}(E_{\gamma}^{lab})$ в кинематике $\theta_{CM}^{K} = 6^{\circ}$ процессов $p(e, e'K^+)\Lambda$, $p(e, e'K^+)\Sigma^0$ и $p(e, e'K^0)\Sigma^+$ для различных значений Q^2 в сравнении с данными [10] ($Q^2 = 0$), [19] $(Q^2 = 0)$, [17], [18] и моделью BS3 [5]

при некоторых значениях W процесса $p(e, e'K^+)\Lambda$. При первом сравнении данных по электророждению $K^+\Sigma^0$ [14] с данными по фоторождению (см., например, ссылки [35–37] в работе [4]) при близких значениях θ_{CM}^K можно сделать вывод о том, что оба этих процесса обусловлены поперечно поляризованной компонентой сечения: форма и порядок сечения одинаков. Указанное обстоятельство согласуется с нашим предположением о пренебрежимо малом вкладе резонансов в σ_L . Для сравнения на рис. 3 представлены результаты расчетов по моделям [15], Janssen B [16], K-MAID [9]. Ни одна из этих моделей не воспроизводит сечения $d\sigma_T/d\Omega$ в широкой области углов для конечных $K\Lambda$ - и $K\Sigma$ -состояний.

Как мы видели на рис. 2, построенная нами модель достаточно хорошо воспроизводит близкий к линейному характер уменьшения дифференциального сечения $d\sigma_T/d\Omega(Q^2)$ с ростом Q^2 для процессов $p(e, e'K^+)\Sigma^0$, $p(e, e'K^0)\Sigma^+$. Именно наличие продольных электромагнитных вкладов в борновской части амплитуды электророждения позволяет описать эксперимент [11]. При этом сечение $d\sigma_L/d\Omega(Q^2)$ для процесса $p(e, e'K^0)\Sigma^+$ оказывается той же величины, что и для реакции $p(e, e'K^+)\Sigma^0$, а сечение $d\sigma_T/d\Omega(Q^2)$ для $p(e, e'K^0)\Sigma^+$ заметно отличается от сечения реакции $p(e, e'K^+)\Sigma^0$ только в области $Q^2 < 0.5 \ \Gamma \Rightarrow B^2$, что связано с заметной ролью $S_{31}(1900)$ в данной области.

Описание электророждения каонов с использованием формулы (3) выполнено для нескольких се-



Рис. 5. (В цвете онлайн) Дифференциальное сечение $d\sigma/d\Omega_{CM}^K(Q^2)$ в зависимости от $\cos(\theta_{CM}^K)$ для процессов $p(e,e'K^+)\Lambda$ и $p(e,e'K^+)\Sigma^0$ в различных кинематиках. Эксперимент: [7]. Черные сплошные кривые — данная работа, пунктирные — модель K-MAID [9], зеленые штриховые — модель BS3 [5]

рий значений степени поляризации ε , полученной в опыте [11]. При этом расчеты проводились для средних значений $\varepsilon = 0.439, 0.662, 0.78$, полученных в серии опытов [11] при различных Q^2 . Результаты расчетов сечения $d\sigma/d\Omega_{CM}^K(Q^2)$ в кинематике W == 1.84 ГэВ, $\theta_{CM}^K = 0$ представлены на рис. 4*a*. Из рисунка видно, что ближе к эксперименту лежит наш расчет с $\varepsilon = 0.662$. Отметим также, что наши расчеты предсказывают наличие минимума в сечении $d\sigma/d\Omega_{CM}^K(Q^2)$ в области $Q^2 \approx 0.15$ ГэВ², отсут-



Рис. 6. Отношение (Ratio) продольно (*a*) и поперечно (*б*) поляризованных сечений электророждения каонов в процессах $p(e, e'K^+)\Lambda$ и $p(e, e'K^+)\Sigma^0$ при W = 1.84 ГэВ и $\theta_{CM}^K = 0$. Эксперимент: [11]

ствующего в предсказаниях модели BS3 [5]. Указанный минимум связан с более сильным уменьшением сечения $d\sigma_T/d\Omega(Q^2)$ с ростом Q^2 в области $Q^2 < d\sigma_T$ $< 0.25 \ \Gamma$ эB². На рис. 46 показаны результаты расчетов сечения $d\sigma/d\Omega^K_{CM}(E^{lab}_{\gamma})$ в зависимости от энергии фотонов в лабораторной системе в кинематике $\theta_{CM}^{K} = 6^{\circ}$ для процессов $p(e, e'K^{+})\Lambda, \ p(e, e'K^{+})\Sigma^{0}$ и $p(e, e'K^0)\Sigma^+$. Особенность этого сечения заключается в том, что имеющимся экспериментальным точкам в данной кинематике [17] и [18] соответствует большой разброс в значениях Q². Из сравнения предсказаний развиваемой модели с этими данными для нескольких значений Q^2 видно, что характерный рост сечения, связанный с t-канальными вкладами в σ_L , согласуется с данными [17] и [18] при $Q^2 = 0.04 \ \Gamma$ э B^2 . При этом положение расчетных данных относительно точки $Q^2 = 0$ практически не меняется, как и должно быть при главенствующей роли поперечно поляризованной компоненты сечения в фоторождении. Интересно отметить, что имеющиеся в литературе модельные расчеты, в том числе в работе [5], при $\theta^K_{CM} = 6^\circ$ не обладают характерным ростом $d\sigma/d\Omega^K_{CM}(E^{lab}_\gamma)$ сечения с увеличением энергии (см. зеленую штриховую кривую на рис. 46) и недооценивают экспериментальные точки [17] и [18] при $Q^2 \approx 2.2 \ \Gamma$ эВ 2 . Модель K-MAID [9] плохо согласуется с данными [10] и неверно передает поведение сечения $d\sigma/d\Omega_{CM}^{K}(E_{\gamma}^{lab})$ с ростом энергии.

После того как было установлено хорошее согласие предсказаний данной модели с полученными в опытах поперечно и продольно поляризованными сечениями $d\sigma/d\Omega^K_{CM}(Q^2)$ в области малых углов разлета частиц, на следующем этапе сравнивались угловые распределения частиц процессов $p(e, e'K^+)\Lambda$ и $p(e, e'K^+)\Sigma^0$ при различных значениях полной энергии W и переданного импульса Q^2 . На рис. 5 даны угловые распределения сечения $d\sigma/d\Omega_{CM}^{K}(Q^2)$ при двух значениях полной энергии W = 1.75, 1.84 и двух значениях переданного импульса $Q^2 = 0.05, 0.036$ соответственно. Как видим из рисунка, предсказания модели очень хорошо согласуются со средними значениями экспериментальных данных и тем более укладываются в достаточно большие относительные ошибки этих данных. По этой же причине следует считать согласие с данными приемлемым и для предсказаний моделей K-MAID [9] и BS3 [5].

Дополнительной проверкой предсказаний модели является воспроизведение не только отдельных компонент сечения электророждения $\sigma_L(Q^2)$ и $\sigma_T(Q^2)$, но и отношения этих компонент друг к другу. На рис. 6 показаны результаты расчетов отношений продольно и поперечно поляризованных сечений процессов $p(e, e'K^+)\Lambda$ и $p(e, e'K^+)\Sigma^0$. Нам не удалось найти в имеющейся литературе других расчетов указанных отношений сечений электророждения каонов в процессах $p(e, e'K^+)\Lambda$ и $p(e, e'K^+)\Sigma^0$. Из рисунка видно, что наши расчеты очень хорошо согласуются с имеющимися данными и показывают характерный рост сечения в области малых Q^2 . Данные отношения показывают нетривиальное раз-



Рис. 7. (В цвете онлайн) Дифференциальные сечения $d\sigma/d\Omega$ фоторождения каонов в процессах $p(\gamma, K^+)\Lambda$ (верхний ряд), $p(\gamma, K^+)\Sigma^0$ (средний ряд) и $p(\gamma, K^0)\Sigma^+$ (нижний ряд) как функция $\cos(\theta_{CM}^K)$ при трех различных полных энергиях системы для каждого процесса. Экспериментальные данные: [19–24]. Черные сплошные кривые — данная работа, пунктирные — модель K-MAID [9], зеленые штриховые — модель BS3 [5]

личие в динамиках электророждения Λ - и Σ -гиперонов, сечения образования которых в области малых Q^2 , $Q^2 < 0.25 \ \Gamma$ эB², сами по себе достаточно малы.

Проведенные расчеты показали, что построенная модель хорошо воспроизводит не только сечения электророждения каонов в процессах $p(e, e'K^+)\Lambda$, $p(e, e'K^+)\Sigma^0$ и $p(e, e'K^0)\Sigma^+$ в зависимости от Q^2 , но и имеющиеся угловые распределения процессов при различных значениях полной энергии системы W. Кроме того, модель правильно передает рост сечения электророждения $p(e, e'K^+)\Lambda$ при малых углах разлета частиц в системе центра масс, что позволяет рекомендовать данный подход к исследованию электророждения каонов на легких гиперядрах. Наконец, построенная модель очень хорошо воспроизводит отношение продольно и поперечно поляризованных компонент сечений электророждения каонов в процессах $p(e, e'K^+)\Lambda$, $p(e, e'K^+)\Sigma^0$, что позволяет использовать модель для изучения более тонких явлений, таких как конверсия гиперонов и многочастичное гиперон-нуклон-гиперонное взаимодействие в ядрах.

Изменения, представленные в данной работе, по сравнению с более ранними расчетами [4] также не искажают предсказания модели при $Q^2 = 0$. На рис. 7 приведены угловые распределения процессов $p(\gamma, K^+)\Lambda$, $p(\gamma, K^+)\Sigma^0$ и $p(\gamma, K^0)\Sigma^+$ при трех различных значениях полной энергии системы. Качество воспроизведения экспериментальных данных, несмотря на проведенные изменения модели, практически не изменилось. Как и в более ранней работе [4], имеется расхождение в предсказании дифференциального сечения $d\sigma/d\Omega$ для процесса $p(\gamma, K^+)\Sigma^0$ при W = 1.87 ГэВ. Из проведенных расчетов также следует указание на большую роль отдельных резонансных вкладов в дифференциальные сечения



Рис. 8. (В цвете онлайн) Полные сечения процессов фоторождения $p(\gamma, K^+)\Lambda$, $p(\gamma, K^+)\Sigma^0$ и $p(\gamma, K^0)\Sigma^+$. Экспериментальные данные: [22–25]. Черные сплошные кривые — данная работа, зеленая штриховая кривая — модель BS3 [5], фиолетовые штрихпунктирные кривые — модель SL [26]

фоторождения. В частности, в процессе $p(\gamma, K^+)\Sigma^0$ большую роль играет не только величина констант связей резонанса $P_{33}(1920)$, но и их знак. В данной модели не уделялось пристального внимания связи полученных в расчетах значений адронных констант с допустимыми в Particle Data Group диапазонами адронных ширин распада резонансов. Более корректный расчет резонансных вкладов с учетом связывания различных каналов между собой позволил бы в дальнейшем строго ограничить диапазон возможных значений и знак адронных констант связей.

Сравнение получаемых в данной модели и в моделях K-MAID [9], SL [26], BS3 [5] полных сечений фоторождения каонов в процессах $p(\gamma, K^+)\Lambda, p(\gamma, K^+)\Sigma^0$ и $p(\gamma, K^0)\Sigma^+$ представлено на рис. 8. Введение нового «недостающего» резонанса $F_{37}(2200)$ позволило лучше описать полное сечение $p(\gamma, K^+)\Sigma^0$ в области $E_{\gamma}^{lab} > 1.9$ ГэВ. Как видим, согласие результатов расчетов по развиваемой модели с экспериментальными данными не хуже, чем в работах [4,5].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе представлена расширенная в область $Q^2 > 0$ для каналов электророждения $K^+\Lambda^0$, $K^+\Sigma^0$ и $K^0\Sigma^+$ модель работы [4]. На каждом этапе расчетов используются калибровочно-инвариантные выражения для амплитуд, а общая унитарность матрицы рассеяния частично восстанавливается с помощью введения импульсной зависимости в адронных ширинах распада. Отличительной особенностью модели является специальным образом подобранная функциональная зависимость формфакторов подавления сечения в области $Q^2 > 0$. По сравнению с более ранней моделью [5] *s*-, *t*-, *u*-борновские слагаемые амплитуды электророждения сильнее подавлены формфакторами подавления, а полученные сравнительно малые вклады продольно поляри-

зованных резонансных компонент амплитуды электророждения избавляют весь подход от необходимости подбора такого рода плохо контролируемых параметров. Предложенная модель единым образом и одинаково хорошо описывает сечения фото- и электророждения каонов в трех зарядовых каналах на протоне, что выгодно отличает ее от более ранних моделей. Несмотря на некоторые отличия предсказаний данной модели от экспериментальных данных, в частности, в области больших углов разлета $K^+\Lambda$ -частиц, представленный подход может быть в дальнейшем легко обобщен на каналы электророждения каонов на нейтроне и в целом на легких ядрах.

В данной работе адронные резонансы в *s*- и *u*-каналах для поперечно поляризованных сечений, а также параметры обрезания в соответствующих факторах подавления находились в рамках развитого ранее в работе [13] формализма расчета сечений когерентных реакций $\gamma \to \pi^0 \pi^0$ и $\gamma \to \pi^0 \eta$. По этой причине данную работу можно рассматривать как продолжение систематического исследования реакций фото- и электророждения мезонов на протоне в резонансной области.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-02-00004).

ЛИТЕРАТУРА

- E. Klempt and J. M. Richard, Rev. Mod. Phys. 82, 1095 (2010).
- L. Syukurilla and R. Mart, Int. J. Mod. Phys. E 24, 1550008 (2015).
- D. Skoupil and P. Bydžovský, Phys. Rev. C 93, 025204 (2016).
- 4. M. V. Egorov, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 47, 125006 (2020).
- D. Skoupil and P. Bydžovský, Phys. Rev. C 97, 025202 (2018).
- A. Fix and H. Arenhövel, Eur. Phys. J. C 25, 115 (2005).

- ЖЭТФ, том **160**, вып. 1 (7), 2021
- 7. P. Achenbach et al., Eur. Phys. J. A 48, 14 (2012).
- T. Vrancx, L. De Cruz, J. Ryckebuschm, and P. Vancraeyveld, Phys. Rev. C 84, 045201 (2011).
- T. Mart, C. Bennhold, H. Haberzettl, and L. Tiator, http://www.kph.uni-mainz.de/MAID/kaon/ kaonmaid.html.
- A. Bleckmann, S. Herda, U. Opara, and W. Schulz, Z. Physik 239, 1 (1970).
- 11. M. Mohring et al., Phys. Rev. C 67, 055205 (2003).
- 12. M. Coman et al., Phys. Rev. C 81, 052201(R) (2010).
- 13. M. Egorov, Phys. Rev. C 101, 065205 (2020).
- 14. P. Ambrozewicz et al., Phys. Rev. C 75, 045203 (2007).
- M. Guidal, J. M. Laget, and M. Vanderhaeghen, Phys. Rev. C 61, 025204 (2000).
- 16. S. Janssen, R. Ryckebusch, and T. Van Cauteren, Phys. Rev. C 67, 052201(R) (2003).
- 17. C. N. Brown et al., Phys. Rev. Lett. 28, 1086 (1972).
- 18. P. Markowitz and A. Acha, Int. J. Mod. Phys. E 19, 2383 (2010).
- 19. M. E. McCracken et al., Phys. Rev. C 81, 025201 (2010).
- 20. B. Dey et al., Phys. Rev. C 82, 025202 (2010).
- **21**. H. Schmieden et al., Few Body Syst. **59**, 135 (2018).
- 22. P. Aguar-Bartolomé et al., Phys. Rev. C 88, 044601 (2013).
- 23. C. S. Akondi et al., Eur. Phys. J. A 55, 202 (2019).
- 24. R. Lawall et al., Eur. Phys. J. A 24, 275 (2005).
- 25. R. Castelijins et al., Eur. Phys. J. A 35, 39 (2008).
- 26. J. C. David, C. Fayard, G. H. Lamot, and B. Saghai, Phys. Rev. C 53, 2613 (1996).
- 27. K. Glander et al. (SAPHIR Collaboration), Eur. Phys. J. A 19, 251 (2004), DOI:10.1140/epja/i2003-10119-x).
- M. Tran et al. (SAPHIR Collaboration), Phys. Lett. 445, 20 (1998), DOI:10.1016/S0370-2693(98)01393-8.

ДЕФОРМАЦИЯ МЕЖАТОМНЫХ СВЯЗЕЙ В ВЕРХНИХ СЛОЯХ ПОВЕРХНОСТИ Ge(111) СО СТРУКТУРАМИ $c(2 \times 8), 7 \times 7$ И 5×5

А. Е. Долбак, Р. А. Жачук*

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отеделения Российской академии наук 630090, Новосибирск, Россия

> Поступила в редакцию 25 ноября 2020 г., после переработки 18 января 2021 г. Принята к публикации 18 января 2021 г.

С помощью расчетов *ab initio* исследована деформация межатомных связей в верхних атомных слоях поверхности Ge(111) со структурами $c(2 \times 8)$, 7×7 и 5×5 . Расчеты выполнены в рамках теории функционала плотности как для релаксированной, так и для упруго-сжатой поверхности Ge(111). Было показано, что вплоть до 4-процентного сжатия решетки в верхнем слое поверхности Ge(111) со структурами 7×7 и 5×5 наблюдается деформация растяжения связей. При этом деформация связей на поверхности со структурой 5×5 больше, чем на поверхности со структурой 7×7 , что вызвано в среднем большей деформацией димеров в структуре 5×5 . Результаты работы позволяют корректно интерпретировать экспериментальные данные, получаемые в процессе формирования смачивающего слоя при росте Ge/Si(111).

DOI: 10.31857/S0044451021070063

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние два десятка лет было проведено множество исследований, касающихся свойств системы Ge/Si, и активные исследования в этой области до сих пор продолжаются [1–4]. Интерес к этой системе вызван тем, что технология создания устройств на основе Ge/Si совместима с уже имеющейся технологией для Si. В то же время использование Ge дает ряд преимуществ, так как подвижность носителей заряда в Ge больше, чем в Si [5]. Кроме того, было продемонстрировано, что наноструктуры Ge/Si с квантовыми точками являются перспективными для применения в оптоэлектронике [6]. Таким образом, понимание атомных процессов, происходящих в этой системе, является важным.

Из-за того что постоянная решетки Ge примерно на 4% больше, чем Si, система Ge/Si является напряженной и используется в качестве модельной системы для изучения роста по механизму Странского – Крастанова. При росте по этому механизму после формирования первых нескольких эпитаксиальных слоев (так называемого смачивающего слоя, CC) происходит рост трехмерных островков на CC. Так, на поверхности Si(111) при росте Ge в квазиравновесных условиях CC состоит из трех атомных слоев [7]. Каждый атомный слой (111) решетки типа алмаза состоит из двух монослоев, поэтому такой слой называют также бислоем (рис. 1*a*). Отдельные слои соединены между собой вертикальными связями в направлении [111]. Нужно заметить, что в стадии формирования CC дислокации несоответствия не формируются, так как толщина пленки является докритической и, следовательно, протекание пластической релаксации напряжений энергетически не выгодно.

Формирование СС Ge/Si(111) подробно описано в литературе [8]. Оно состоит из трех последовательных стадий: а) зарождение островков Ge толщиной 3 бислоя (высотой около 1 нм) на чистой поверхности Si(111)-7 \times 7; б) латеральный рост островков Ge без изменения их толщины; в) смыкание краев соседних островков с образованием сплошного СС. Экспериментально установлено, что латеральный рост островков Ge/Si(111) при формировании СС сопровождается изменением структуры (111)-террас на поверхности островков Ge. В ста-

^{*} E-mail: zhachuk@gmail.com



Рис. 1. (В цвете онлайн) *a*) DAS-модель структуры 7 × 7, вид сбоку (в направлении [$\overline{1}10$]). На рисунках *б*-*г* показаны связи, исследуемые в этой работе. *б*) Адатомы в ячейке 7 × 7 и относящиеся к ним связи. *в*) Атомы 1-го слоя (неполный бислой и димеры) и относящиеся к ним связи. Связи, относящиеся к димерам, выделены черным. *г*) Атомы 2-го и 3-го слоев и относящиеся к ним связи

дии а) поверхность островков имеет структуру 7 × 7, характерную для чистых ненапряженных поверхностей Si(111), в стадии б) на поверхности островков наблюдаются структуры 7 × 7 и 5 × 5, а в стадии в) поверхность сформированного CC имеет структуру 5 × 5.

Поверхностные структуры 7×7 и 5×5 описываются атомной DAS-моделью (dimer adatom stacking fault), которая охватывает целое семейство структур, определяемых как $(2n+1) \times (2n+1)$, где n == 1, 2, 3,... [9, 10]. В DAS-модели в углах ячеек имеются вакансии (угловые вакансии, УВ) в первом атомном слое (рис. 1*a*). В недавно опубликованных работах [11,12] утверждается, что изменение структуры поверхности островков Ge от 7×7 к 5×5 при формировании СС Ge/Si(111) приводит к частичной релаксации напряжений сжатия, имеющих место в СС. Эта интересная идея вызвана кажущейся аналогией между дислокациями несоответствия, приводящими к релаксации напряжений в толстых пленках Ge/Si [13] и УВ в структурах 7×7 и 5×5 . Идея работ [11,12] состоит в следующем: поскольку размер ячейки 5×5 меньше, чем ячейки 7×7 , число УВ на единицу площади больше. Следовательно, поверхность Ge со структурой 5 × 5 должна быть менее напряженной, чем поверхность $Ge(111)-7 \times 7$

из-за большего количества пустот в первом атомном слое, куда при сжатии могут смещаться атомы поверхности. Нужно заметить, однако, что прямых экспериментальных доказательств того, что поверхность островков Ge(111)-5 × 5 является более релаксированной, чем Ge(111)-7 × 7, нет. Таким образом, выводы работ [11, 12] основаны исключительно на оценках, сделанных на основе теории упругости.

Хорошо известно, что тензор напряжений поверхности зависит от особенностей связей атомов на ней, в частности, от топологии этих связей [14]. Следовательно, релаксация напряжений на поверхности и в тонкой пленке зависит от особенностей химических связей атомов Ge в структурах 7×7 и 5×5 , которые никак не учитываются при расчете в рамках теории упругости с использованием констант, полученных для объемных материалов. В частности, геометрия связей атомов в DAS-структурах сильно отличается от имеющейся в объеме кристаллов с решеткой типа алмаза [9]. Это наблюдение ставит под сомнение достоверность выводов, сделанных в работах [11, 12].

Кроме того, в работе [8] нами были рассчитаны зависимости энергий поверхностей Si(111) и Ge(111) от деформации поверхности (см. рис. 2 работы [8]). На основе полученных данных было показано, что тензор напряжений для недеформированных поверхностей со структурой 5×5 выше, чем для поверхностей со структурой 7×7 (см. табл. 1 работы [8]). Используя данные, приведенные на рис. 2 работы [8], можно показать, что это справедливо также и для поверхности Ge(111), двухосно сжатой на 4 % в плоскости. Таким образом, результаты работы [8] свидетельствуют об отсутствии релаксации поверхности Ge(111) при изменении структуры от 7×7 к 5×5 .

В данной работе с помощью расчетов на основе теории функционала плотности (density functional theory, DFT) и с использованием атомных моделей структур $c(2 \times 8), 7 \times 7$ и 5 × 5 подробно исследована деформация межатомных связей в приповерхностных слоях Ge(111) в зависимости от степени сжатия кристаллической решетки. Заметим, что деформация межатомных связей на поверхности по отношению к равновесным связям в объеме кристалла является основным фактором, определяющим напряженность поверхности. Хотя исследование на основе анализа деформации связей является скорее качественным, оно позволяет выяснить, почему поверхность с одной структурой является более напряженной, чем с другой, а также определить, какие элементы реконструкции поверхности влияют на релаксацию поверхности при ее деформации.

2. ДЕТАЛИ РАСЧЕТОВ

Расчеты на основе DFT были выполнены с помощью программного пакета Siesta [15] в приближении локальной электронной плотности (local density approximation, LDA) для обменно-корреляционного взаимодействия между электронами [16] и с использованием псевдопотенциалов [17]. Нами были использованы псевдопотенциалы из базы данных программного пакета ABINIT [18], так как ранее было продемонстрировано, что результаты расчетов, выполненных с их использованием, хорошо согласуются как с экспериментальными данными, так и с данными, полученными с помощью других программных пакетов [8, 19, 20]. Для поверхности Ge(111)- $c(2 \times 8)$ были проведены также тестовые расчеты с использованием корреляционнообменного функционала в приближении обобщенного градиента (generalized gradient approximation, GGA) [21], о чем кратко упоминается в тексте. Состояния валентных электронов были представлены в виде линейной комбинации атомных орбиталей [15]. Для ускорения расчетов использовались различные наборы базисных функций для атомов Ge верхних и нижних слоев. Так, для трех верхних слоев атомов Ge использовали по два набора *s*- и *p*-орбиталей плюс один набор *d*-орбиталей (13 функций на атом), а для трех нижних слоев атомов Ge один набор *s*-орбиталей и один набор *p*-орбиталей (4 функции на атом). Для атомов H использовали один набор *s*-орбиталей (1 функция на атом).

Ранее было установлено, что структуры $c(2 \times 8)$, 7×7 и 5×5 соответствуют различным степеням сжатия решетки Ge(111) [8], поэтому для полноты исследования мы провели расчеты для всех трех структур. Для расчетов использовали плиты (slabs), состоящие из 6 слоев Ge(111), как в работе [8]. На верхней поверхности задавали структуры $c(2 \times 8)$, 7×7 и 5×5 , а нижняя поверхность с оборванными связями была пассивирована атомами Н. Структуры $c(2 \times 8)$, 7×7 и 5×5 строили в соответствии с их атомными моделями: простой адатомной моделью для структуры $c(2 \times 8)$ [22] и DAS-моделью для структур 7×7 и 5×5 [9, 10]. Вакуумный промежуток составлял 30 Å. Интегрирование по зоне Бриллюэна проводилось с использованием плотных решеток из k-точек, заданных по схеме Монкхорста – Пака [23]: $8 \times 2 \times 1$ для структуры $c(2 \times 8)$ (была использована прямоугольная расчетная ячейка, в 2 раза бо́льшая по площади элементарной ячейки $c(2 \times 8)), 4 \times 4 \times 1$ для структуры 5×5 и $3 \times 3 \times 1$ для структуры 7×7 . Упруго-напряженные слои Ge(111), имеющие место при формировании СС Ge/Si(111), моделировали путем двухосной (biaxial) деформации ε_b плит в диапазоне $-4, \ldots, 0\%$ (сжатие) в плоскости (111). Использование плит толщиной 6 слоев является корректной моделью для исследования деформаций межатомных связей в СС Ge/Si(111) толщиной 3 слоя, так как результаты показывают, что деформации связей, обусловленные влиянием поверхности, в основном локализованы в первых двух поверхностных слоях. Координаты атомов верхних пяти слоев Ge оптимизировали до тех пор, пока действующие на них силы не становились меньше 0.01 эВ/А, после чего считалось, что поверхность достигла равновесия. Расчетное значение постоянной решетки Ge составляло 5.650 Å при использовании LDA и 5.777 Å при использовании GGA (экспериментальное значение 5.660 Å).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

При сжатии решетки Ge в плоскости (111) происходит увеличение межплоскостного расстояния

Структура	Площадь ячейки, Å ²		Число связей на ячейку сверхструктуры				
поверхности	$\varepsilon_b{=}0\%$	$\varepsilon_b = -4\%$	к адатомам	к димерам	в 1-м	всего	
Ge(III)					бислое		
$c(2 \times 8)$	110.5	101.8	6	0	24	30	
7×7	676.8	623.8	36	45	90	171	
5×5	345.3	318.3	18	30	36	84	

Таблица. Количество различных связей в верхнем (реконструированном) слое поверхности Ge(111) с различными структурами и площади ячеек этих структур

между отдельными слоями [8] с соответствующим удлинением связей Ge–Ge. В настоящей работе мы исследовали изменение межатомных связей в отдельных слоях при сжатии решетки Ge и при этом не следили за связями между слоями Ge, так как эти связи в меньшей степени влияют на релаксацию напряжений, вызванных интерфейсом Ge/Si(111). Влияние углов между связями на степень напряженности поверхности также не рассматривалось.

На рис. 1*а* показана DAS-модель структуры 7×7 поверхности (111) [9]. На рис. 16-*г* изображены отдельные слои структуры 7×7 . Рисунки 16-*г* иллюстрируют межатомные связи, которые учитывались в нашем анализе. Межатомные связи на поверхностях со структурами 5×5 и $c(2 \times 8)$ рассматривались аналогичным образом. В таблице приведены данные о количестве различных связей в верхнем (реконструированном) слое поверхности Ge(111) с различными рассматриваемыми структурами.

Нами были рассчитаны средние деформации длин межатомных связей

$$\overline{\delta} = \frac{100\,\%}{N} \sum_{i} \frac{l_i - l_0}{l_0}$$

где l_0 — равновесная длина связей Ge–Ge в объеме кристалла при $\varepsilon_b = 0$ %, а N — число исследуемых связей. На рис. 2 приведены зависимости $\overline{\delta}(\varepsilon_b)$ для верхних слоев поверхностей Ge(111) с различной структурой, рассчитанные с использованием LDA для корреляционно-обменного функционала. Были проведены также тестовые расчеты с использованием GGA [21] для поверхности Ge(111) со структурой $c(2 \times 8)$. Расчеты показали, что

$$|\overline{\delta}_{LDA} - \overline{\delta}_{GGA}| < 0.1 \%$$

Из данных, представленных на рис. 2 можно сделать следующие выводы.



Рис. 2. Зависимости средней деформации длин межатомных связей $(\overline{\delta})$ в верхних слоях поверхностей Ge(111) с различной структурой от двухосной деформации (ε_b) решетки Ge в плоскости (111)

1. Связи в верхнем (реконструированном) слое при $\varepsilon_b = 0\%$ имеют сильную деформацию растяжения ($\overline{\delta} > 0\%$) для всех структур на поверхности Ge(111).

2. Наиболее деформированные связи в верхнем слое имеют место для структуры 5×5 , а наименее деформированные — для структуры $c(2 \times 8)$.

3. Деформации связей, вызванные влиянием поверхности, очень быстро затухают в глубь кристалла. Деформация связей во втором и третьем бислоях при $\varepsilon_b = 0$ % уже близка к нулю. Таким образом, поверхности с разной структурой различаются деформацией связей лишь в верхнем слое.

4. При сжатии решетки кристалла в плоскости (111) атомные связи во втором и третьем слоях ожидаемо укорачиваются. При этом растянутые связи в верхнем слое релаксируют, приближаясь к равновесной длине. Тем не менее связи в верхнем слое остаются растянутыми даже при $\varepsilon_b = -4\%$.

Плотность межатомных связей (n) в верхнем слое поверхности Ge(111)-7 × 7 составляет $n \approx$ $\approx 0.25 \text{ Å}^{-2}$ при $\varepsilon_b = 0\%$ и $n \approx 0.27 \text{ Å}^{-2}$ при $\varepsilon_b =$ = -4%, а в структуре 5 × 5 несколько меньше: $n \approx$ $\approx 0.24 \text{ Å}^{-2}$ при $\varepsilon_b = 0\%$ и $n \approx 0.26 \text{ Å}^{-2}$ при $\varepsilon_b =$ = -4% (см. таблицу). Это вызвано тем, что размер ячейки 5 × 5 меньше, чем ячейки 7 × 7 и, следовательно, плотность УВ на поверхности Ge(111)-5 × 5 больше. Выше мы сравнили средние значения деформаций $\overline{\delta}$ по верхнему слою поверхности Ge(111) и нашли, что $\overline{\delta}_{5\times5} > \overline{\delta}_{7\times7}$. Это неравенство сохраняется также при учете разного количества связей на поверхностях со структурами 7 × 7 и 5 × 5, а именно: $n_{5\times5}\overline{\delta}_{5\times5} > n_{7\times7}\overline{\delta}_{7\times7}$.

Сильно растянутые связи в верхнем атомном слое поверхности и почти недеформированные связи в нижележащих слоях при $\varepsilon_b = 0\%$ свидетельствуют о наличии значительного напряжения растяжения ($\sigma > 0$) поверхности. Ранее наличие напряжения растяжения на реконструированных поверхностях Ge(111) было установлено путем расчета зависимостей энергий γ этих поверхностей от двухосной деформации решетки Ge в плоскости (111) [8]. Было также показано, что наличие напряжений растяжения характерно для реконструированных поверхностей Si(111) [8,24], что ожидаемо из-за близких химических свойств Ge и Si. Поскольку поверхности со структурой 5 × 5 имеют бо́льшую деформацию связей, чем поверхности со структурой 7 × 7, они должны быть сильнее напряжены, т.е. $\sigma_{5\times 5} > \sigma_{7\times 7}$. И действительно, расчет тензоров напряжений это подтверждает [8,24].

На рис. 3 приведены зависимости $\overline{\delta}(\varepsilon_b)$ для отдельных групп связей верхнего атомного слоя поверхности Ge(111) с различной структурой (1-го бислоя, адатомов и димеров), рассчитанные с использованием LDA для корреляционно-обменного функционала. Эти данные дают детальное представление о том, как распределены деформации связей в реконструированном слое. Из данных, представленных на рис. 3, можно сделать следующие выводы.

1. Наиболее деформированные связи обусловлены адатомами на поверхности Ge(111), следом идут связи в димерах, а затем связи в 1-м бислое.

2. Связи в 1-м бислое поверхности Ge(111) со структурой $c(2 \times 8)$ заметно менее деформированы, чем эти связи на поверхностях со структурами 7×7 и 5×5 . Это объясняется отсутствием димеров в со-



Рис. 3. (В цвете онлайн) Зависимости средней деформации длин межатомных связей ($\overline{\delta}$) в верхнем атомном слое поверхностей Ge(111) с различной структурой от двухосной деформации (ε_b) решетки Ge в плоскости (111)

ставе структуры $c(2 \times 8)$, вызывающих дополнительное растяжение связей в 1-м бислое поверхностей со структурами 7×7 и 5×5 .

3. Связи в димерах в структуре 5×5 в среднем сильнее деформированы, чем в структуре 7×7 . Это вызвано тем, что связи в димерах, расположенных посередине между УВ структуры 7×7 (рис. 1*e*), менее деформированы, чем связи в димерах, расположенных вблизи УВ. Следует отметить, что в структуре 5×5 все димеры расположены вблизи УВ.

4. Изменения деформаций связей 1-го бислоя и адатомов при изменении двухосной деформации решетки Ge(111) тесно связаны. Так, быстрое изменение деформаций связей, ведущих к адатомам в структуре $c(2 \times 8)$, соответствует быстрому изменению деформаций связей в 1-м бислое этой структуры. Аналогично, медленное изменение деформаций связей, ведущих к адатомам в структурах 7×7 и 5×5 , соответствует медленному изменению деформаций связей в 1-х бислоях этих структур. Следовательно, изменение деформации решетки Ge(111) в случае структур 7×7 и 5×5 отражается в основном на деформации связей в димерах.

Исходя из изложенного выше, можно утверждать, что более высокая деформация связей верхнего слоя поверхности Ge(111)-5 × 5 по сравнению с этими связями в структуре 7 × 7 (см. рис. 2) вызвана большей деформацией связей в димерах в структуре 5 × 5. Динамика изменения деформаций связей в верхних слоях структур 7×7 и 5×5 при изменении двухосной деформации решетки (см. рис. 2) связана в основном с релаксацией связей в димерах при сжатии решетки Ge в плоскости (111).

В работе [25] было проведено исследование спектра комбинационного рассеяния света на оптических фононах широких трехслойных островков Ge(111)-7 × 7, образующихся на начальной стадии формирования СС Ge/Si(111). На основе анализа сдвига частот фононов был сделан вывод, что деформация островков значительно меньше ожидаемых 4%. В работе была высказана гипотеза, что это вызвано реконструкцией 7 × 7-поверхности островков германия. Результаты, полученные в нашей работе, подтверждают это предположение: растянутые связи первого слоя поверхности Ge(111)-7 × 7 при деформации $\varepsilon_b = -4\%$ существенно релаксируют, что должно приводить к меньшему сдвигу частот.

4. ВЫВОДЫ

С помощью расчетов на основе DFT исследована деформация межатомных связей в верхних атомных слоях поверхности Ge(111) со структурами $c(2 \times 8)$, 7×7 и 5×5 . Получена детальная информация о распределении деформаций связей в ячейках структур на поверхности и в более глубоких слоях. Найдено, что релаксация связей в реконструированных слоях поверхности Ge(111) со структурами 7×7 и 5×5 при сжатии решетки происходит существенно иначе, нежели это описано в работах [11,12], а именно:

1. Атомные связи в верхнем слое поверхности Ge(111) со структурами 7×7 и 5×5 являются растянутыми при всех рассмотренных деформациях решетки ($\varepsilon_b = -4, \ldots, 0$ %), а не сжатыми, как это можно было бы ожидать для Ge/Si(111).

2. Угловые вакансии в структурах 7×7 и 5×5 не имеют прямого отношения к релаксации поверхности Ge(111) при сжатии решетки. Релаксация при сжатии решетки происходит в основном посредством уменьшения деформации растянутых связей в димерах, расположенных по периметрам половинок ячеек 7×7 и 5×5 .

3. Атомные связи на поверхности Ge(111) со структурой 5×5 являются в среднем более деформированными, чем со структурой 7×7 . Поскольку при этом тензор напряжений для поверхности со структурой 5×5 больше, чем для поверхности со структурой 7×7 , релаксации напряжений при

изменении структуры Ge(111) от 7 \times 7 к 5 \times 5 не происходит.

Благодарности. Авторы выражают благодарности А. Б. Талочкину и Д. И. Рогило за плодотворное обсуждение задачи и информационно-вычислительному центру НГУ за предоставление доступа к вычислительным ресурсам кластера.

ЛИТЕРАТУРА

- A. A. Shklyaev and A. V. Latyshev, Appl. Surf. Sci. 465, 10 (2019).
- A. A. Shklyaev and A. V. Latyshev, Sci. Rep. 10, 13759 (2020).
- Ch. Ishii and Y. Shigeta, Thin Solid Films 709, 138007 (2020).
- 4. S. A. Teys, Appl. Surf. Sci. 392, 1017 (2017).
- 5. R. Pillarisetty, Nature 479, 324 (2011).
- O. P. Pchelyakov, A. V. Dvurechensky, A. V. Latyshev et al., Semicond. Sci. Technol. 26, 014027 (2011).
- S. Teys, A. Talochkin, and B. Olshanetsky, J. Cryst. Growth **311**, 3898 (2009).
- R. Zhachuk, S. Teys, and J. Coutinho, J. Chem. Phys. 138, 224702 (2013).
- K. Takayanagi, Y. Tanishiro, and M. Takahashi, Surf. Sci. 164, 367 (1985).
- 10. G.-X. Qian and D. J. Chadi, J. Vac. Sci. Tech. B 4, 1079 (1986).
- Е. М. Труханов, С. А. Тийс, Письма в ЖТФ 45, 28 (2019).
- С. А. Тийс, Е. М. Труханов, А. В. Колесников, Изв. РАН, сер. Физическая 84, 1331 (2020).
- Ю. Б. Болховитянов, О. П. Пчеляков, С. И. Чикичев, УФН 171, 689 (2001).
- R. D. Meade and D. Vanderbilt, Phys. Rev. Lett. 63, 1404 (1989).
- 15. J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale et al., J. Phys.: Condens. Matter 14, 2745 (2002).
- 16. J. P. Perdew and A. Zunger, Phys. Rev. B 23, 5048 (1981).

- N. Troullier and J. L. Martins, Phys. Rev. B 43, 1993 (1991).
- https://departments.icmab.es/leem/SIESTA MATERIAL/Databases/Pseudopotentials/periodictable-intro.html.
- R. A. Zhachuk and A. A. Shklyaev, Appl. Surf. Sci. 494, 46 (2019).
- 20. R. A. Zhachuk and J. Coutinho, Appl. Surf. Sci. 533, 147507 (2020).

- J. P. Perdew, A. Ruzsinszky, G. I. Csonka et al., Phys. Rev. Lett. 100, 136406 (2008).
- 22. R. S. Becker, B. S. Swartzentruber, J. S. Vickers et al., Phys. Rev. B 39, 1633 (1989).
- 23. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, Phys. Rev. B 13, 5188 (1976).
- 24. D. Vanderbilt, Phys. Rev. Lett. 59, 1456 (1987).
- **25**. А. Б. Талочкин, С. А. Тийс, Письма в ЖЭТФ **75**, 314 (2002).

ЛОКАЛЬНАЯ СТРУКТУРА И СВЕРХТОНКИЕ МАГНИТНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЗОНДОВЫХ ЯДЕР 57 Fe в ХРОМИТЕ ${ m TlCr_{0.95}}{}^{57}$ Fe_ ${0.05}$ O₃

А. В. Соболев^{а*}, В. И^{b**}, А. А. Белик^b, Я. С. Глазкова^a, И. А. Пресняков^a

^а Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова 199991, Москва, Россия

^b International Place Type Center for Materials Nanoarchitectonics (WPI-MANA), National Institute for Materials Science (NIMS), Namiki 1-1, Tsukuba, CityIbaraki 305-0044, Japan

> Поступила в редакцию 3 декабря 2020 г., после переработки 12 декабря 2020 г. Принята к публикации 12 декабря 2020 г.

Представлены результаты мессбауэровских измерений на ядрах зондовых атомов $^{57}{\rm Fe}$ в структуре перовскитоподобного хромита $TlCr_{0.95}{}^{57}{\rm Fe}_{0.05}O_3$, синтезированного при высоком давлении. Анализируются причины наблюдаемых различий параметров электрических и магнитных сверхтонких взаимодействий ядер $^{57}{\rm Fe}$ в хромите $TlCrO_3$ и изоструктурных ему хромитах редкоземельных металлов. Рассмотрены различные по знаку вклады в обменные взаимодействия Fe-O-Cr и Cr-O-Cr в ферритах-хромитах со структурой типа перовскита. Проведены измерения магнитных и термодинамических свойств исследуемого хромита в сравнении с данными для нелегированного железом образца $TlCrO_3$.

DOI: 10.31857/S0044451021070075

1. ВВЕДЕНИЕ

Неослабевающий интерес к перовскитоподобным оксидам AMO₃ переходных металлов (М) обусловлен большим разнообразием их магнитных и электрических характеристик, параметры которых можно варьировать в широком диапазоне, изменяя, например, состав подрешетки «крупных» катионов A^{m+} (m = 2 — щелочноземельные металлы; m == 3 - P39, Bi...) (рис. 1*a*). Традиционно подобное влияние связывается со стерическими эффектами, т. е. влиянием ионного радиуса катиона A^{m+} на геометрические параметры связей М-О-М, определяющих силу и знак косвенных магнитных взаимодействий Mⁿ⁺, а также степень делокализации *d*-электронов (ширину образованной ими зоны) в подрешетке переходного металла [1]. Одним из экспериментальных проявлений подобного влияния может быть изменение параметров сверхтонких взаимодействий мессбауэровских нуклидов [2]. Ранее подобно-

62

го рода исследования проводились для серии ортоферритов RFeO₃ (R = P3Э, Y), для которых величина сверхтонкого магнитного поля H_{hf} на ядрах ⁵⁷Fe монотонно меняется с изменением ионного радиуса R³⁺ [3, 4]. Согласно результатам теоретических исследований [4], наблюдаемая угловая зависимость $H_{hf} \propto \cos^2 \vartheta$ связана с увеличением степени перекрывания 3d(Fe)- и 2p(O)-орбиталей в связях Fe–O–Fe при увеличении угла $\vartheta \rightarrow 180^\circ$, обусловленном ростом радиусов катионов R³⁺ в решетке RFeO₃ (рис. 16).

Интересно, что аналогичные угловые зависимости сверхтонких полей H_{hf} наблюдались также на ядрах зондовых атомов ¹¹⁹Sn и ⁵⁷Fe, введенных соответственно в матрицы RFeO₃ [5] и RCrO₃ [6] (R = P3Э). Таким образом, зондовые атомы могут служить своеобразными индикаторами того, в какой степени структурные факторы влияют на микроскопические параметры перовскитоподобных оксидных фаз, не содержащих в своем составе в качестве основных компонентов мессбауэровские нуклиды. Поскольку процесс индуцирования H_{hf} по своей физической природе близок к меха-

^{*} E-mail: alex@radio.chem.msu.ru

^{**} Wei Yi



Рис. 1. *a*) Идеализированный фрагмент кристаллической структуры перовскитоподобных оксидов AMO₃, изображенный в различных проекциях (показан разворот полиздров MO₆ с учетом орторомбического искажения); *б*) угол (*θ*) связей M–O–M, определяющих силу сверхобменных взаимодействий между магнитными катионами M^{m+}

низму обменных взаимодействий в магнитных системах, особый интерес представляет изучение поведения примесных катионов $Fe^{3+}(d^5)$ в ортохромитах RCrO₃, содержащих катионы $Cr^{3+}(d^3)$, для которых в кристаллическом поле октаэдрической симметрии t_{2g}-орбитали ровно наполовину заполнены, а e_q-орбитали — пустые. Согласно феноменологическим правилам Канамори – Гуденафа – Андерсона (КГА) [1], знак обменных взаимодействий $\mathrm{Fe}^{3+}(d^5)$ -O-Cr $^{3+}(d^3)$ зависит от значения угла ϑ [4]. При величинах угла $\vartheta < \vartheta_{cr} \approx 145^{\circ}$ [4] наиболее значимым становится перекрывание наполовину заполненных t_{2q} -орбиталей катионов Fe^{3+} и Cr³⁺, что приводит к антиферромагнитному взаимодействию их магнитных моментов μ_i (рис. 2*a*). При более высоких значениях $\vartheta > \vartheta_{cr}$ определяющим становится перекрывание наполовину заполненных $e_{q(Fe)}$ - и пустых $e_{q(Cr)}$ -орбиталей, что, согласно правилам КГА, приводит к ферромагнитному взаимодействию магнитных моментов $\mu_{\rm Fe}$ и $\mu_{\rm Cr}$ (рис. 26). Это обстоятельство может оказаться полезным при поиске новых ферромагнитных диэлектриков с высокими температурами магнитного упорядочения. Однако до сих пор предсказанная теорией возможность ферромагнитного упорядочения замещенных хромитов $\mathrm{RCr}_{1-x}\mathrm{Fe}_x\mathrm{O}_3$ не нашла своего экспериментального подтверждения.



Рис. 2. Схема, иллюстрирующая различные вклады в сверхобменное взаимодействие Fe^{3+} -O- Cr^{3+} : a — антиферромагнитный вклад — π -перекрывание t_{2g} -орбиталей катионов Fe^{3+} и Cr^{3+} (показаны наполовину заполненные d_{xy} - и $d_{x'y'}$ -орбитали); δ — ферромагнитный вклад — σ -перекрывание e_g -орбиталей (показаны наполовину заполненные $d_{x^2y^2}$ (Fe)-орбитали и пустые $d_{x'^2y'^2}$ (Cr)-орбитали). Стрелками изображен виртуальный перенос электронов при учете эффектов ковалентности (в правой части рисунка пока-

зано π - и σ -перекрывание d-орбиталей)

Существенному продвижению в понимании характера влияния структуры и состава перовскитоподобных фаз на их функциональные свойства способствовало развитие новых синтетических методов с применением высокого давления. Использование этих методов позволило получить целый ряд новых оксидных фаз, всестороннее исследование которых показало, что характер влияния катионов А^{*m*+} оказывается более сложным, чем обусловленный лишь изменением углов ϑ цепочек М-О-М. В частности, речь может идти об индуктивном влиянии параметров химических связей А-О на параметры конкурирующих с ними связей М–О [7]. Примером таких соединений являются ферриты BiFeO₃ [8], TlFeO₃ [9], ScFeO₃ [10], необычные физические свойства которых тесным образом связаны со спецификой электронной структуры и кристаллохимической природой катионов $A = Bi^{3+}$, Tl^{3+} и Sc^{3+} .

Недавно при использовании высокого давления мы синтезировали и детально охарактеризовали новый ортохромит TlCrO₃ [11]. Было показано, что некоторые магнитные свойства этого перовскитоподобного оксида отличаются от его аналогов, образованных редкоземельными металлами. Предполагается, что, как и в случае ортоферритов RFeO₃, наблюдаемые отличия связаны с проявлением индуктивных эффектов за счет образования сильных ковалентных связей Tl–O [11]. Целью настоящей работы является выяснение, в какой степени подобное индукционное влияние проявляется в мессбауэровских спектрах зондовых атомов ⁵⁷Fe, введенных в небольших количествах (около 5 ат. %) в структуру TlCrO₃. На основании полученных результатов проанализированы различные вклады в магнитные сверхобменные взаимодействия Cr(Fe)–O–Cr(Fe) в легированных ортохромитах.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Для приготовления легированного зондовыми атомами ⁵⁷Fe образца TlCr_{0.95}⁵⁷Fe_{0.05}O₃ под высоким давлением использовалась установка "belt" [11]. Стехиометрическая смесь оксидов Cr₂O₃ (99.9%), Tl₂O₃ (99.99%) и ⁵⁷Fe₂O₃ (обогащенного до 95.5% ⁵⁷Fe) отжигалась в золотой капсуле при температуре 1500 К и давлении 6 ГПа в течение двух часов. Рентгенофазовый анализ конечных продуктов показал наличие единственной фазы хромита.

Мессбауэровские спектры на ядрах 57 Fe измерялись на спектрометре MS-1104Em, работающем в режиме постоянных ускорений. Для обработки и анализа мессбауэровских данных использовались методы модельной расшифровки спектров, которые реализованы в программе SpectrRelax [12]. Изомерные сдвиги всех мессбауэровских спектров ядер 57 Fe приведены относительно α -Fe при комнатной температуре.

Измерения магнитной восприимчивости осуществлялись на магнитометре типа SQUID Quantum Design MPMS 7T в интервале температур от 2 K до 400 K в поле 70 кЭ в режимах ZFC (охлаждение образца в отсутствие внешнего магнитного поля и измерение при нагреве), FCC (последующее измерение образца при охлаждении) и FCW (последующее измерение образца при нагреве). Зависимость теплоемкости от температуры измерялась на приборе Quantum Design PPMS при охлаждении в нулевом магнитном поле и в поле 70 (или 90) кЭ.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ Структурные, магнитные и термодинамические измерения

Как уже было отмечено, рентгенофазовый анализ подтвердил однофазность конечных продуктов. Индицирование рентгенограммы в пространственной группе Pnma позволило определить параметры орторомбической ячейки допированного хромита: a = 5.4009(1) Å, b = 7.6461(2) Å и с = 5.2991(1) Å, которые оказались очень близкими к соответствующим параметрам для недопированного оксида TlCrO₃ [11]. Низкотемпературные рентгеновские измерения не выявили каких-либо особенностей в температурной зависимости параметров элементарной ячейки или же структурных фазовых переходов при низких температурах.

На рис. За показаны температурные зависимости магнитной восприимчивости (χ) и ее обратной величины (χ^{-1}) для недопированного образца TlCrO₃ и хромита TlCr_{0.95}⁵⁷Fe_{0.05}O₃. Диапазоны изменения и характерные особенности профилей зависимостей $\chi^{-1}(T)$ и $\chi(T)$ очень близки к соответствующим зависимостям для недопированного хромита TlCrO₃. Описание экспериментальных зависимостей $\chi^{-1}(T)$, измеренных в поле 70 кЭ, в интервале температур 300–400 К в рамках закона Кюри – Вейсса

$$\chi^{-1}(T) = 3k_B(T - \Theta)/\mu_{eff}^2 N_{A}$$

позволило определить величины эффективного момента $\mu_{eff} = 4.009(9) \ \mu_B$ и константы Вейсса $\Theta =$ = -220(3) К для TlCr_{0.95}⁵⁷Fe_{0.05}O₃, которые также оказались близки к TlCrO₃ [11] и к теоретической величине

$$\mu_{theor} = 2\sqrt{(1-x) S_{Cr} (S_{Cr} + 1) + x S_{Fe} (S_{Fe} + 1)} \mu_B = 4.000 \mu_B.$$

Максимум на температурной зависимости теплоемкости $C_p(T)$ исследуемого образца (рис. 36) соответствует температуре Нееля $T_N = 89(1)$ К, которая практически совпала с $T_N \sim 89$ К для нелегированного хромита [11]. Таким образом, представленные данные свидетельствуют о том, что используемое количество зондовых атомов ⁵⁷Fe не влияет на макроскопические магнитные характеристики TlCrO₃.

3.2. Мессбауэровские данные

Мессбауэровские спектры $\text{TlCr}_{0.98}^{57}\text{Fe}_{0.02}\text{O}_3$, измеренные в парамагнитной области $T > T_N$ (рис. 4*a*), представляют собой квадрупольный дублет, параметры которого ($\delta_{300 \text{ K}} = 0.34(1) \text{ мм/c}$ и $\Delta_{300 \text{ K}} = 0.46(1) \text{ мм/c}$) соответствуют высокоспиновым катионам Fe^{3+} ($S_{\text{Fe}} = 5/2$) в октаэдрическом кислородном окружении [3]. Ширина линий дублета



Рис. 3. *а*) Температурные зависимости обратной магнитной восприимчивости $\chi^{-1}(T)$ и $\chi(T)$ (вставка) для хромитов $\mathrm{TlCr}_{1-x}^{57}\mathrm{Fe}_x\mathrm{O}_3$ (x = 0, 0.05), измеренные в магнитном поле 70 кЭ. *б*) Зависимость удельной теплоемкости $\mathrm{TlCr}_{1-x}^{57}\mathrm{Fe}_x\mathrm{O}_3$ (x = 0, 0.05) в нулевом магнитном поле (пустые символы) и в магнитном поле 70 или 90 кЭ (заполненные символы)

($\Gamma=0.31(1)~{\rm мм/c}$) практически полностью совпадает с соответствующим значением для эталонного поглотителя $\alpha{\rm -Fe_2O_3}$, что указывает на эквивалентность кристаллографических позиций, занимаемых зондовыми катионами Fe³⁺ в структуре TlCrO₃.

Наблюдаемое квадрупольное расщепление Δ свидетельствует о присутствии на ядрах 57 Fe отличного от нуля градиента электрического поля



Рис. 4. Мессбауэровские спектры ядер 57 Fe в хромите ${
m TlCr}_{0.95}{}^{57}$ Fe $_{0.05}$ O₃, измеренные в разных областях температур: a — парамагнитной $(T > T_N); \delta$ — магнитоупорядоченной $(T \ll T_N)$

(ГЭП), связанного с искажением кристаллического окружения позиций в подрешетке переходного металла. Проведенные в рамках ионного приближения расчеты показали, что для согласования экспериментальной величины $\Delta_{300 \text{ K}}$ с кристаллической структурой хромита необходимо учитывать не только монопольные (\mathbf{V}^m), но и дипольные (\mathbf{V}^d) вклады в тензор ГЭП [14]. Величина \mathbf{V}^d связана со статическим дипольным моментом (\mathbf{p}_0) анионов кислорода, индуцируемым внутренними электрическими полями: $\mathbf{p}_{O} = \alpha_{O} \mathbf{E}$, где α_{O} — поляризуемость анионов кислорода. Согласно нашим расчетам, величина изотропной составляющей поляризуемости равна $\alpha_{O} = 1.1 \text{ Å}^{3}$, что согласуется с результатами аналогичных расчетов для других оксидных систем [15].

Важно отметить, что, согласно ранее проведенным исследованиям ортоферритов RFeO₃ [3] и допированных 57 Fe хромитов RCrO₃ [16], наблюдаемые в мессбауэровских спектрах небольшие величины расщеплений Δ свидетельствуют о присутствии лишь монопольного вклада V^m в тензор ГЭП, связанного с симметрией кристаллической решетки этих оксидов. Напротив, как было показано нами ранее [9,16], в случае соединений TlFeO₃ и BiMO₃ (M = Fe, Cr) необходимо также учитывать ощутимые дипольные вклады \mathbf{V}^d . Таким образом, согласно результатам для TlCr_{0.95}Fe_{0.05}O₃, а также более ранним исследованиям перовскитов, содержащих катионы $Tl^{3+}:6s^04f^{14}5d^{10}$ и $Bi^{3+}:6s^24f^{14}5d^{10}$, электрические сверхтонкие взаимодействия ядер ⁵⁷Fe оказываются очень «чувствительными» к особенностям электронного строения и параметрам химических связей «крупных» катионов, имеющих высокие координационные числа. В случае катионов Tl³⁺ подобное влияние может быть связано с высокой степенью ковалентности направленных связей Tl-O, что при использовании «ионного приближения» равносильно отклонению распределения электронной плотности на анионах кислорода от сферической симметрии (индуцирование диполя **р**_О). Кристаллохимическим проявлением подобных ковалентных взаимодействий Tl-O является существенное искажение анионных полиэдров (TlO_{12}) [9,11].

В мессбауэровских спектрах ядер ⁵⁷Fe, измеренных в магнитоупорядоченной области при T = 11 К ($\ll T_N$), появляется магнитная сверхтонкая структура, которая может быть представлена в виде суперпозиции двух зеемановских секстетов Fe(1) и Fe(2) (рис. 46) с различающимися относительными вкладами ($I_1 > I_2$). Оба зеемановских секстета были проанализированы в рамках полного гамильтониана $H_{\mu Q}$ комбинированных электрических и магнитных сверхтонких взаимодействий, который в системе координат главных осей тензора ГЭП может быть представлен в следующем виде [17]:

$$\hat{H}_{\mu Q} = \frac{eQV_{ZZ}}{4I(2I-1)} \left[3\hat{I}_{Z}^{2} - \hat{I}^{2} + \eta(\hat{I}_{X}^{2} - \hat{I}_{Y}^{2}) \right] - g\mu_{N}H_{hf} \left[(\hat{I}_{X}\cos\phi + \hat{I}_{Y}\sin\phi)\sin\theta + \hat{I}_{Z}\cos\theta \right], \quad (1)$$



Рис. 5. *a*) Взаимная ориентация главных осей ГЭП для анионного полиздра «реперного» катиона ${}^{57}\mathrm{Fe}^{3+}$ и сверхтонкого поля H_{hf} в структуре хромита $\mathrm{TlCr}_{0.95}{}^{57}\mathrm{Fe}_{0.05}\mathrm{O}_3$. *б*) Схема расположения магнитных моментов в структуре хромита $\mathrm{TlCr}_{0.95}{}^{57}\mathrm{Fe}_{0.05}\mathrm{O}_3$, полученная в результате анализа мессбауэровских спектров ${}^{57}\mathrm{Fe}$ (указаны только атомы переходного металла)

где \hat{I} и $\hat{I}_{X,Y,Z}$ — операторы ядерного спина и его проекций на главные оси; θ , φ — полярные углы сверхтонкого магнитного поля H_{hf} в координатах ГЭП; $\eta = (V_{YY} - V_{XX})/V_{ZZ}$ — параметр асимметрии ГЭП $|V_{ZZ}| > |V_{YY}|, |V_{XX}|, g$ — ядерный жеефактор; μ_N — ядерный магнетон Бора. Собственные значения гамильтониана $\hat{H}_{\mu Q}$ зависят от совокупности сверхтонких (δ , H_{hf} , eQV_{ZZ} , η) и угловых (θ , φ) параметров, различные комбинации которых могут приводить к одному и тому же профилю магнитной сверхтонкой структуры спектра [18–21]. Поэтому в общем случае анализ спектров поликристаллических образцов не позволяет однозначно определить взаимную ориентацию магнитных моментов мессбауэровских атомов.

Для того чтобы избежать отмеченных выше трудностей, при решении гамильтониана \hat{H}_{Q} мы воспользовались результатами расчета параметров тензора ГЭП кристаллической структуры незамещенного хромита TlCrO₃ [16]. С целью уменьшения числа независимых переменных в гамильтониане (1) в соответствии с теоретическими расчетами параметров ГЭП фиксировались значения константы квадрупольного взаимодействия eQV_{ZZ} = = -0.88 мм/с и параметра асимметрии $\eta = 0.68$. В результате обработки спектра были получены значения полярных углов $\theta \approx \varphi \approx 90(1)^{\circ}$, указывающие на совпадение направления поля \mathbf{H}_{hf} с направлением главной оси V_{YY} тензора ГЭП (рис. 5*a*). В то же время, согласно нашим расчетам, направление V_{YY} практически перпендикулярно плоскости ac $(V_{YY} \wedge a = 83$ °; $V_{YY} \wedge c = 78$ °) и отклоняется от направления оси *b* лишь примерно на 14°

(рис. 5а). Учитывая, что для высокоспиновых катионов Fe^{3+} направление поля \mathbf{H}_{hf} коллинеарно с направлением магнитных моментов $\mu_{\rm Fe} = -\gamma \mathbf{H}_{hf}$ $(\gamma \approx 0.01 \, \mu_B / \text{k}\Theta)$, магнитные моменты зондовых катионов ${\rm Fe}^{3+}$ также располагаются в основном вдоль оси b. Если же предположить, что магнитные моменты µ_{Fe} образуют с окружающими их катионами Cr³⁺ коллинеарную структуру, то из приведенных мессбауэровских результатов следует, что в $TlCr_{0.95}$ ⁵⁷Fe_{0.05}O₃ формируется антиферромагнитная структура, относящаяся к представлению Γ_2 $(F_x, C_y, G_z; G \gg A, C)$ [22, 23] (рис. 56). Следует подчеркнуть, что задача на собственные значения гамильтониана (1) при фиксированных значениях eQV_{ZZ} и η имеет две эквивалентные пары решений (θ, φ) и $(\theta \pm \pi, \varphi \pm \pi)$, т.е. предложенная на основании анализа мессбауэровских спектров магнитная структура подразумевает антиферромагнитное расположение магнитных моментов катионов хрома, что фактически и соответствует симметрии Г₂. Отметим, что в случае ортохромитов РЗЭ RCrO₃ [24] выше температуры упорядочения магнитных моментов μ_R редкоземельных металлов \mathbb{R}^{3+} часто реализуется так называемая скошенная антиферромагнитная структура, из-за конкуренции антиферромагнитного упорядочения ближайших друг к другу катионов хрома в цепочках Cr-O-Cr и более удаленных соседей в цепочках Cr-O-O-Cr [25]. Ранее было показано [26], что, в отличие от хромитов редкоземельных металлов RCrO₃, для незамещенного хромита $TlCrO_3$ реализуется антиферромагнитная структура типа С, в которой ближайшие магнитные моменты ионов хрома в плоскости (*ac*) расположены антиферромагнитно, а вдоль длинной оси орторомбической ячейки $b- {\rm ферромагнитно}.$ Теоретические расчеты, проведенные для этого соединения [26], показали более предпочтительное основное состояние C в сравнении с G, тем самым подтверждая экспериментальные данные. Достаточно близкие экспериментальные значения точек Нееля и констант Вейсса образцов TlCr_{0.95}⁵⁷Fe_{0.05}O₃ и TlCrO₃ позволяет предположить, что введение такого количества железа в структуру хромита не меняет его магнитную структуру. Учитывая эквивалентные пары решений задачи на собственные значения гамильтониана (1), можно утверждать лишь, что на основании мессбауэровских спектров на ядрах ⁵⁷Fe в TlCr_{0.95}⁵⁷Fe_{0.05}O₃ отдать предпочтение одной из антиферромагнитно упорядоченных структур (G или C) невозможно.

Удовлетворительная обработка спектра при условии равенства изомерных сдвигов $\delta=0.49(1)~{\rm MM/c}$ секстетов Fe(1) и Fe(2) по-



Рис. 6. Схематичное изображение наиболее вероятных конфигураций (в предположении биномиального распределения) в локальном магнитном окружении «реперного» катиона ${}^{57}\mathrm{Fe}^{3+}$ в структуре хромита $\mathrm{TlCr}_{0.95}{}^{57}\mathrm{Fe}_{0.05}\mathrm{O}_3$ (под схемами указаны значения вероятностей (p) соответствующих конфигураций). В нижней части рисунка обозначены сверхобменные связи, которым соответствуют обменные интегралы J_{FeCr} и J_{FeCr}

прежнему свидетельствует об эквивалентности кристаллографических позиций всех катионов железа в структуре исследуемого хромита. В то же время, существенное различие сверхтонких магнитных полей двух секстетов $H_{hf1} = 497(1)$ кЭ и $H_{hf2} = 455(2)$ к Э (при T = 11 K) указывает на различное магнитное окружение зондовых катионов. Наиболее интенсивный секстет Fe(1) $(I_1 \approx 80\%)$ можно соотнести с катионами Fe³⁺, в ближайшем окружении которых находятся все шесть катионов Cr³⁺, взаимодействующих с Fe³⁺ посредством сверхобменных связей Fe–O–Cr (рис. 6). Для более детального исследования характера этих взаимодействий спектры были измерены во всей магнитоупорядоченной области температур (рис. 7). Температурная зависимость $H_{hf1}(T)$ была описана в рамках теории молекулярного поля [27]:

$$\frac{\mathrm{H}_{hf1}(T)}{\mathrm{H}_{hf1}(0)} = \mathrm{B}_{5/2} \left(2\mathrm{S}_{\mathrm{Fe}} \frac{\mathrm{6}\mathrm{J}_{\mathrm{Fe}\mathrm{Cr}} \mathrm{S}_{\mathrm{Cr}} \bar{\sigma}_{\mathrm{Cr}}(T)}{\mathrm{k}_B T} \right), \qquad (2\mathrm{a})$$



$$\bar{\sigma}_{\rm Cr}(T) = \mathcal{B}_{3/2} \left(\frac{3\mathcal{S}_{\rm Cr}}{(\mathcal{S}_{\rm Cr}+1)} \, \frac{\bar{\sigma}_{\rm Cr}(T)}{T/T_N} \right), \qquad (2b)$$

где $B_S(...)$ — функция Бриллюэна, $S_{\rm Fe} = 5/2$ и $S_{\rm Cr} = 3/2$ спины катионов ${\rm Fe}^{3+}$ и ${\rm Cr}^{3+}$, $\bar{\sigma}_{\rm Cr}(T)$ — приведенная намагниченность подрешетки хрома; $J_{\rm FeCr}$ — обменный интеграл, отвечающий за магнитные взаимодействия в цепочках Fe–O–Cr; T_N — температура Нееля исследуемого образца; k_B — константа Больцмана.

На рис. 8 представлены результаты теоретического описания с помощью выражений (1) экспериментальной зависимости $H_{hf1}(T)$. Было оценено значение температуры Нееля $T_N = 89.5(2)$ K, которое находится в хорошем согласии с данными термодинамических измерений (рис. 36). Следует отметить, что полученное двумя независимыми методами значение T_N для $\text{TlCr}_{0.95}^{57}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_3$ оказывается существенно меньше, чем соответствующие значения для хромитов редкоземельных элементов (рис. 9*a*). Аналогичное уменьшение T_N для перовскитоподобных оксидов таллия наблюдалось нами ранее для ряда ортоферритов $RFeO_3$ (рис. 9*a*) [9]. Из теоретического описания $H_{hf1}(T)$ была проведена оценка значения обменного интеграла $J_{\rm FeCr} = -3.75(3)$ K, который также оказался заметно ниже, чем $J_{\rm FeCr} \approx -6.4$ К для хромита DyCr_{0.99}⁵⁷Fe_{0.01}O₃ [4], имеющего близкое к TlCrO₃ среднее значение угла $\langle\vartheta\rangle\approx 136.7^\circ$ обменных связей Fe–O–Cr. Все описанные выше результаты вполне однозначно указывают на индуктивное влияние катионов Tl³⁺ на силу сверхобменных взаимодействий Cr-O-Cr (понижение T_N) и Fe-O-Cr (понижение J_{FeCr}). Отметим, что в перовскитоподобной структуре TlMO₃ катионы Tl³⁺ образуют прочные ковалентные σ -связи с $2p_{x,y}$ -орбиталями кислорода, которые, в свою очередь, участвуют в образовании π связей с t_{2q} -орбиталями катиона переходного металла М, находящегося в октаэдрическом кислородном окружении (рис. 10*a*). В случае ионов $\operatorname{Cr}^{3+}(t_{2q}{}^{3}e_{q}{}^{0})$ подобные взаимодействия осуществляются в основном за счет наполовину заполненных t_{2a} -орбиталей, поэтому образование более прочных σ -связей Tl–O будет в существенной степени ослаблять конкурирующие с ними *π*-связи Cr–O, понижая тем самым значение температуры $T_N \propto J_{\rm CrCr}$ [11]. Аналогичное ослабляющее индукционное влияние в цепочках Tl-O-Cr(Fe) должно проявляться и в обменных вза-

Рис. 7. Температурная эволюция мессбауэровских спектров ядер $^{57}{\rm Fe}$ в хромите ${\rm TlCr}_{0.95}{}^{57}{\rm Fe}_{0.05}{\rm O}_3$ при $T < T_N$



Рис. 8. Температурные зависимости сверхтонких магнитных полей H_{hfi} на ядрах ⁵⁷Fe. Зеленая пунктирная линия соответствует теоретической зависимости поля $H_{hf2}(T)$ для локальной конфигурации {5 Cr^{3+} ;1Fe³⁺} в случае разных знаков обменных интегралов J_{FeFe} , J_{CrCr} и J_{FeCr}

имодействиях Fe–O–Cr с участием примесных катионов железа.

Косвенное влияние химической природы катионов Tl³⁺ на обменные взаимодействия в структуре $TlCr_{0.95}^{57}Fe_{0.05}O_3$ отражается также на величине поля насыщения $H_{hf1}(0)$, т.е. сверхтонкого магнитного поля на ядрах ⁵⁷Fe в области очень низких температур ($T \ll T_N$). Полученное путем экстраполяции при $T \rightarrow 0$ К теоретической зависимости $H_{hf1}(T)$ (рис. 9б) значение $H_{hf1}(0) = 497(1)$ кЭ оказывается заметно меньше, чем ранее полученные значения $H_{hf}(0) \approx 510-520$ кЭ для легированных ⁵⁷Fe хромитов $\mathrm{RCr}_{0.99}$ ⁵⁷Fe_{0.01}O₃ (R = La, Lu, Y) [4]. Следует также заметить, что аналогичное уменьшение величины $H_{hf}(0)$ наблюдалось для собственной фазы TlFeO₃ по сравнению с ортоферритами редкоземельных элементов [9] (рис. 96). Ранее было показано, что величина поля $H_{hf}(0)$ может быть представлена как функция угла (ϑ) сверхобменных связей Fe-O-Cr [4]:

$$H_{hf}(0) = H_F + \{H_\sigma \cos^2\vartheta + H_\pi \sin^2\vartheta\}, \qquad (3)$$

где H_F — вклад контактного взаимодействия Ферми, H_{σ} и H_{π} — вклады в сверхтонкое поле, связанные с σ - и π -перекрыванием 3*d*-орбиталей катионов $\operatorname{Cr}^{3+}(d^3)$ при образовании связей Cr–O. Согласно теоретическим расчетам [4], различие знаков вкла-



Рис. 9. Сравнение зависимостей температур Нееля T_N (a); сверхтонких магнитных полей «насыщения» $H_{hf}(0)$ (δ) на ядрах ⁵⁷ Fe для ферритов AFeO₃ и замещенных хромитов ACr_{1-x}⁵⁷ Fe_xO₃ (A = P3Э, Y, Sc, In, Tl). Также на рис. a представлены дополнительные шкалы для обменных интегралов $J_{\text{FeFe}} = T_{N(\text{AFeO}_3)}k_B/4S(S+1)$ и $J_{\text{CrCr}} = T_{N(\text{ACrO}_3)}k_B/4S(S+1)$

дов $H_{\sigma} < 0$ и $H_{\pi} > 0$ (за положительное направление \mathbf{H}_{hf} принято направление спина катиона железа $\mathbf{S}_{\rm Fe}$) связано с различными механизмами спинового переноса в цепочках Fe–O–Cr с участием пустых e_g -орбиталей и наполовину заполненных t_{2g} орбиталей. Как показано на рис. 10 δ , перенос спиновой плотности с участием наполовину заполненных t_{2g} -орбиталей (например, d_{xy}) приводит к спиновому переносу в 4s-орбиталь или поляризации nsорбиталей Fe³⁺ того же знака, что и направление



Рис. 10. а) Схематическое изображение перекрывания орбиталей $t_{2g}(\text{Fe},\text{Cr})-2p_z(\text{O})-6s(\text{Tl})$ в хромите $\text{TlCr}_{0.95}\text{Fe}_{0.05}\text{O}_3$. б) Иллюстрация индуцирования различных вкладов в сверхтонкое поле \mathbf{H}_{hf} на ядра ⁵⁷Fe от соседних катионов Cr^{3+} (положительное направление совпадает с направлением спина \mathbf{S}_{Fe}): положительный вклад H_{π} связан с π -перекрыванием t_{2g} -орбиталей катионов Fe^{3+} и Cr^{3+} ; отрицательный вклад H_{σ} связан с σ -перекрыванием e_g -орбиталей. Как и в случае сверхобменных взаимодействий $\text{Cr}^{3+}(\uparrow)-\text{O}-\text{Fe}^{3+}(\downarrow)$, стрелками изображен виртуальный перенос электронов при учете эффектов ковалентности (в правой части рисунка показано π - и σ -перекрывание d-орбиталей)

спинов (\mathbf{S}_{Cr}) соседних катионов Cr^{3+} , т.е. $H_{\sigma} > 0$. Участие же пустых e_q -орбиталей (например, $d_{x^2-y^2}$) будет вызывать те же эффекты спинового переноса в 4*s*-орбитали и поляризации *ns*-орбиталей Fe³⁺, но уже в третьем порядке теории возмущений, а также индуцированию отрицательного вклада H_{σ} (рис. 106). Важно, что эффективность обоих механизмов спинового переноса зависит от степени ковалентности связей Cr–O и Fe–O [4]. Как мы уже отмечали, индуктивное влияние конкурирующих взаимодействий $\mathrm{Tl}^{3+}(6s^0) \leftarrow \mathrm{O}^{2-}(2p_{x,y})$ в большей степени затрагивает максимально эффективные с точки зрения спинового переноса с участием катионов ${\rm Cr}^{3+}$ *π*-связи Cr–O $(H_{\pi} \gg H_{\sigma})$, что, возможно, является основной причиной заметного уменьшения $H_{hf}(0)$ для TlCr_{0.95}⁵⁷Fe_{0.05}O₃.

Второй зеемановский секстет Fe(2) (рис. 46) может быть отнесен к зондовым катионам Fe³⁺, в окружении которых один из шести катионов Cr³⁺ замещен на железо (рис. 5). Вклад этого секстета в общий спектр $I_2 \approx 20\%$ согласуется с величиной $P_6(1) \approx 23\%$, полученной в предположении биномиального (случайного) распределения катионов Fe³⁺ в структуре замещенного хромита состава TlCr_{1-x}Fe_xO₃:

$$P_n(k) = \frac{n!}{k!(n-k)!} x^k (1-x)^{n-k}, \qquad (4)$$

где *n* — число магнитных соседей в первой координационной сфере (в нашем случае, n = 6), k $(\leq n)$ — число катионов Fe³⁺ в ближайшем катионном окружении реперного нуклида ⁵⁷Fe, x - coдержание железа (для исследуемого нами состава x = 0.05). Интересно отметить, что, несмотря на появление в окружении реперного нуклида ⁵⁷Fe одного катиона $\mathrm{Fe}^{3+}(S_{\mathrm{Fe}} = 5/2)$ с более высоким, чем $Cr^{3+}(S_{Cr} = 3/2)$ магнитным моментом, сверхтонкое магнитное поле $H_{hf2}(0)$ уменьшается примерно на 42 к \ni по сравнению с $H_{hf1}(0)$ (рис. 8). Возможная причина этого результата может быть связана с наведенной магнитокристаллической анизотропией двух антиферромагнитно взаимодействующих примесных центров $Fe(\uparrow)-O-Fe(\downarrow)$. В результате этого направление магнитных моментов катионов μ_{Fe} может существенно отклониться от намагниченности подрешетки хрома, вызывая уменьшение положительного вклада H_{STHF} от пяти кати
онов ${\rm Cr}^{3+}$ в наблюдаемую величину H_{hf2}. Для проверки этого предположения в дальнейшем планируются мессбауэровские измерения на образцах хромитов с различным содержанием железа.

Температурная зависимость $H_{hf2}(T)$ заметно отличается от $H_{hf1}(T)$ для случая, когда в ближайшем окружении зондовых катионов железа находятся только катионы Cr^{3+} (рис. 6). Экспериментальные значения $H_{hf2}(T)$ были описаны в рамках локального молекулярного поля:

$$\frac{H_{hf2}(T)}{H_{hf2}(0)} = \sigma_{\text{Fe2}}(T) = \\
= B_{5/2} \left(2S_{\text{Fe}} \frac{5J_{\text{FeCr}}S_{\text{Cr}}\bar{\sigma}_{\text{Cr}}(T)}{k_B T} + 2S_{\text{Fe}} \frac{J_{\text{FeFe}}S_{\text{Fe}}\sigma_{\text{Fe2}}(T)}{k_B T} \right). \quad (5)$$

Для уменьшения числа входящих в приведенное уравнение варьируемых параметров ($J_{\rm FeCr}$ и $J_{\rm FeFe}$) с высокой степенью корреляции, мы воспользова-

лись значением интеграла $J_{\rm FeCr} = -3.75$ K, определенным из температурной зависимости $H_{hf1}(T)$ (рис. 8). В результате такой процедуры было оценено значение обменного интеграла $J_{\text{FeFe}} = -10.5(3) \text{ K}$ для связанных друг с другом в цепочке Fe-O-Fe зондовых катионов железа. Интересно, что, несмотря на близость углов обменных связей М-О-М (где ${
m M}$ = Cr, Fe) в TlCr_{0.95}{}^{57}{
m Fe}_{0.05}{
m O}_3 и TlFeO₃ ($\langle \vartheta
angle$ = = 140-144°), полученное для легированного хромита значение интеграла J_{FeFe} оказывается меньше, чем $J_{\rm FeFe} \approx -16$ K для TlFeO₃ [28]. Возможно, что в силу угловой зависимости $J_{\rm FeFe} \propto \cos^2 \vartheta$ [2] даже незначительное изменение угла ϑ обменных связей Fe-O-Fe может существенно сказаться на величине соответствующего обменного интеграла. Кроме того, нельзя исключить возможность ослабления обменных взаимодействий за счет эффектов фрустрации, т.е. конкуренции разных по знаку и сопоставимых по величине обменных взаимодействий между катионами Cr³⁺ и Fe³⁺ с разными электронными конфигурациями. Несомненно, эти вопросы требуют дальнейшей более детальной проработки.

В заключении отметим, что совместное описание экспериментальных зависимостей $H_{hf1}(T)$ и $H_{hf2}(T)$ с помощью выражений (1) и (4) показало, что обменные интегралы J_{FeFe} и J_{FeCr} имеют одинаковые знаки (альтернативное описание в предположении разных знаков $J_{\rm FeFe}$ и $J_{\rm FeCr}$ показано на рис. 8 штриховой линией). Учитывая, что для всего диапазона углов ϑ в связях Fe–O–Fe интеграл $J_{\rm FeFe}$ имеет отрицательное значение $(E_{ex(i)} = J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j),$ это означает, что взаимодействия Fe³⁺-O-Cr³⁺ имеют антиферромагнитный характер для исследуемой системы. Данный вывод согласуется с результатами мессбауэровских измерений хромитов RCr_{0.99}⁵⁷Fe_{0.01}O₃ (R = La, Lu, Y и Dy [4]). Таким образом, как и в случае других ранее исследованных хромитов, основной вклад в магнитные обменные взаимодействия между катионами Fe³⁺ и Cr³⁺ дает π-связывание с участием наполовину заполненных t_{2a}-орбиталей обоих катионов (рис. 3). Индуктивное влияние катионов Tl³⁺ не изменяет знака интеграла $J_{\rm FeCr}(<0)$, а проявляется лишь в существенном уменьшении сверхтонкого поля $H_{hf}(0)$ за счет уменьшения положительного вклада Н (см. уравнение (3)).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные исследования продемонстрировали эффективность использования зондовых мессбау-

эровских нуклидов ⁵⁷Fe для выявления и анализа тонких эффектов, связанных с влиянием немагнитных катионов A^{m+} на характер обменных взаимодействий в перовскитоподобных хромитах ACrO₃. В отличие от хромитов $RCr_{0.98}^{57}Fe_{0.02}O_3$ (R = P39), где основные изменения физических характеристик связаны со стерическими эффектами, вызванными изменением размеров ионов РЗЭ, в хромите TlCrO₃ решающую роль играет электронная структура катиона $Tl^{3+}(4f^{14}5d^{10}6s^0)$. На основании магнитных и структурных измерений было подтверждено лишь незначительное влияние микроколичеств атомов 57 Fe на макроскопические свойства TlCrO₃. Установлено, что, в отличие от хромитов RCrO₃, в случае TlCr_{0.95}⁵⁷Fe_{0.05}O₃ наибольший вклад в ГЭП на ядрах ⁵⁷Fe обусловлен дипольными взаимодействиями поляризованных ионов кислорода. Показано, что индуктивное влияние ковалентных (высоко поляризованных) связей Tl-O существенно сказывается на величине сверхтонкого магнитного поля H_{hf} , которое оказывается существенно ниже по сравнению с хромитами РЗЭ с близкими значениями углов сверхобменной связи Fe(Cr)-O-Cr. Анализ температурной зависимости $H_{hf}(T)$ показал, что, несмотря на достаточно низкое значение угла $\vartheta_{\rm Cr(Fe)-O-Cr} \sim 142^{\circ}$ для TlCrO₃ зондовые катионы ⁵⁷Fe³⁺ антиферромагнитно связаны с подрешеткой хрома, причем сила этих взаимодействий (J_{FeCr}) заметно меньше, чем для изоструктурных хромитов РЗЭ. Наблюдаемые нами изменения параметров электрических и магнитных сверхтонких взаимодействий нуклидов ⁵⁷Fe в TlCr_{0.95}⁵⁷Fe_{0.05}O₃ согласуется с мессбауэровскими данными для собственной фазы феррита TlFeO₃, подтверждая тем самым важную роль катионов таллия.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-03-00976).

ЛИТЕРАТУРА

- J. B. Goodenough and J. M. Longo, Crystallographic and Magnetic Properties of Perovskite and Perovskite-Related Compounds, Springer-Verlag, Berlin (1970).
- И. С. Любутин, в сб.: Физическая кристаллография, Наука, Москва (1992), с. 326.
- M. Eibschütz, S. Shtrikman, and D. Treves, Phys. Rev. 156, 562 (1967).

- A. S. Moskvin, N. S. Ovanesyan, and V. A. Trukhtanov, Hyperfine Interact. 1, 265 (1975).
- A. G. Gavriliuk, G. N. Stepanov, and I. S. Lyubutin, Hyperfine Interact. 126, 305 (2000).
- А. С. Москвин, Н. С. Ованесян, В. А. Трухтанов, ФТТ 18, 1127 (1976).
- J. Etourneau, J. Portier, and F. Ménil, J. Alloys Comp. 188, 1 (1992).
- G. Catalan and J. F. Scott, Adv. Mater. 21, 2463 (2009).
- I. A. Presniakov, A. V. Sobolev, A. V. Baranov et al., J. Phys.: Condens. Matter. 18(39) 8943 (2006).
- A. Sobolev, A. Belik, and I. Presniakov, AIP Conf. Proc. 1489, 133 (2012).
- W. Yi, Y. Matsushita, Y. Katsuya et al., Dalton Trans. 44, 10785 (2015).
- M. E. Matsnev and V. S. Rusakov, AIP Conf. Proc. 1489, 178 (2012).
- 13. F. Menil, J. Phys. Chem. Sol. 46, 763 (1985).
- 14. Z. M. Stadnik, J. Phys. Chem. Sol. 45, 311 (1984).
- 15. D. M. S. Esquivel, C. A. Taft, and J. Danon, J. Phys. C 10, 1527 (1977).
- 16. А. В. Соболев, А. В. Боков, В. И и др., ЖЭТФ 156, 1115 (2019).

- 17. J. Voyer, D. H. Ryan, Hyperfine Interact. 170, 91 (2006).
- P. G. L. Williams and G. M. Bancroft, Mössbauer Eff. Methodol. 7, 39 (1971).
- L. J. Dąbrowski, J. Piekoszewski, and J. Suwalski, Nucl. Instrum. Methods 91, 93 (1971).
- 20. L. J. Dąbrowski, J. Piekoszewski, and J. Suwalski, Nucl. Instrum. Methods 103, 545 (1972).
- J. Dongen Torman, R. Jagannathan, and J. M. Trooster, Hyperfine Interact. 1, 135 (1975).
- **22**. E. F. Bertaut, *Magnetism*, Academic Press, New York (1968).
- 23. К. П. Белов, А. К. Звездин, А. М. Кадомцева, Р. З. Левитин, Ориентационные фазовые переходы в редкоземельных магнитных материалах, Наука, Москва (1985).
- 24. A. T. Apostolov, I. N. Apostolova, and J. M. Wesselinowa, Mod. Phys. Lett. B 29, 1550251 (2015).
- 25. J. Jeong, E. A. Goremychkin, T. Guidi et al., Phys. Rev. Lett. 108, 077202 (2012).
- 26. L. Ding, P. Manuel, D. D. Khalyavin et al., Phys. Rev. B 95, 054432 (2017).
- 27. J. M. D. Coey, G. A. Sawatzky, J. Phys. C: Solid State Phys. 4, 2386 (1971).
- 28. S. J. Kim, G. Demazeau, I. Presniakov, and J. H. Choy, J. Solid State Chem. 161, 197 (2001).
ВОССТАНОВЛЕНИЕ ФУНКЦИИ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СВЕРХПРОВОДНИКАХ С ПОМОЩЬЮ НЕОДНОРОДНЫХ МИКРОКОНТАКТОВ И КОРРЕКЦИЯ ФОНА В СПЕКТРАХ ЯНСОНА

Н. Л. Бобров^{*}

Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина Национальной академии наук Украины 61103, Харьков, Украина

> Поступила в редакцию 21 декабря 2020 г., после переработки 3 февраля 2021 г. Принята к публикации 4 февраля 2021 г.

Рассмотрено применение неоднородных микроконтактов ниобия в сверхпроводящем состоянии для восстановления функции электрон-фононного взаимодействия. В основе метода лежит использование нелинейности вольт-амперной характеристики, возникающей вследствие неупругих процессов подавления избыточного тока микроконтактов при рассеянии неравновесных фононов на электронах, испытывающих андреевское отражение. Предложена новая модель возникновения фона на микроконтактных спектрах Янсона и способы его коррекции.

DOI: 10.31857/S0044451021070087

1. ВВЕДЕНИЕ

В основе спектроскопии электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ) микроконтактов с непосредственной проводимостью лежит дупликация носителей — в токовом состоянии электроны разбиваются на две группы, разность энергий для которых между занятыми и свободными состояниями электронов на поверхности Ферми составляет миллиэлектронвольты, т.е. равна приложенному напряжению [1, 2]. Количество работ, посвященных нахождению функции ЭФВ с помощью микроконтактов, находящихся в нормальном состоянии, превышает несколько сотен, опубликованы две монографии [3, 4], обобщающие полученные результаты.

Для сверхпроводящего состояния использование нелинейностей избыточного тока баллистических микроконтактов в области фононных энергий для восстановления функции ЭФВ получило теоретическое обоснование в работах Хлуса и Омельянчука в 1983 г. [5, 6]. Однако только спустя почти 30 лет эти работы нашли экспериментальное подтверждение [7,8]. Задержка связана с наличием не учитыва-

Процессы рассеяния неравновесных фононов на андреевских электронах не имеют таких ограниче-

емого теорией сверхпроводящего фона, что привело к необходимости использования для этой процедуры разности вторых производных вольт-амперных характеристик (BAX) в сверхпроводящем и нормальном состояниях, в то время как теория предсказывала, что функция ЭФВ пропорциональна первой производной избыточного тока или разности первых производных сверхпроводящего и нормального состояний. Механизм формирования нелинейности избыточного тока в области фононных энергий связан с рассеянием неравновесных фононов, генерируемых электронами с избыточной энергией, равной приложенному к контакту напряжению, на андреевских электронах. Нелинейность ВАХ нормального состояния формируется в объеме с характерным размером порядка диаметра контакта. Связано это с геометрическими ограничениями процессов обратного рассеяния, ответственными за эту нелинейность. Процессами обратного рассеяния называются такие процессы рассеяния электронов на неравновесных фононах, при которых электрон в результате рассеяния возвращается в тот же электрод, из которого вылетел.

^{*} E-mail: bobrov@ilt.kharkov.ua

ний и в принципе возможны на любом расстоянии от закоротки, где они сосуществуют. Тем не менее теория учитывает только процессы рассеяния, происходящие в области высокой плотности тока, где концентрации обоих компонентов велики. В целом выводы теории были подтверждены для сверхпроводников с большой длиной когерентности, таких, например, как олово или алюминий [8]. В то же время было обнаружено, что в баллистических микроконтактах тантала в формировании нелинейности избыточного тока принимает участие также область вблизи закоротки с характерным размером порядка длины когерентности [7,9]. Вклад этой области оказался заметно больше, чем вклад от области с размером порядка диаметра контакта. Заметное отличие сверхпроводящей добавки в спектр для тантала от таковой для сверхпроводников с большей длиной когерентности потребовало применения специфических приемов при восстановлении с ее помощью функции ЭФВ. Эти приемы оказались полезными при изучении неоднородных сверхпроводящих микроконтактов. Обзор экспериментальных результатов по восстановлению функций ЭФВ для различных сверхпроводников из дополнительной нелинейности, возникающей при переходе микроконтакта с непосредственной проводимостью в сверхпроводящее состояние, приведен в работе [10].

Для баллистических микроконтактов нелинейность BAX в нормальном состоянии по крайней мере одного порядка или даже больше, чем дополнительная нелинейность избыточного тока, возникающая при переходе контакта в сверхпроводящее состояние. Необходимость выделения этой нелинейности в чистом виде для восстановления функции ЭФВ в значительной мере снижает практическую ценность такой процедуры, поскольку для многих сверхпроводников перевод в нормальное состояние при низкой температуре весьма затруднен или даже невозможен по техническим причинам.

Выход из этой тупиковой ситуации был бы возможен, если бы удалось отключить нелинейность, связанную с процессами обратного рассеяния, которые ответственны за нелинейность в нормальном состоянии, не затронув при этом дополнительную нелинейность избыточного тока, связанную с процессами рассеяния неравновесных фононов на андреевских электронах. Поскольку в баллистических контактах такая ситуация невозможна, рассмотрим альтернативы.

Уменьшение интенсивности спектра в нормальном состоянии происходит при загрязнении материала в области сужения, сопровождающегося уменьЖЭТФ, том **160**, вып. 1 (7), 2021

шением длины упругого пробега электронов. Предельный случай такого уменьшения наблюдается в диффузионных микроконтактах, т.е. в таких контактах, для которых выполняется условие $l_i \ll$ $\ll d \ll \Lambda_{\varepsilon}$, где d — диаметр контакта, l_i длина упругой релаксации, Λ_{ε} — диффузионная длина энергетической релаксации, $\Lambda_{\varepsilon} = \sqrt{l_i l_{\varepsilon}/3}$, l_{ε} — длина энергетической релаксации. Интенсивность спектра в диффузионном режиме ниже, чем в баллистическом, по порядку величины в l_i/d раз.

В соответствии с теоретической моделью [11], вторая производная ВАХ диффузионного контакта отличается от таковой баллистического только меньшей интенсивностью. Кроме того, вследствие изотропизации распределения электронов по импульсам наблюдается почти полная изотропизация спектра ЭФВ. Это может приводить лишь к небольшому размытию спектра и незначительному изменению его формы. Никаких других последствий от сокращения длины упругой релаксации электронов теория не предсказывает.

В экспериментах уменьшение длины упругого рассеяния, как уже отмечалась, обусловлено загрязнением микроконтакта, т. е. повышением концентрации примесей и дефектов решетки. На рис. 1, 2 в работе [12] можно наблюдать возрастание фона и деградацию высокоэнергетических фононных пиков в микроконтактных спектрах меди с ростом концентрации примесей марганца и железа. В работе [13] изложена методика прямого нахождения длины упругого рассеяния электронов *l*_i внутри микроконтакта. Для контактов относительно малого размера переход от баллистического к диффузионному режиму, когда длина упругой релаксации становится сопоставимой с характерными параметрами кристаллической решетки, сопровождается значительными ее искажениями. Помимо предсказанного теорией размытия спектров такие искажения приводят к сильному подавлению высокоэнергетических фононных особенностей вплоть до полного их исчезновения, а также к высокому уровню фона [12,14]. Отметим, что подавление высокоэнергетических фононов характерно также и для функций ЭФВ, восстановленных в туннельных экспериментах для пленок с искаженной решеткой [15].

Как уже отмечалось, в силу геометрических ограничений процессы обратного рассеяния эффективны в объеме контакта с характерным размером порядка его диаметра. Однако для диффузионных контактов при определенных условиях эти процессы могут быть эффективными только вблизи центра контакта. Если максимальная концентрация дефектов и примесей достигается на границе между электродами и быстро убывает на периферии контакта, то электроны после рассеяния на неравновесных фононах с большой степенью вероятности будут диффундировать в направлении градиента уменьшения концентрации примесей. Другими словами, процессы обратного рассеяния, определяющие спектр в нормальном состоянии, в основном будет сосредоточены вблизи границы соприкосновения электродов. Это может привести к росту вклада в спектр ЭФВ поверхностных фононов и, соответственно, к дополнительному размытию спектра. Очевидно, что если в диффузионном режиме находится только один из берегов микроконтакта, то в результирующем спектре интенсивность каждого парциального вклада будет определяться грязным берегом.

Тем не менее в таких контактах с очень высоким уровнем фона, размытыми спектрами и сильно подавлеными высокоэнергетическими фононами все фононные особенности в нормальном состоянии остаются на своих местах [12, 14]. Это однозначно свидетельствует о том, что в таких контактах сохраняется дупликация электронов [1,2], т. е. они являются спектроскопическими.

Теперь вернемся к рассмотрению нелинейности избыточного тока, обусловленной рассеянием неравновесных фононов на андреевских электронах. Как уже отмечалось выше, в баллистических микроконтактах тантала [7,9], вследствие меньшей длины когерентности, существенный вклад в дополнительную нелинейность ВАХ при переходе в сверхпроводящее состояние вносят берега контакта. Формирование нелинейности избыточного тока в таких контактах происходит в объеме с характерным размером порядка длины когерентности. Очевидно, что величина этой нелинейности в микроконтактах из подобных сверхпроводников (с сопоставимыми длинами когерентности) будет зависеть как от величины избыточного тока, так и от объема, в котором формируется эта нелинейность. Поскольку при переходе в диффузионный режим избыточный ток составляет около 55 % от своего значения в баллистическом режиме, а соответствующая нелинейность будет формироваться приблизительно в таком же объеме с характерным размером порядка длины когерентности, можно ожидать, что дополнительная нелинейность ВАХ сверхпроводящего состояния в диффузионном режиме будет примерно лишь вдвое меньше, чем в баллистическом.

Таким образом, создается впечатление, что перевод контакта в диффузионный режим является решением поставленной задачи — значительное уменьшение вклада в общую нелинейность от процессов обратного рассеяния и сравнительно небольшое уменьшение вклада от процессов рассеяния неравновесных фононов на андреевских электронах. Тут самое время напомнить о влиянии дефектов и примесей на вид спектров ЭФВ. Как уже отмечалось [12, 14], наличие сильных искажений решетки приводит к значительному подавлению высокочастотных мод и к общему размытию спектров ЭФВ, что подтверждается независимыми данными, полученными из туннельных экспериментов [15]. Поскольку неравновесные фононы отражают колебательную структуру материала в окрестности своей генерации, для получения спектра ЭФВ невозмущенного материала примеси и дефекты в идеальном случае должны быть сосредоточены только вблизи центра контакта, а диффузионная длина энергетической релаксации должна быть больше той области, в которой формируется нелинейность ВАХ в области фононных частот в сверхпроводящем состоянии. Таким образом, окончательным решением поставленной задачи является контакт с неоднородным распределением примесей: грязным ядром той частью микроконтакта, где эффективны процессы обратного рассеяния, и чистыми берегами (далее по тексту будем называть такой контакт неоднородным). Никаких дополнительных ограничений на контакт не накладывается.

Сразу очертим круг возможных кандидатов, пригодных для исследования с помощью неоднородных контактов. Здесь сразу отпадают сверхпроводники с экстремально большой длиной когерентности, поскольку для них в формировании нелинейности не участвуют берега, и объем, в котором сосредоточены искажения решетки, будет близок или совпадать с областью концентрации тока. По той же самой причине маловероятно исследование ВТСП, но уже из-за экстремально малой длины когерентности. Все другие сверхпроводники, лежащие внутри этого диапазона, могут рассматриваться как возможные претенденты для проверки методики.

Прижимные микроконтакты являются наиболее подходящими объектами для проверки изложенных предположений, поскольку поверхность всегда более загрязнена, чем объем, а в процессе создания микроконтактов на границу между электродами вносятся дополнительные искажения.

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В качестве объекта исследования использовался хорошо изученный сверхпроводник с известной функцией ЭФВ — ниобий. Он является весьма сложным объектом с точки зрения как микроконтактной, так и туннельной спектроскопии. Окислы на его поверхности могут варьироваться по составу в широких пределах и менять свои свойства в зависимости от степени окисления. Кроме того, внутри окисного слоя содержится большое количество распаривающих центров, подавляющих сверхпроводимость.

Для создания микроконтактов использовался чистый ниобий с отношением сопротивлений $\rho_{300}/\rho_{res} \sim 100$, где ρ_{300} — удельное сопротивление при комнатной температуре, ρ_{res} — остаточное сопротивление [16, 17]. Длина упругой релаксации в нем составляла $l_i \approx 220$ нм, длина когерентности $\xi_0 \approx 44$ нм, с учетом упругого рассеяния приведенная длина когерентности $\zeta \approx 36$ нм. Здесь $1/\zeta = 1/\xi_0 + 1/l_i$. Контакты создавались по сдвиговой методике [18, 19]. С учетом того, насколько важную роль играет окисел на поверхности электродов в обеспечении качества, механической и электрической стабильности микроконтактов, в экспериментах применялись два подхода. В первом подходе использовались естественные окислы перед монтированием в устройство для создания микроконтактов электроды протравливались в смеси кислот, промывались и высушивались. Во втором подходе обработанные аналогичным образом электроды помещались в напылительную установку, и после прогрева в вакууме до предплавильной температуры на их поверхность напылялся тонкий слой алюминия, который затем окислялся в кипящем растворе перекиси водорода. Подготовленные электроды монтировались в устройство для создания микроконтактов [20]. Далее контакты, создаваемые между электродами, покрытыми естественными окислами, будем называть контактами первого типа, а с использованием второго подхода контактами второго типа.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА И ИХ ОБРАБОТКА

Несмотря на большую статистику — более сотни микроконтактов каждого типа, даже самые лучшие спектры в нормальном состоянии не соответствуют в полной мере баллистическому режиму пролета электронов. Фононные особенности на них значительно размыты, высокочастотные фононы сильно подавлены, присутствует высокий уровень фона. Кроме перечисленного, для ряда спектров наблюдается сдвиг высокочастотного пика в область более высоких энергий. Отдельные спектры представляют



Рис. 1. Спектры ЭФВ микроконтактов ниобия. Сверхпроводимость подавлена магнитным полем, $H \approx 4-5$ Тл, T = 4.2 К. Экспериментальные кривые сглажены полиномиальной аппроксимацией

собой размытый широкий максимум в районе первого пика со слабовыраженным плечом в районе второго пика. Типичные представители этих спектров приведены на рис. 1. Однако подавляющее большинство вторых производных ВАХ в нормальном состоянии для контактов обоих типов представляло собой кривые без выраженных фононных особенностей очень низкой интенсивности. К сожалению, немногочисленные контакты, имеющие в нормальном состоянии спектры, подобные представленным на рис. 1, не удалось перевести в сверхпроводящее состояние, поскольку лишь относительно небольшой процент контактов выдерживал сброс магнитного поля.

В то же время для ряда контактов из гораздо более многочисленной группы, имеющей спектры без выраженных фононных особенностей в нормальном состоянии, вследствие их гораздо большего количества, удалось снять полный набор характеристик. При переходе таких контактов в сверхпроводящее состояние при неизменном уровне модулирующего сигнала интенсивность второй производной возрастала приблизительно на порядок, а форма спектра кардинально изменялась.

На рис. 2.1*a* приведен пример такой трансформации второй производной ВАХ для одного из контактов второго типа. Форма второй производной в сверхпроводящем состоянии подобна разности вторых производных ВАХ в сверхпроводящем и нормальном состояниях танталовых микроконтактов



Рис. 2. Процедура восстановления функции ЭФВ в ниобии с помощью сверхпроводящих микроконтактов: a) S — вторые производные ВАХ ниобиевах микроконтактов в сверхпроводящем состоянии, B — фоновая кривая; b) S - B — вторая производная с вычтенным фоном, (S - B)K — вторая производная с вычтенным фоном после коррекции, K — корректирующая кривая; b) микроконтактные функции ЭФВ g_{PC} (PC — point contact), полученные путем интегрирования второй производной ВАХ с вычтенным фоном (панель b): 1 — до коррекции; 2 — после коррекции. Для контакта 17.5 Ом: a) N — вторая производная в большем масштабе. Для контакта 50 ОМ: b) кривая 3 получена из кривой 2 путем умножения x-координат точек на 0.8 для компенсации последовательно включенного сопротивления. Контакты 1 и 2 второго типа, контакт 3 первого типа

из работы [9]. Имеются и различия — в спектре ниобия отсутствуют неравновесная особенность и трансформация мягкой фононной моды в спектре из плеча в нормальном состоянии (при энергии около 10 мэВ) в пик при переходе в сверхпроводящее состояние. В танталовых микроконтактах такая трансформация обусловлена селекцией фононов с малыми групповыми скоростями. Отсутствие такой селекции в ниобии связано с заметно меньшим по сравнению с танталом объемом, в котором происходит эффективное взаимодействие неравновесных фононов с андреевскими электронами, и (или) с недостаточно большой длиной упругого пробега неравновесных фононов. Тантал находится ближе к границе диапазона по длине когерентности по сравнению с другими сверхпроводниками — длина когерентности уже достаточно мала, чтобы в формировании нелинейности сверхпроводящего состояния принимала участие приконтактная область, и в то же время достаточно велика, чтобы в этой области происходила эффективная селекция фононов.

Хотя для такого рода контактов нелинейностью ВАХ в нормальном состоянии можно пренебречь, остается необходимость вычитания сверхпроводящего фона из второй производной ВАХ. При проведении фоновой кривой требуется обеспечить равенство нулю второй производной при напряжении, большем границы фононного спектра. При $eV \gg \Delta$, где Δ — величина сверхпроводящей энергетической щели, фон представляет собой плавную кривую без особенностей, а вблизи щелевой особенности главным требованием при проведении фона является недопущение появления артефактов на разностной кривой S – B. Это касается также недостающего участка на разностной кривой, идущего от нуля. На рис. 2.1а можно видеть фоновую кривую, удовлетворяющую этим критериям, а на рис. 2.16 — разностную кривую. Недостающий участок для нее при смещениях от 0 до 5 мВ дорисован от руки. Поскольку функция ЭФВ тождественно равна нулю за пределами фононного спектра, для корректного восстановления функции ЭФВ необходимо, чтобы разностная кривая удовлетворяла геометрическому правилу, называемому правилом сумм: суммарные площади под интегрируемой кривой выше и ниже оси абсцисс должны быть одинаковыми.

Очевидно, что для приведенных на рис. 2 кривых это правило не выполняется, поскольку высокоэнергетическая часть спектра значительно подавлена и требует коррекции. Как и для танталовых микроконтактов [9], корректирующая функция равна единице в низкоэнергетической области и больше единицы в области подавления спектра. В результате умножения разностной кривой на корректирующую получается кривая, для которой выполняется правило сумм. Функции ЭФВ, восстановленные из кривых до и после коррекции, показаны на рис. 2*e*.

Весьма интересен спектр контакта второго типа, представленный на рис. 2.2. Он по форме подобен предыдущему спектру, однако все особенности в нем смещены в область больших энергий. После вычитания фона B_S , коррекции полученной кривой и последующего интегрирования получаем функцию ЭФВ, пики которой находятся вблизи 20 и 28 мэВ. Это соответствует «растянутой» по оси х на 20% функции ЭФВ ниобия. Умножив значения *х*-координаты кривой на 0.8, мы получим функцию ЭФВ, весьма близкую к туннельной. Причиной сдвига фононных особенностей в сторону больших энергий может быть сложная структура контакта. Поскольку контроль толщины напыляемого слоя алюминия был недостаточно точным, его толщина, вероятно, оказалась больше обычной. При последующей обработке электродов в перекиси водорода пленка алюминия не окислилась на всю глубину и сыграла роль последовательно включенного сопротивления, сдвигающего фононные пики на

спектре в область более высоких энергий, что можно учесть, зная истинное положение фононных особенностей.

Для контактов первого типа наиболее характерна перевернутая S-образная форма без всякой дополнительной структуры, представленная на рис. 2.3. Как и для предыдущих контактов, после вычитания фона разностная кривая требует коррекции. На панели в показаны функции ЭФВ, восстановленные из разностной кривой до и после коррекции. Поскольку сверхпроводящая добавка в спектр формируется в объеме с характерным размером длины конверсии андреевских электронов в куперовские пары, по виду функции ЭФВ, восстановленной из этой добавки, можно сделать косвенный вывод о степени совершенства кристаллической решетки этого объема. Как следует из рисунка, функция ЭФВ, восстановленная для этого контакта, представляет собой размытую колоколоподобную кривую. Такая форма характерна для сильнодеформированного металла. Соответствующий пример можно наблюдать на рис. 1 в работе [21] для спектра циркониевого контакта, изготовленного изломным методом. В то же время более щадящая техника прижимных контактов позволила получить спектры циркония со значительно лучшим разрешением даже при использовании электродов заведомо худшего качества (см. рис. 9 в работе [22]). Таким образам, у ниобиевых контактов первого типа чаще всего толщина дефектного слоя оказывается сравнимой или даже больше длины конверсии андреевских электронов в куперовские пары. Следовательно, при использовании неоднородных микроконтактов для восстановления функции ЭФВ ключевым условием является минимально возможная толщина дефектного слоя. По крайней мере она должна быть заведомо меньше размера области, в которой формируется нелинейность ВАХ в сверхпроводящем состоянии. Как оказалось, такое условие заметно проще выполняется для контактов второго типа.

Очевидно, что если при проведении фоновой кривой руководствоваться приведенными выше правилами, то возможные вариации ее формы относительно малы и неспособны заметно изменить восстанавливаемую функцию ЭФВ. В то же время влияние формы и положения на оси энергий корректирующей кривой изучено недостаточно. Для танталовых микроконтактов, как видно на рис. 15 в работе [9], наблюдается разброс в этих параметрах для различных контактов. В цитируемой работе корректирующие кривые рисовались от руки и эмпирически подбирались их амплитуда и положение на оси энер-



Рис. 3. *a*) Производные корректирующих кривых, используемые в качестве «заготовок». Возрастающие участки на всех заготовках одинаковы и представляют собой отрезки экспоненты. Спадающие участки на заготовках 1 и 2 — также отрезки экспонент, а на заготовке 3 этот участок состоит из двух отрезков экспонент, сопряженных полиномом. *б*) Корректирующие кривые 1–3, полученные из заготовок на панели *a*. Положения кривых на оси энергий соответствуют положению максимума на заготовке. Использование различных корректирующих кривых позволяет оценить степень влияния их формы, а также положения на оси энергий на результат восстановления функции ЭФВ. *6*) Изменение масштаба корректирующей кривой *K*1 в зависимости от ее положения на оси энергий (цифры возле кривых) для микроконтакта на рис. 2.1. *г*) Вид корректирующих кривых в точках минимумов магнитуд (см. формулу (1) и рис. 4) для микроконтакта на рис. 2.1

гий. В данной работе сделана попытка выявление общих закономерностей для корректирующих кривых разной формы.

Поскольку корректирующие кривые всегда имеют участок ступенчатого роста, для моделирования их формы удобно использовать заготовки, состоящие из отрезков экспоненциальных кривых. На рис. За показаны заготовки, путем интегрирования которых и получены корректирующие кривые различной формы на рис. Зб. Начальные участки для кривых идентичны, а спадающие участки на рис. За различны. Для кривой 1 начальный участок по-

добен отраженному, сжатому по оси y начальному участку для кривой 2 плюс к этому участок растянут дополнительно по оси x, а для кривой 3 представляет собой комбинацию двух отрезков экспонент, сопряженных полиномом. Положение корректирующей кривой при расчетах идентифицировалось с положением максимума на заготовке.

Все три корректирующие кривые успешно справились с поставленной задачей коррекции в достаточно широком интервале их положений на оси энергий для всех исследованных нами микроконтактов. В качестве примера на рис. За приведено изме-



Рис. 4. Зависимости магнитуд корректирующих кривых от их положения на оси энергий для микроконтакта, приведенного на рис. 2.1

нение амплитуды корректирующей кривой K1 (см. контакт рис. 2.1) в зависимости от ее положения на оси энергий, а также вид всех трех корректирующих кривых при одинаковом смещении приблизительно в центре интервала (рис. 3*г*). Для количественного описания корректирующей кривой независимо от ее формы удобно использовать ее магнитуду, т.е. эффективную площадь под кривой от нуля до границы фононного спектра, нормированную величину V_{max} , соответствующую границе фононного спектра:

$$m = \frac{1}{V_{max}} \int_{0}^{V_{max}} [K(\omega) - 1] d\omega.$$
 (1)

На рис. 4 приведены зависимости магнитуд корректирующих кривых от смещения, а на рис. 5 — изменения формы функции ЭФВ для различных корректирующих кривых и их положения на оси энергий для того же самого микроконтакта. Как видно на рисунке, наименьший разброс в форме функции ЭФВ соответствует минимумам магнитуд корректирующих кривых.

4. КОРРЕКЦИЯ ФОНА В МИКРОКОНТАКТНЫХ СПЕКТРАХ ЯНСОНА

Практически все вторые производные ВАХ микроконтактов при смещениях выше границы фононного спектра не обращаются в нуль, в то время как функции ЭФВ при этих смещениях тождественно



Рис. 5. Вариации формы функции ЭФВ, восстановленной для контакта, приведенного на рис. 2.1, в зависимости от вида корректирующей кривой и ее положения на оси энергий. Центральная часть рисунка соответствует минимальным значениям магнитуд корректирующих кривых

равны нулю. Существующие теории объясняют возникновение фона реабсорбцией неравновесных фононов электронами в микроконтакте [23–25]. Количественной характеристикой уровня фона γ в спектрах Янсона является отношение величины второй производной ВАХ на границе фононного спектра к ее максимальному значению. Однако даже при полной блокировке неравновесных фононов внутри контакта эта теория не может объяснить существование спектров с уровнем фона $\gamma \ge 0.5$ [26]. Поскольку на настоящий момент отсутствует физическое обоснование существования спектров с большим уровнем фона, на практике обычно применяют некие эмпирические самосогласованные итерационные процедуры, удовлетворяющие требованиям совпадения (в пределах экспериментальной погрешности) функций ЭФВ различных контактов из одинаковых материалов [3]. Это обычно справедливо для уровня фона $\gamma \leq 0.3$. Для спектров с большим уровнем фо-



Рис. 6. Процедура коррекции фона в спектрах микроконтактов, приведенных на рис. 1. *a*) Вторые производные ВАХ: 1 — исходные; 2 — после коррекции. *б*) Третьи производные ВАХ, полученные численным дифференцированием кривых на панелях *a* (кривые 1); кривые после коррекции (2); корректирующие кривые *K* (3)

на конечный результат его вычитания будет уже зависеть от выбранной процедуры.

Вместе с тем, сравнивая кривые на рис. 1 и на рис. 26, по аналогии можно предположить, что фон в спектрах Янсона появляется из-за подавления высокочастотных фононов, что должно проявиться в нарушении правила сумм уже на третьей производной ВАХ. Причиной подавления высокочастотных фононов и, следовательно, появления фона являются примеси и дефекты решетки. Фононы отражают колебательную структуру материала в окрестности своей генерации. Для низкоэнергетических фононов с большой длиной волны все эти локальные искажения решетки усредняются на длине волны и не оказывают заметного влияния на условия генерации. В то же время для высокоэнергетических фононов, у которых длина волны сопоставима с периодом решетки, генерация вблизи искажений решетки будет затруднена, поскольку они разнообразны и расположены хаотическим образом. Таким образом, из этого предположения следует, что должна наблюдаться корреляция между степенью подавления высокочастотных фононов и уровнем фона, что в принципе соответствует эксперименту [12, 14].

При записи производных ВАХ используется, как правило, стандартная модуляционная методика, об-

щепринятая в микроконтактной и туннельной спектроскопии. Поскольку модулирующее напряжение размывает спектр, его стараются сделать как можно меньше, чтобы соблюсти разумный компромисс между разрешающей способностью и уровнем шумов. Поэтому использование исходной экспериментальной кривой второй производной ВАХ для получения третьей производной методом численного дифференцирования приводит в большинстве случаев к неприемлемо высокому уровню шумов на полученной кривой. Для исключения шумов экспериментальные кривые сглаживались - вначале разделялись на перекрывающиеся отрезки, которые аппроксимировались полиномами. Исходные экспериментальные точки и результаты их полиномиальной аппроксимации представлены на рис. 1.

Процедура коррекции фона в спектрах Янсона путем восстановления правила сумм на третьей производной ВАХ ничем технически не отличается от аналогичной процедуры на второй производной ВАХ сверхпроводящих контактов, поэтому был использован тот же самый алгоритм.

На рис. 6 представлены результаты применения этого алгоритма для контактов, приведенных на рис. 1. Зависимости магнитуд корректирующих кривых от их положения на оси энергий (рис. 7) и ва-



Рис. 7. Зависимости магнитуд корректирующих кривых от их положения на оси энергий для микроконтакта, приведенного на рис. 6.1



Рис. 8. Вариации формы функции ЭФВ, восстановленной для контакта, приведенного на рис. 6.1, в зависимости от положения корректирующей кривой K1 на оси энергий (a) и для различных корректирующих кривых в точках минимумов их магнитуд (δ)



Рис. 9. Сравнение процедур вычитания и коррекции фона: 1-исходная экспериментальная кривая с фоном; 2-кривая после коррекции; 3-традиционно используемая фоновая кривая; 4-кривая после вычитания фона. Параметр ЭФВ λ для кривой 2 больше, чем для кривой 4, в 1.5раза, максимум кривой 4 составляет примерно 0.6 от максимума кривой 2

риации формы производных после коррекции фона (рис. 8) приведены для различных типов корректирующих кривых и их положения на оси энергий для одного из контактов. Как видно на рис. 8, наименьшие вариации формы функций ЭФВ соответствуют минимумам магнитуд корректирующих кривых. Существенно меньшая магнитуда корректирующих кривых здесь по сравнению со сверхпроводящими спектрами (ср. рис. 4 и рис. 7) приводит к практически полной идентичности кривых после коррекции фона, т. е. независимости конечного результата от формы корректирующей кривой. Для спектров Янсона, имеющих большой уровень фона, использование традиционных методов его вычитания [3] приводит, во-первых, к заметному искажению восстанавливаемой функции ЭФВ и, во-вторых, к заниженным значениям функции ЭФВ q_{PC} и параметра $\Im \Phi B \lambda$ (рис. 9). Для приведенного на рис. 9 спектра параметр λ при коррекции фона в 1.5 раза больше, чем при вычитании, а значение функции ЭФВ в точке максимума при вычитании фона составляет около 60% по сравнению с коррекцией. Таким образам, использование метода коррекции фона позволяет уточнить форму функций ЭФВ и численные параметры для материалов, спектры которых сложно получить с низким уровнем фона.

Интересно сопоставить результаты восстановления функций ЭФВ из спектров микроконтактов, находящихся в сверхпроводящем и нормальном состо-



Рис. 10. Сравнение функций ЭФВ, восстановленных из спектров контактов в нормальном и сверхпроводящем состояниях, а также из туннельных данных. Все кривые нормированы на единицу в районе первого пика. a) 1 - аморфный материал в нормальном состоянии (рис. 6.3), <math>2 - аморфный материал в сверхпроводящем состоянии (рис. 2.3), <math>3 -из туннельных данных для аморфных пленок [15]. b) 1 - дефектный материал в нормальном состоянии состоянии (рис. 6.2), <math>2 - дефектный материал в сверхпроводящем состоянии (рис. 6.2), <math>2 - дефектный материал в сверхпроводящем состоянии (рис. 2.1), <math>3 -из туннельных данных для аморфных пленок [15]. b) 1 - искаженный материал в нормальном состоянии (рис. 6.1), <math>2 - бездефектный материал в сверхпроводящем состоянии (рис. 2.2), <math>3 -из

туннельных данных для кристаллических пленок [27]

яниях, а также сравнить их с туннельными данными [15,27] (рис. 10).

Как следует из сравнения, полученные функции ЭФВ можно условно разделить на три группы. На рис. 10*a* приведены функции ЭФВ, относящиеся к аморфному ниобию. При этом, судя по размытию кривых, наибольшая степень аморфизации материала соответствует функции под номером 2, восстановленной из сверхпроводящего спектра, в то время как для туннельной функции ЭФВ (кривая 3) имеет место существенная рекристаллизация. На рис. 10*б* степени рекристаллизации близки друг к другу, положение второго пика смещено в область более высоких энергий на всех кривых, наблюдается их сильное уширение. Наконец, на рис. 10*в* приведены кривые, соответствующие наиболее совершенной кристаллической решетке. Положения пиков совпадают для всех кривых, размытие их также значительно меньше, чем в предыдущих случаях. Вместе с тем функция ЭФВ, восстановленная из спектра в нормальном состоянии, сильно уширена, второй пик подавлен, также довольно сильно подавлен второй пик на функции ЭФВ, восстановленной из туннельных измерений. Наиболее выигрышно смотрится здесь кривая 2, восстановленная из сверхпроводящего спектра.

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Существующие теории спектроскопии ЭΦВ сверхпроводящих микроконтактов с непосредственной проводимостью относятся к баллистическому пролету носителей через сужение и справедливы только для сверхпроводников с большой длиной когерентности. Диффузионный предел рассмотрен только для длинного канала с грязными берегами, а для неоднородных микроконтактов пока отсутствует какая-либо теоретическая модель. Тем не менее работы [5, 6] являются мощным теоретическим фундаментом, квинтэссенцией которого является доказательство, что функция ЭФВ может быть может восстановлена из нелинейности избыточного тока, связанной с рассеянием андреевских электронов на неравновесных фононах. В ходе экспериментальной проверки работ [5, 6] было обнаружено, что для восстановления функции ЭФВ необходимо учитывать сверхпроводящий фон, не предсказываемый теорией. Что представляется значительно более важным, теория оказалась шире, чем первоначально предполагали авторы восстановление функции ЭФВ из нелинейности избыточного тока оказалось возможным не только для баллистических контактов из сверхпроводников с очень большой когерентностью, но и для других сверхпроводников с меньшей длиной когерентности, а также для неоднородных контактов. По аналогии с традиционной микроконтактной спектроскопией мы находимся сейчас в таком историческом промежутке, когда существовала теория Кулика-Омельянчука-Шехтера (КОШ) [1], но не существовало теории, объясняющей наблюдение спектров ЭФВ в диффузионных микроконтактах [11]. Также тогда не существовало теории, объясняющей появление фона в спектрах Янсона. Кстати, до сих пор отсутствует теоретическое объяснение возможности возникновения фона на уровне свыше 50%. Таким образом, представленные в данной работе экспериментальные результаты могут послужить полезным источником информации для дальнейшего развития теории.

В основе микроконтактной спектроскопии лежит дупликация носителей — в токовом состоянии электроны разбиваются на две группы, для которых разность энергий между занятыми и свободными состояниями электронов на поверхности Ферми составляет eV, т. е. равна приложенному напряжению [1, 2]. Если для неоднородных контактов в сверхпроводящем состоянии выполняется бездиссипативный режим прохождения электронов через дефектную область, т.е. сохраняется дупликация электронов, то вторая производная ВАХ таких структур подобна разности ВАХ нормального и сверхпроводящего состояний баллистических микроконтактов. С учетом результатов экспериментов на ниобиевых микроконтактах даже частично диссипативный режим прохождения дефектной области может оказаться применимым для восстановления функции ЭФВ. С одной стороны, это открывает дополнительные возможности, расширяя количество объектов, позволяющих в ряде случаев получить более качественную информацию об ЭФВ от невозмущенного материала в окрестности генерации неравновесных фононов, что и продемонстрировано выше. С другой стороны, это приводит к необходимости учитывать возможность наличия последовательно включенного сопротивления. Для сверхпроводника, у которого известно положение фононных особенностей, это не представляет никаких сложностей, а вот материал с неизвестным фононным спектром требует измерения достаточно большого количества контактов с различным сопротивлением.

Как в сверхпроводящих спектрах неоднородных контактов, так и в спектрах Янсона наблюдается подавление высокоэнергетичных фононов, хотя физические причины такого подавления существенно разные.

В неоднородных сверхпроводящих контактах нелинейность формируется вследствие рассеяния неравновесных фононов на электронах, испытующих андреевское отражение, в объеме с характерным размером порядка приведенной длины когерентности. Вероятность такого рассеяния сильно зависит от концентрации обеих составляющих, причем существует некая пороговая концентрация как андреевских электронов, так и неравновесных фононов, ниже которой вероятность их взаимодействия резко падает. При этом пороговые концентрации связаны между собой — рост концентрации одной компоненты уменьшает пороговую концентрацию второй. Концентрация андреевских электронов определяется величиной избыточного тока, а концентрация неравновесных фононов плотностью фононных состояний. С ростом напряжения на контакте величина избыточного тока плавно уменьшается во всем диапазоне энергий. Что касается плотности фононных состояний, то вначале она растет, а после достижения энергии первого фононного пика начинает быстро уменьшаться, что и приводит к резкому падению вероятности рассеяния. Также чрезвычайно важным фактором является зависимость эффективного сечения рассеяния неравновесных фононов на андреевских электронах от энергии первых. Неравновесные фононы не являются точечными объектами, и с возрастанием их энергии эффективность рассеяния падает.

Таким образом, именно сочетание всех этих факторов и приводит к подавлению высокоэнергетических фононов. Как было показано при исследовании сверхпроводящих танталовых микроконтактов [5], степень такого подавления очень сильно зависит от того, насколько сильно убывает избыточный ток, тогда как начало такого подавления всегда привязано к энергии, соответствующей резкому уменьшению плотности фононных состояний. Для приведенных здесь контактов минимумы магнитуд корректирующих кривых расположены в интервале энергий 15.8–16 мэВ для контактов с упорядоченной кристаллической решеткой (с учетом коррекции по напряжению для контакта 50 Ом) и 16.5–16.8 мэВ для аморфного контакта.

Причиной подавления высокоэнергетических фононов в спектрах Янсона являются искажения решетки, вызываемые примесями и дефектами. Чтобы электрон с избыточной энергией, равной приложенному напряжению, мог потерять эту энергию, испустив неравновесный фонон, должен быть выполнен ряд условий. Во-первых, энергия этого фонона должна совпадать с избыточной энергией электрона, т. е. колебательные параметры решетки в окрестности рождения фонона должны позволять такой процесс. Во-вторых, фонон должен иметь возможность распостраняться по кристаллу, т. е. колебательные параметры решетки в соседних объемах не должны сильно различаться. Когда приложенное к контакту напряжение мало, излучаются фононы с большой длиной волны и дефекты не оказывают заметного влияния на возможность их генерации, поскольку на длине волны укладывается большое количество атомов и свойства решетки усредняются. В то же время если длина волны фононов сопоставима с параметрами решетки, то ее искажения могут препятствовать процессам их генерации. В самом деле, в окрестности каждого дефекта будут индивидуальные колебательные параметры решетки, не совпадающие с таковыми невозмущенной решетки и, возможно, других дефектов. Кроме того, хаотическое расположение дефектов затрудняет возможность распространения фононов, генерируемых в их окрестности. Таким образом, эффективный объем генерации для коротковолновых фононов оказывается меньше, чем для длинноволновых, что и приводит к уменьшению их интенсивности, а также к общему уширению спектров.

Для спектров Янсона минимумы магнитуд корректирующих кривых расположены при энергиях 16.6–17.2 мэВ для контактов с упорядоченной кристаллической решеткой и при 17.6 мэВ для аморфного контакта. Таким образам, для спектров Янсона положение минимумов магнитуд корректирующих кривых сдвинуто в область более высоких энергий приблизительно на 1 мэВ по сравнению со спектрами сверхпроводящих контактов. Это коррелирует с наблюдением, что степень подавления высокочастотных фононов возрастает с уменьшением их длины волны.

Столь разные физические причины, лежащие в основе подавления высокоэнергетических фононов в спектрах неоднородных сверхпроводящих контактов и спектрах микроконтактов Янсона, закономерно приводят к разным результатам при восстановлении формы функций ЭФВ. Восстановление правила сумм на третьих производных ВАХ спектров Янсона убирает фон на вторых производных, однако не устраняет причину его появления. Поэтому форма функции ЭФВ соответствует возмущенному материалу, что особенно четко проявляется для спектров с большим фоном и, соответственно, с большой магнитудой корректирующих кривых — высокочастотные пики подавлены, наблюдается уширение фононных особенностей. Поскольку объем, в котором формируется нелинейность, в неоднородных сверхпроводящих микроконтактах удален от поверхности, где концентрация дефектов решетки максимальна, вероятность получения спектров, соответствующих невозмущенному материалу для таких контактов выше, чем для контактов Янсона. Это замечание в наибольшей степени относится к технологически сложным для микроконтактной спектроскопии материалам с проблемной поверхностью.

Несмотря на то что при получении функций ЭФВ из спектров неоднородных сверхпроводящих контактов имеет место двойное преобразование (вычитание сверхпроводящего фона и последующая коррекция высокоэнергетической части кривых, чтобы они удовлетворяли правилу сумм), вариативность получаемых результатов не является критически значимой. Сверхпроводящий фон при больших смещениях соответствует общему ходу спектра, и его небольшие вариации практически не приводят к заметному изменению формы и положения фононных особенностей на восстанавливаемой функции ЭФВ. Изменение формы корректирующей кривой также мало влияет на форму восстанавливаемой функции ЭФВ, если ее положение на оси энергий соответствует минимуму магнитуды. Тем не менее существует заметная зависимость между вариативностью формы восстанавливаемой функции ЭФВ и магнитудой корректирующих кривых. Если для кривых на рис. 5 в точке минимумов магнитуд корректирующих кривых (m = 8.6-9.5) все-таки имеют место небольшие вариации формы, то для контакта с сопротивлением 110 Ом (см. рис. 1), с уровнем фона $\gamma \sim 0.7$ вариации формы функции ЭФВ после восстановления (см. рис. 8, $m \sim 1$) пренебрежимо малы.

Осложняющим фактором при обработке кривых может быть появление на производных ВАХ особенностей неспектрального характера, связанных с разрушением сверхпроводимости в приконтактной области. Такие особенности могут иметь различную природу, например тепловую или связанную с неравновесными процессами. Эти особенности не являются воспроизводимыми, их положение зависит от температуры и сопротивления микроконтакта. Поэтому для исключения из рассмотрения таких особенностей необходим достаточно большой объем экспериментальных данных.

6. КРАТКИЕ ВЫВОДЫ

1. У неоднородных микроконтактов наблюдается кардинальное различие вторых производных ВАХ в нормальном и сверхпроводящем состояниях — в

нормальном состоянии на производных отсутствуют либо резко ослаблены особенности, связанные с фононами. В сверхпроводящем состоянии на вторых производных ВАХ появляются особенности, позволяющие восстановление функции ЭФВ.

2. Для восстановления функции ЭФВ с помощью неоднородных сверхпроводящих контактов необходимо и достаточно использовать вторую производную ВАХ в сверхпроводящем состоянии.

3. Причиной появления фона на вторых производных ВАХ микроконтактов в нормальном состоянии являются дефекты кристаллической решетки, приводящие к уменьшению вклада в спектр высокоэнергетических фононов и, соответственно, к нарушению правила сумм уже на третьей производной ВАХ. Коррекция фона осуществляется путем восстановления нарушенного правила сумм на этой производной.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Национальной академии наук Украины по проекту ФЦ 4-19.

ЛИТЕРАТУРА

- И. О. Кулик, А. Н. Омельянчук, Р. И. Шехтер, ФНТ **3**, 1543 (1977) [I. O. Kulik, A. N. Omel'yanchuk, and R. I. Shekhter, Sov. J. Low Temp. Phys. **3**, 740 (1977)].
- И. К. Янсон, И. О. Кулик, А. Н. Омельянчук, Р. И. Шехтер, Ю. В. Шарвин, Открытия в СССР, ВНИИПИ, Москва (1986), сс. 18–20 (Диплом № 328, Открытия, изобрет. (1987), № 40, с. 3); ФНТ 13, 1005 (1987) [Sov. J. Low Temp. Phys. 13(9), 574 (1987)].
- И. К. Янсон, А. В. Хоткевич, Атлас микроконтактных спектров электрон-фононного взаимодействия в металлах, Наук. думка, Киев (1986) [А. V. Khotkevich and I. K. Yanson, Atlas of Point-Contact Spectra of Electron-Phonon Interaction in Metals, Kluwer Acad. Publ., Dordrecht (1995)].
- Yu. G. Naidyuk and I. K. Yanson, *Point-Contact Spectroscopy*, Springer, New York (2005).
- В. А. Хлус, А. Н. Омельянчук, ФНТ 9, 373 (1983)
 [V. A. Khlus and A. N. Omel'yanchuk, Sov. J. Low Temp. Phys. 9, 189 (1983)].

- B. A. Χπyc, ΦΗΤ 9, 985 (1983) [A. V. Khlus, Sov. J. Low Temp. Phys. 9, 510 (1983)].
- H. Л. Бобров, В. В. Фисун, О. Е. Квитницкая, В. Н. Чернобай, И. К. Янсон, ФНТ **38**, 480 (2012)
 [N. L. Bobrov, V. V. Fisun, O. E. Kvitnitskaya, V. N. Chernobay, and I. K. Yanson, Low Temp. Phys. **38**, 373 (2012)], arXiv:1207.6486.
- Н. Л. Бобров, А. В. Хоткевич, Г. В. Камарчук, П. Н. Чубов, ФНТ 40, 280 (2014) [N. L. Bobrov, A. V. Khotkevich, G. V. Komarchuk, and P. N. Chubov, Low Temp. Phys. 40, 215 (2014)], arXiv:1405. 6869.
- H. Л. Бобров, ФНТ 45, 562, (2019) [N. L. Bobrov, Low Temp. Phys. 45, 482 (2019)], arXiv:1906.04380.
- 10. Н. Л. Бобров, УФН 190(11), 1143, (2020)
 [N. L. Bobrov, Physics-Uspekhi 63, 1072 (2020)].
- И. О. Кулик, Р. И. Шехтер, А. Г. Шкорбатов, ЖЭТФ 81, 2126 (1981) [I. O. Kulik, R. I. Shekhter, and A. G. Shkorbatov, JETP 54, 1130 (1981)].
- Ю. Г. Найдюк, О. И. Шкляревский, И. К. Янсон, ФНТ 8, 725 (1982) [Yu. G. Naidyuk, O. I. Shklyarevskii, and I.K. Yanson, Sov. J. Low Temp. Phys. 8(7), 362 (1982)].
- A. И. Акименко, A. Б. Веркин, H. М. Пономаренко, И. К. Янсон, ΦΗΤ 8, 260 (1982) [A. I. Akimenko, A. B. Verkin, N. M. Ponomarenko, and I. K. Yanson, Sov. J. Low Temp. Phys. 8(3), 130 (1982)].
- И. О. Кулик, И. К. Янсон, ФНТ 4, 1267 (1978)
 [I. O. Kulik and I. K. Yanson, Sov. J. Low Temp. Phys. 4(10), 596 (1978)].
- B. D. Kumhi and T. H. Geballe, Phys. Rev. Lett. 45, 1039 (1980).
- И. К. Янсон, Н. Л. Бобров, Л. Ф. Рыбальченко, В. В. Фисун, ФНТ 9, 1155 (1983) [I. K. Yanson, N. L. Bobrov, L. F. Rybal'chenko, and V. V. Fisun, Sov. J. Low Temp. Phys. 9, 596 (1983)], arXiv: 1604.07067.
- I. K. Yanson, N. L. Bobrov, L. F. Rybal'chenko, and V. V. Fisun, Sol. St. Comm. 50, 515 (1984), arXiv: 1605.09022.
- П. Н. Чубов, И. К. Янсон, А. И. Акименко, ФНТ 8, 64 (1982) [P. N. Chubov, I. К. Yanson, and А. I. Akimenko, Sov. J. Low Temp. Phys. 8, 32 (1982)].
- П. Н. Чубов, А. И. Акименко, И. К. Янсон, Патент 834803 (СССР), Бюлл. изобрет. № 20 (1981), с. 232.
- Н. Л. Бобров, Л. Ф. Рыбальченко, А. В. Хоткевич, И. К. Янсон, Патент № 1631626 (УССР), Бюлл. изобрет. № 8 (1991).

- В. В. Хоткевич, А. В. Хоткевич, А. П. Жернов, Т. Н. Кулагина, Э. К. Фольк, Вісник ХНУ № 476, сер. «Фізика», вип. 4, 96 (2000).
- 22. Η. Л. Бобров, Л. Φ. Рыбальченко, В. В. Фисун, A. B. Хоткевич, ФНТ 42, 1035 (2016) [N. L. Bobrov, L. F. Rybal'chenko, V. V. Fisun, and A. V. Khotkevich, Low Temp. Phys. 42, 811 (2016)], arXiv: 1612.03396.
- 23. A. P. Van Gelder, Sol. St. Comm. 35(1), 19 (1980).

- И. О. Кулик, А. Н. Омельянчук, И. К. Янсон, ФНТ
 7, 263 (1981) [I. O. Kulik, A. N. Omel'yanchuk, and I. K. Yanson, Sov.J. Low Temp. Phys. 7, 129 (1981)].
- И.О. Кулик, ФНТ 11, 937 (1985) [I. O. Kulik, Sov. J. Low Temp. Phys. 11, 516 (1985)].
- 26. Γ. Ρ. Шустов, ΦΗΤ 15, 426 (1989) [G. R. Shustov, Sov. J. Low Temp. Phys. 15, 240 (1989)].
- 27. E. L. Wolf, J. Zasadzinski, and J. W. Osmun, J. Low Temp. Phys. 40(1/2), 19 (1980).

УСЛОВИЯ РЕАЛИЗАЦИИ И МАГНИТОПОЛЕВАЯ ЗАВИСИМОСТЬ УГЛОВЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ИЗОЛЯТОРЕ СО СВЕРХПРОВОДЯЩИМ СПАРИВАНИЕМ НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

А. Д. Федосеев*

Институт физики им. Л. В. Киренского, ФИЦ КНЦ Сибирского отделения Российской академии наук 660036, Красноярск, Россия

Поступила в редакцию 12 января 2021 г., после переработки 12 января 2021 г. Принята к публикации 13 февраля 2021 г.

В последние годы исследования топологических свойств систем были расширены новой концепцией топологических изоляторов и сверхпроводников высокого порядка. В то время как было предложено большое количество моделей двумерных систем на квадратной решетке, в которых могут возникать угловые возбуждения, вопрос о реализации таких возбуждений в сверхпроводящих системах с треугольной кристаллической решеткой остается слабо изучен. В данной работе на примере топологического изолятора в форме треугольника с киральным сверхпроводящим параметром порядка показана возможность реализации угловых возбуждений в C_3 -симметричных системах. Несмотря на нетопологический характер, эти возбуждения обладают значениями энергии внутри щели спектра краевых возбуждений первого порядка в широком диапазоне параметров и хорошо локализованы в углах системы. Продемонстрировано наличие бесщелевых угловых возбуждений в системе при определенных значениях параметров. Приложение внешнего магнитного поля в плоскости системы приводит к снятию трехкратного вырождения энергии угловых возбуждений и позволяет с помощью направления магнитного поля управлять положением углового возбуждения с минимальной энергией. В то же время изменение величины магнитного поля позволяет сделать точную подстройку для реализации бесщелевого возбуждения в выбранном угле.

DOI: 10.31857/S0044451021070099

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы исследования топологически нетривиальных систем получили новое направление, связанное с предложенной концепцией топологических изоляторов высокого порядка (ТИВП) [1]. В таких системах щелевым является не только спектр объемных состояний, но и спектр краевых состояний первого порядка (обычных краевых состояний), и при этом возникают краевые состояния на границах более высокого порядка: углов в двумерных системах, а также углов и ребер в трехмерных системах. Следует отметить, что еще до работы [1] была продемонстрирована возможность возникновения локализованных состояний на доменных стенках между областями с разным топологическим индексом, расположенных на открытой границе системы [2,3].

Особый интерес топологические системы высокого порядка вызывают в связи с возможностью реализации угловых майорановских состояний в двумерных топологических сверхпроводниках высокого порядка (ТСВП) [4,5], поскольку снимают одну из проблем создания майорановских состояний на практике. Майорановские состояния первого порядка требуют наличия чисто одномерной системы, что сложно реализовать практически, в то время как уширение цепочки приводит к возникновению бесщелевой зоны краевых возбуждений. В таком случае возбуждения с нулевой энергией хоть и остаются отделенными щелью от объемных возбуждений, но уже не отделены от других краевых возбуждений. Кроме того, при уширении одномерной системы характер возбуждений меняется с чисто майорановского на киральный с изменением соотношения

^{*} E-mail: fad@iph.krasn.ru

между длиной и шириной системы [6,7]. Предсказанные майорановские угловые состояния решают эти проблемы. Во-первых, их энергия лежит в цели спектра как объемных, так и краевых возбуждений. Во-вторых, их локализация строго в углах системы препятствует смене характера, и они остаются майорановскими вне зависимости от соотношения размеров системы.

Дополнительный интерес к ТСВП вызван возможностью менять положение угловых возбуждений варьированием параметров системы [5,8,9]. Угловые возбуждения в двумерных системах представляются хорошими кандидатами для осуществления брейдинга, являющегося одним из ключевых требований при создании топологического кубита [10]. Другим возможным практическим применением таких систем является возможность создавать на их основе наноразмерные устройства с управляемыми транспортными характеристиками. Для таких практических применений важна возможность управления угловыми возбуждениями с помощью внешних полей, которая была продемонстрирована в работах [5,8].

Распространенный подход для получения ТСВП заключается в рассмотрении модели топологического изолятора при учете сверхпроводящего спаривания, выбранного таким образом, чтобы спектр краевых возбуждений первого порядка стал щелевым, а масса Дирака для этих возбуждений имела противоположный знак на соприкасающихся границах [4]. В таком случае углы в системе будут выступать в роли доменных границ, на которых будут возникать краевые возбуждения второго порядка, то есть бесщелевые угловые возбуждения. Этот подход хорошо работает в системах на квадратной кристаллической решетке, для которых предложено множество моделей ТИВП и ТСВП [11-15]. Однако он не применим для С₃-симметричных систем, поскольку в рамках описанного выше метода всегда возникает четное число топологически защищенных угловых состояний [16].

Другой способ формирования угловых состояний был предложен на примере решетки Кагомэ [17–19]. При определенных значениях параметров узлы, находящиеся в углах системы с открытыми граничными условиями в форме треугольника, становятся изолированными от остальной системы, формируя угловые состояния (аналогично краевым состояниям в модели Su-Schrieffer-Heeger или модели Китаева [20]). Эти состояния являются бесщелевыми и возникают во всей области параметров, которая не отделена от особой параметрической точки закрытием щели спектра краевых состояний. По предположению авторов такие состояния топологически защищены обобщенной киральной симметрией [18,19]. Однако ключевой особенностью рассматриваемых систем являлось отсутствие электрон-дырочной симметрии, а значит, подобный подход не применим для создания ТСВП. Кроме того, выводы о топологической защищенности угловых состояний в решетке Кагомэ впоследствии были оспорены [21, 22]. Более того, авторы работы [21] сделали вывод о невозможности реализации топологически защищенных угловых состояний в C_3 -симметричной системе.

В то время как топологически защищенные угловые состояния в системах в форме треугольника, обладающих треугольной кристаллической решеткой, запрещены, эти системы все еще представляют интерес для исследования. Во-первых, существуют и другие проявления нетривиальной топологии помимо возникновения бесщелевых угловых состояний [16]. В частности, для С₃-симметричной системы была продемонстрирована возможность возникновения зарядовой аномалии [23]. Во-вторых, краевые состояния, в том числе бесщелевые, могут возникать в системах, не обеспечивающих их топологическую защищенность. Так, к примеру, краевые состояния были обнаружены в тривиальной фазе одномерной цепочки со спин-орбитальным взаимодействием и сверхпроводимостью s-типа [24, 25], а также экситонного диэлектрика со спин-орбитальным взаимодействием [26]. Краевые возбуждения с нулевой энергией были найдены в тривиальной фазе двумерного топологического изолятора с киральной сверхпроводимостью и 120-градусным магнитным упорядочением [27, 28].

В связи с отсутствием в системах с треугольной решеткой топологически защищенных угловых состояний представляется важным исследование возможности реализации в такой системе угловых возбуждений нетопологического характера, в том числе бесщелевых угловых возбуждений. Данная работа посвящена исследованию условий возникновения угловых возбуждений в двумерном топологическом изоляторе в форме треугольника с киральной сверхпроводимостью на треугольной решетке и их модификации при приложении магнитного поля.

2. МОДЕЛЬ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА С КИРАЛЬНОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬЮ НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

Аналогично авторам работы [4], рассмотрим двухуровневую модель в приближении сильной свя-



Рис. 1. (В цвете онлайн) Киральное сверхпроводящее спаривание d + id-типа на треугольной решетке. Слева: направление сверхпроводящего спаривания Δ_j (2). Справа: знак $\operatorname{Re} \Delta_k$ и $\operatorname{Im} \Delta_k$ [29]. Точками обозначены нодальные точки Δ_k (3)

зи при учете гибридизации, индуцированной спинорбитальным взаимодействием Рашбы, и сверхпроводящего синглетного спаривания на соседних узлах:

$$\hat{H} = \hat{H}_{0} + \hat{T} + \hat{H}_{so} + \hat{H}_{sc},$$

$$\hat{H}_{0} = \sum_{f\nu\sigma} (\nu\Delta\varepsilon - \mu) c^{\dagger}_{f\nu\sigma}c_{f\nu\sigma},$$

$$\hat{T} = t \sum_{\langle fm \rangle \nu\sigma} \nu c^{\dagger}_{f\nu\sigma}c_{m\nu\sigma},$$

$$\hat{H}_{so} = i\lambda \sum_{\langle fm \rangle \nu\sigma\sigma'} [\boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} \times \mathbf{d}_{fm}]_{z} c^{\dagger}_{f\nu\sigma}c_{m,-\nu,\sigma'},$$

$$\hat{H}_{sc} = \sum_{\langle fm \rangle \nu} \Delta_{fm} c^{\dagger}_{f\nu\uparrow}c^{\dagger}_{m\nu\downarrow} + \text{h.c.}$$
(1)

Здесь сумма по f обозначает суммирование по узлам решетки, $\langle fm \rangle$ отвечает суммированию по ближайшим соседям, \mathbf{d}_{fm} — единичный вектор вдоль направления от узла m к узлу f, μ — химический потенциал системы, $2\Delta\varepsilon$ — разница посадочных энергий в двух подзонах, t — параметр перескока между ближайшими соседями, λ — параметр спин-орбитального взаимодействия, σ_j — матрицы Паули в спиновом пространстве, $c^{\dagger}_{f\nu\sigma}$ — операторы рождения электрона на узле f в разных подзонах, обозначенных индексом $\nu = \pm 1$.

Будем рассматривать случай кирального сверхпроводящего синглетного спаривания между электронами на ближайших узлах, соответствующего симметрии треугольной решетки (рис. 1):

$$\Delta_{fm} = \Delta_j = \Delta_1 e^{2\pi i (j-1)/3}, \quad j = 1, 2, 3.$$
 (2)

Спектр объемных возбуждений рассматриваемой системы имеет вид

$$E_{k} = \sqrt{|\Delta_{k}|^{2} + (\mu - E_{k}^{TI})^{2}},$$
(3)

где E_k^{TI} обозначает спектр объемных состояний в топологическом изоляторе:

$$E_k^{TI} = \pm \sqrt{|t_k|^2 + |\lambda_{k\sigma}|^2},$$

$$t_k = \Delta \varepsilon - 2t + 4t \cos \frac{k_x}{2} \left(\cos \frac{k_x}{2} + \cos \frac{k_y \sqrt{3}}{2} \right),$$

$$\lambda_{k\sigma} = 2i\lambda\sigma \sin \frac{k_x}{2} \left(2\cos \frac{k_x}{2} + \cos \frac{k_y \sqrt{3}}{2} \right) -$$

$$- 2\sqrt{3}\lambda \sin \frac{k_y \sqrt{3}}{2} \cos \frac{k_x}{2},$$
(4)

а Δ_k — сверхпроводящее спаривание, имеющее двумерное представление

$$\Delta_k = 2\Delta_1 \left(\cos k_x - \cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{k_y \sqrt{3}}{2} \right) - 2i\sqrt{3}\Delta_1 \sin \frac{k_x}{2} \sin \frac{k_y \sqrt{3}}{2}.$$
 (5)

Поскольку Δ_k имеет двумерное представление, оно обладает не нодальными линиями, как в работе [4], а нодальными точками, как и спин-орбитальное взаимодействие.

В отсутствие сверхпроводящего спаривания, гамильтониан (1) описывает двумерный киральный топологический изолятор, характеризующийся спиновым числом Черна [30]:

$$C_s = 1, \quad -6t < \Delta \varepsilon < 2t, C_s = 2, \quad 2t < \Delta \varepsilon < 3t.$$
(6)

При отсутствии гибридизации между подзонами рассматриваемая система является топологическим сверхпроводником [31,32] с числами Черна, противоположными для верхней и нижней подзон:

$$C_{\nu} = 2\nu, \quad -3t + \Delta\varepsilon < \nu\mu < 6t + \Delta\varepsilon. \tag{7}$$

Следует отметить, что поскольку числа Черна имеют противоположный знак, на пересечении нетривиальных областей для верхней и нижней подзон полное число Черна системы C = 0. Это делает систему чувствительной к гибридизации между подзонами.

При одновременном учете кирального сверхпроводящего спаривания и спин-орбитального взаимодействия диаграмма топологических фаз остается практически той же, что и в отсутствие спин-орбитального взаимодействия. Тривиальные области с $C_{\pm 1} = 0$ остаются тривиальными, а области, в которых только одно из чисел Черна $C_{\pm 1} \neq 0$, в то



Рис. 2. (В цвете онлайн) Диаграмма параметров топологического изолятора в форме треугольника с киральной сверхпроводимостью на треугольной решетке. Слева: в отсутствие магнитного поля, справа: при наличии магнитного поля в плоскости h = 0.3, $\phi_h = \pi/2$. Красные области соответствуют наличию бесщелевых краевых возбуждений первого порядка, фиолетовые — объемных бесщелевых возбуждений. Синим обозначены области параметров, при которых в системе возникают угловые возбуждения со значением энергии, лежащим внутри щели спектра краевых возбуждений. Желтым — области параметров, при которых спектр краевых возбуждений щелевой, однако угловые возбуждения с энергией внутри щели отсутствуют. Белая линия соответствует параметрам, при которых возникают бесщелевые угловые возбуждения, синяя линия — параметрам, при которых закрывается щель спектра краевых возбуждений в магнитном поле. Параметр спин-орбитального взаимодействия $\lambda = 0.5t$, сверхпроводящего спаривания $\Delta_1/t = 0.5$

время как второе $C_{\mp 1} = 0$, остаются топологически нетривиальными. Обе эти области не представляют интереса для поиска угловых возбуждений. Область же, в которой оба числа Черна $C_{\pm 1}$ были отличны от нуля, формирует топологическую фазу с числом Черна C = 0, которая более не содержит топологически защищенных краевых возбуждений. Однако в ее границах все еще возможна реализация как краевых возбуждений нетопологического характера, в том числе бесщелевых, так и угловых возбуждений. Таким образом, именно эта область будет исследоваться в дальнейшем.

3. УГЛОВЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В СИСТЕМЕ В ФОРМЕ ТРЕУГОЛЬНИКА

Результаты численных расчетов спектра одноэлектронных возбуждений топологического изолятора в форме треугольника с киральной сверхпроводимостью продемонстрировали, что в интересующей области в зависимости от значений параметров реализуются три ситуации (рис. 2 слева). В значительной части рассматриваемой области, хотя она и является топологически тривиальной, в системе возникают бесщелевые краевые возбуждения первого порядка. Другая часть области отвечает наличию угловых возбуждений нетопологического характера с энергией внутри щели спектра краевых возбуждений. Энергия таких возбуждений трехкратно вырождена ввиду эквивалентности углов в системе. Третий случай соответствует наличию в системе щели в спектре краевых возбуждений первого порядка, однако угловые возбуждения с энергией внутри щели в системе отсутствуют.

В одномерных системах существует взаимное соответствие между энергией краевых состояний и характером этого состояния. Если энергия состояния находится внутри щели объемного спектра, то состояние краевое, а если внутри значений спектра разрешенных объемных состояний, то состояние является объемным. В двумерных системах это соответствие работает только в одну сторону. Если энергия состояния находится внутри абсолютной щели спектра объемных состояний, то такое состояние по-прежнему является краевым. Однако обратное, вообще говоря, не верно. То же самое относится и к угловым возбуждениям в двумерных системах. Поэтому для определения характера состояний в двумерных случаях полезно рассчитать параметр IPR (inverse participation ratio) [33,34], характеризующей степень локализации состояния, который хорошо зарекомендовал себя для обнаружения краевых состояний в топологических изоляторах [35]:

$$I_{q}(m) = \frac{\sum_{f} (A_{m}(f))^{q}}{\left(\sum_{f} A_{m}(f)\right)^{q}}.$$
 (8)

Здесь $A_m(f)$ — амплитуда возбуждения с номером m на узле f, q > 1. Параметр I_q является относительно большим для локализованных состояний ($I_q = 1$ для состояния, локализованного на одном узле), и имеет порядок $1/V^{q-1}$ для делокализованного состояния в системе с числом узлов V.

На рис. 3 представлена зависимость величины I_4 от химпотенциала μ для различных собственных возбуждений в системе. Как можно видеть, возбуждения, характеризующиеся минимальной энергией при $\mu = 0$, остаются хорошо локализованными в углах треугольника, даже когда их энергия оказывается за пределами щели спектра краевых возбужде-



Рис. 3. (В цвете онлайн) а) Зависимость I₄ (8) для собственных возбуждений в топологическом изоляторе в форме треугольника с киральной сверхпроводимостью от величины химического потенциала. Синяя линия отвечает угловым возбуждениям с минимальной энергией, красная линия обозначает величину химического потенциала µ, при котором энергия угловых возбуждений пересекает границу зоны краевых возбуждений. б) Спектр системы при µ = 0. Точками обозначены энергии краевых возбуждений, треугольниками — угловых, серые области обозначают зону краевых состояний. *в*-∂) Пространственное распределение угловых возбуждений при различных значениях химического потенциала, отмеченных точками на *a*: при µ = 0 это угловое возбуждение с энергией внутри щели спектра краевых возбуждений, при µ = 0.9t это угловое возбуждение с энергией внутри зоны краевых состояний, при µ = 1.5t возбуждение является краевым с тенденцией к локализации в углах системы. Параметры системы: Δ₁/t = 0.6, Δε = 0, λ/t = 0.5

ний в рассматриваемой системе (рис. 3г). Небольшие пики I₄ возникают из-за тенденции краевых возбуждений первого порядка с энергиями в глубине щели спектра объемных возбуждений к локализации в углах ограниченных систем [36]. Подобные возбуждения можно легко отличить от угловых возбуждений, изменяя размер системы. Поскольку краевые возбуждения даже при наличии тенденции к локализации в углах распределены по всей границе системы, то их значения IPR уменьшаются с увеличением размеров системы, в то время как значения IPR для угловых состояний остаются неизменными.

При определенных значениях параметров, формирующих линию на диаграмме параметров, в системе возможна реализация угловых возбуждений с нулевой энергией (рис. 2 слева). Эти линии нулевых мод не являются размерным эффектом в отличие от ситуаций, рассмотренных в работах [25,37,38]. Наличие в системе беспорядка не влияет на возможность реализации в ней нулевых угловых возбуждений, однако конкретные значения параметров, при которых такие возбуждения возникают, оказались очень чувствительны к беспорядку непосредственно в углах системы.

4. ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА УСЛОВИЯ РЕАЛИЗАЦИИ УГЛОВЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ

Рассмотрим влияние однородного магнитного поля, направленного в плоскости системы, на особенности реализации угловых состояний в треугольном топологическом изоляторе с киральной сверхпроводимостью на треугольной решетке:

$$\hat{H}_{h} = -\sum_{f\nu\sigma\sigma'} \mathbf{h}\boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} c^{\dagger}_{f\nu\sigma} c_{f\nu\sigma'},$$

$$\mathbf{h} = h\left(\cos\phi_{h}, \sin\phi_{h}, 0\right).$$
(9)

Наличие магнитного поля приводит к изменению описанной в предыдущем параграфе диаграммы параметров (рис. 2 справа). Так, спектр объемных возбуждений теперь закрывается не на линиях, а в области параметров. Также внутри области параметров, соответствующих реализации угловых возбуждений, возникает линия параметров, отвечающая закрытию щели в спектре краевых возбуждений первого порядка. Линия реализации бесщелевых угловых мод при приложении магнитного поля расщепляется на две. Однако сами области реали-



Рис. 4. (В цвете онлайн) Сверху: зависимость энергии угловых возбуждений от направления магнитного поля h=0.3t, направленного в плоскости системы. Снизу: пространственное распределение двух возбуждений с минимальной энергией при $\phi_h=\pi/2$

зации угловых возбуждений остаются практически без изменений.

Поскольку в рассматриваемой системе вследствие наличия спин-орбитального взаимодействия существует связь между спиновыми и пространственными степенями свободы, включение магнитного поля, направленного в плоскости системы, приводит к разрушению пространственной симметрии и делает углы неэквивалентными. При этом энергия возбуждений становится зависящей не только от величины, но и от направления магнитного поля (рис. 4). Так, экстремальным значением энергии обладает возбуждение, находящееся в том углу, направление на который из центра треугольника совпадает с направлением магнитного поля. Таким образом, с помощью магнитного поля можно осуществить не только точную подстройку системы для получения углового возбуждения с нулевой энергией, но и определить, в каком именно углу будет возникать это возбуждение.

Поскольку полученные в магнитном поле возбуждения имеют нетопологический характер и не могут быть представлены в виде двух разнесенных майорановских операторов, такая система не может быть использована для реализации брейдинга. Однако она все еще может быть полезна для реализации устройства, транспортом через которое можно управлять с помощью магнитного поля.

5. ВЫВОДЫ

На примере двумерного топологического изолятора в форме треугольника с киральной сверхпроводимостью на треугольной решетке была продемонстрирована возможность реализации угловых возбуждений в С₃-симметричных системах. Было показано, что угловые возбуждения в такой системе могут обладать энергиями как внутри щели спектра краевых возбуждений первого порядка, так и за ее пределами. При определенных значениях параметров, формирующих линию на диаграмме параметров, угловые возбуждения являются бесщелевыми. Включение магнитного поля в системе снимает вырождение угловых возбуждений, при этом энергия угловых возбуждений зависит как от величины магнитного поля так и от его направления в плоскости системы. Это позволяет не только провести точную подстройку для получения углового возбуждения с нулевой энергией, но и выбрать угол, в котором это угловое возбуждение будет реализовываться.

Благодарности. Автор выражает благодарность Д. М. Дзебисашвили, В. А. Мицкану, М. С. Шустину, М. М. Коровушкину и С. В. Аксенову за многочисленные дискуссии и внимание к работе.

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-02-00348), Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда поддержки научной и научно-технической деятельности в рамках научного проекта № 20-42-243005 «Изучение краевых состояний в одно- и двумерных топологических сверхпроводниках», № 19-42-240011 «Кулоновские взаимодействия в проблеме реализации майорановских мод в низкоразмерных системах с нетривиальной топологией», а также гранта Президента РФ МК-1641.2020.2.

ЛИТЕРАТУРА

- W. A. Benalcazar, B. A. Bernevig, and T. L. Hughes, Science 357, 61 (2017).
- **2**. G. E. Volovik, Письма в ЖЭТФ **91**, 201 (2010).
- F. Zhang, C. L. Kane, and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. 110, 046404 (2013).
- Q. Wang, C.-C. Liu, Yu.-M. Lu, and F. Zhang, Phys. Rev. Lett. 121, 186801 (2018).

- 5. X. Zhu, Phys. Rev. B 97, 205134 (2018).
- A. C. Potter and P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. 105, 227003 (2010).
- N. Sedlmayr, J. M. Aguiar-Hualde, and C. Bena, Phys. Rev. B 93, 155425 (2016).
- T. E. Pahomi, M. Sigrist, and A. A. Sluyanov, Phys. Rev. Res. 2, 032068(R) (2020).
- S.-B. Zhang, A. Calzona, and B. Trauzettel, Phys. Rev. B 102, 100503(R) (2020).
- C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman, and S. D. Sarma, Rev. Mod. Phys. 80, 1083 (2008).
- A. Yoshida, Y. Otaki, R. Otaki, and T. Fukui, Phys. Rev. B 100, 125125 (2019).
- J. Zou, Zh. He, and G. Xu, Phys. Rev. B 100, 235137 (2019).
- Q.-B. Zeng, Y.-B. Yang, and Y. Xu, Phys. Rev. B 101, 241104(R) (2020).
- 14. K. Asaga and T. Fukui, Phys. Rev. B 102, 115102 (2020).
- S.-B. Zhang, W. B. Rui, A. Calzona, S.-J. Choi, A. P. Schnyder, and B. Trauzettel, Phys. Rev. Res. 2, 043025 (2020).
- 16. E. Khalaf, W. A. Benalcazar, T. L. Hughes, and R. Queiroz, arXiv:1908.00011 (2019).
- 17. M. Ezawa, Phys. Rev. Lett. 120, 026801 (2018).
- 18. X. Ni, M. Weiner, A. Alu, and B. Khanikaev, Nature Mater. 18, 113 (2019).
- S. N. Kempkes, M. R. Slot, J. J. van den Broeke, P. Capoid, W. A. Benalcazar, D. Vanmaekelbergh, D. Cercioux, I. Swart, and C. M. Smith, Nature Mater. 18, 1292 (2019).
- 20. A. Yu. Kitaev, Phys. Usp. 44 (suppl), 131 (2001).

- 21. G. van Miert and C. Ortix, Quantum Mater. 5, 63 (2020).
- 22. M. Jung, Y. Yu, and G. Shvets, arXiv:2010.10299 (2020).
- 23. W. A. Benalcazar, T. Li, and T. L. Hughes, Phys. Rev. B 99, 245151 (2019).
- 24. M. Serina, D. Loss, and J. Klinovaja, Phys. Rev. B 98, 035419 (2018).
- **25**. А. Д. Федосеев, ЖЭТФ **155**, 138 (2019).
- **26**. В. В. Вальков, Письма в ЖЭТФ **111**, 772 (2020).
- 27. V. V. Val'kov, A. O. Zlotnikov, A. D. Fedoseev, and M. S. Shustin, J. Magn. Magn. Mat. 440, 37 (2017).
- 28. V. V. Val'kov, A. O. Zlotnikov, and M. S. Shustin, J. Magn. Magn. Mat. 459, 112 (2018).
- 29. A. M. Black-Schaffer and C. Honerkamp, J. Phys.: Condens. Matter 26, 423201 (2014).
- 30. M. Ezawa, Eur. Phys. J. B 85, 363 (2012).
- 31. T. Senthil, J. B. Marston, and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. B 60, 4245 (1999).
- 32. T. Chern, AIP Adv. 6, 085211 (2016).
- 33. D. J. Thouless, Phys. Rep. 13, 93 (1974).
- 34. N. C. Murphy, R. Wortis, and W. A. Atkinson, Phys. Rev. B 83, 184206 (2011).
- 35. M. Calixto and E. Romera, J. Stat. Mech. 2015, 06029 (2015).
- 36. A. D. Fedoseev, J. Phys.: Condens. Matter 32, 215301 (2020).
- 37. В. В. Вальков, В. А. Мицкан, М. С. Шустин, Письма в ЖЭТФ 106, 762 (2017).
- 38. В. В. Вальков, В. А. Мицкан, М. С. Шустин, ЖЭТФ 156, 507 (2019).

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЗВУКА В ОБЛАСТИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В МАГНИТОУПОРЯДОЧЕННУЮ ФАЗУ В СРЕДАХ С ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ СТРУКТУРОЙ

В. В. Меньшенин*

Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук 620108, Екатеринбург, Россия

> Поступила в редакцию 15 января 2021 г., после переработки 5 февраля 2021 г. Принята к публикации 6 февраля 2021 г.

Исследовано распространение продольных упругих волн вблизи фазового перехода из парамагнитной в несоизмеримую фазу в слоистых системах, имеющих тетрагональную структуру. На основе работы [22] сделан вывод о том, что фазовый переход второго рода возможен, если в кристалле отсутствуют сдвиговые деформации, а перенормировка параметров взаимодействия не меняет знака этих параметров в слагаемых действия, содержащих четвертые степени компонент параметра порядка. С помощью ренормгруппового подхода для продольных звуковых волн в направлении [100] найден степенной закон температурного изменения скорости звука в критической области, а также смещение положения точки минимума частоты (а значит, и скорости) этих волн относительно точки фазового перехода. Выяснены причины различного изменения скорости продольных звуковых волн при их распространении в направления [100], [110] и [001].

DOI: 10.31857/S0044451021070105

1. ВВЕДЕНИЕ

Распространение продольных звуковых волн вблизи точки фазового перехода второго рода изучается достаточно давно. Так, в работе Белова с соавторами [1] была построена феноменологическая теория распространения таких волн на основе теории Ландау-Халатникова [2]. В этой работе было показано, что пик изменения скорости звука и критического затухания имеют место при одной и той же температуре, а максимум затухания расположен ниже критической точки и зависит от частоты. Однако экспериментальные исследования продольного звука в соединении MnF₂ показали, что максимум затухания этих волн лежит несколько выше, чем температура Нееля, и нет изменения скорости упругой волны при температуре Нееля [3]. Другой подход, развивавшийся в работах Мори, основан на использовании стохастического уравнения Ланжевена для нормальной моды звуковых колебаний путем введения «случайной» силы,

которая действует на эту моду [4, 5]. При этом временной коррелятор случайной силы является гауссовым, а коэффициент затухания упругой волны пропорционален этому коррелятору. В работе [5] с учетом обменной стрикции в качестве механизма влияния магнитной подсистемы на упругие степени свободы были рассчитаны коэффициенты затухания продольных упругих волн вблизи температуры Нееля в соединении MnF₂ для направлений распространения волн [100], [001] и [110]. Были найдены зависимости коэффициентов затухания этих волн от температуры, констант обменного взаимодействия и волновых чисел соответствующих звуковых волн. Дальнейшее развитие этого направления привело к разработке теории описания критической динамики фазовых переходов второго рода, в рамках которой можно исследовать распространение звука вблизи таких переходов. Важное отличие этой теории от статического случая состоит в том, что необходимо принять во внимание уравнения движения стохастического типа. Эти уравнения должны быть необратимы относительно обращения времени, а значит, содержать диссипативные члены [6]. Появление этих членов связано со случайными

^{*} E-mail: menshenin@imp.uran.ru

тепловыми возбуждениями. Первоначально подход к рассмотрению критической динамики развивался подобно є-разложению в ренормгрупповом (РГ) подходе. Формально РГ-преобразование проводится в два этапа [7]. На первом этапе проводится исключение быстрых мод, а на втором этапе — изменение масштаба. Новое уравнение движения записывается в прежнем виде, но с новыми коэффициентами, которые представляют собой РГ-преобразование исходных коэффициентов. Однако далее было показано, что любая стохастическая задача может быть сведена к квантово-полевой модели с удвоенным числом переменных [8–11]. Тогда для вычисления корреляционных функций удается воспользоваться всем теоретико-полевым аппаратом РГ-анализа. На основе этого подхода в работе [12] анализировалось амплитудное соотношение для затухания звука выше и ниже критической точки для одноосного ферромагнетика. Работа [13] посвящена исследованию критического затухания ультразвука в изотропных системах. Обратим внимание на то, что большинство работ посвяшено критическому затуханию звуковых волн. В то же время вблизи точки перехода второго рода изменяется также и скорость продольных упругих волн. В работе [14] такое изменение скорости обнаружено в слоистом соединении FeGe2 вблизи точки перехода из парамагнитной фазы в несоизмеримую магнитную фазу. Скорости продольных упругих волн меняются различным образом для направлений распространения [100], [001], [110] волн [14, 15]. Причины такого различия в работах [14, 15] не обсуждаются. Представляет интерес обсудить эти причины. В работе [16] результаты по неупругому рассеянию нейтронов были использованы для определения закона дисперсии фононов в дигерманиде железа при температурах 300 К, 500 К, 650 К. Проведено вычисление с использованием теории функционала плотности в квазигармоническом приближении температурных смещений дисперсии фононов. Результаты расчетов оказались плохо согласующимися с экспериментальными данными.

2. СТАТИЧЕСКОЕ ДЕЙСТВИЕ

Наша задача состоит в изучении критической динамики распространения продольных звуковых волн вблизи перехода из парамагнитного состояния в несоизмеримую магнитную фазу. К таким системам относится, например, соединение FeGe₂. Проведем наше рассмотрение, исходя из данных, полученных для этого соединения. Пусть пространственная симметрия среды описывается группой $I4/mcm(D_{4h}^{18})$. Ионы железа занимают позицию 2a. Заметим, что далее везде работаем с примитивной ячейкой кристалла и рассматриваем для описания группы установку, данную в монографии Ковалева [17]. Волновой вектор несоизмеримой магнитной структуры равен

$$\mathbf{k} = \left\{ \frac{2\pi\mu}{\tau}, 0, 0 \right\},$$
$$2\mu \neq 0, \pm 1, \pm 2 \dots$$

Введем сначала переменные, описывающие нашу систему. Мы будем рассматривать длиннопериолическую магнитную структуру типа продольной спиновой волны. В этом случае, как показано в работе [18], магнитное состояние вблизи перехода описывается с помощью двумерного вектора $\mathbf{S} = \{S_1, S_2\},\$ где величины S₁ и S₂ есть аксиальные орты вдоль осей координат x и y в разложении плотности магнитного момента по базисным функциям неприводимого представления пространственной группы, по которому происходит переход из парамагнитной фазы в несоизмеримую магнитную фазу. Далее мы будем рассматривать модель С критической динамики [6]. Рассмотрим для определенности распространение звука вдоль направления [100]. В этом случае статическое действие системы можно записать по аналогии с работой [13] в виде

$$S^{st} = -\int \left\{ \frac{1}{2} r_0 (S_1^2 + S_2^2) + \frac{1}{2} (\partial_i S_1)^2 + \frac{1}{2} (\partial_i S_2)^2 + \frac{g_{10}}{24} (S_1^2 + S_1^2)^2 + \frac{g_{20}}{24} S_1^2 S_2^2 + \frac{1}{2} u^2 + \gamma_{u0} u (S_1^2 + S_2^2) + \frac{1}{2} s^2 + \gamma_{s0} s (S_1^2 + S_2^2) + wsu \right\} d^d x.$$
(1)

В равенстве (1) мы учли тетрагональную симметрию системы, величина u — звуковая переменная, пропорциональная флуктуациям плотности в системе [13], s — пропорциональна флуктуациям энтропии на единицу массы [13]. Величина d, указывающая размерность пространства, равна $d = 4 - 2\varepsilon$, $\varepsilon \ll 1$, $\partial_i = \partial/\partial x_i$, $r_0 = (T - T_{C0})$, T_{C0} — затравочная температура фазового перехода. В упомянутой статье авторы указали, что наличие слагаемых

$$\int \left(\frac{1}{2}u^2 + \frac{1}{2}s^2 + wus\right) d^dx$$

можно обосновать с помощью теории термодинамических флуктуаций. Возникновение этих слагаемых можно понять из следующих соображений. Как известно [19], вероятность флуктуации ξ для вывода тела из состояния равновесия при постоянных давлении и температуре пропорциональна

$$\xi \sim \exp\left(-\frac{\delta\Phi_{tot}}{T}\right),$$

где T — температура тела, а $\delta \Phi_{tot}$ — изменение термодинамического потенциала тела в целом. Далее при рассмотрении тела как некоторого числа подсистем, слабо взаимодействующих между собой, изменение термодинамического потенциала всего тела может быть представлено в виде

$$\Delta \Phi_{tot} = \int (\delta \Phi(x)) \, d^d x,$$

где интегрирование ведется по всему объему системы, а $\delta \Phi(x)$ — локальное изменение термодинамического потенциала одной из подсистем. Для этой подсистемы локальное изменение термодинамического потенциала при постоянных давлении и температуре равно минимальной работе, необходимой для того, чтобы перевести подсистему из одного состояние в другое обратимым образом. В нашем случае при распространении упругой волны выражение для минимальной работы имеет вид

$$R_{min} = \delta E(S_1, S_2, \nabla S_1, \nabla S_2, S, u_{11}) - T_0 \delta S - (\sigma_{11(0)}) \, \delta u_{11}, \quad (2)$$

где δE , δS , δu_{11} — изменение внутренней энергии, энтропии и тензора деформации подсистемы, индекс «0» указывает на то, что величины относятся к телу в целом. Раскладывая в ряд изменение внутренней энергии, сразу найдем, что линейные по изменениям δS , δu_{11} слагаемые в выражении (2) сокращаются, а первые производные по компонентам параметра порядка и их градиентам равны нулю. Выделяя в слагаемых второго порядка члены вида

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial S^2} \left(\delta S \right)^2 + 2 \frac{\partial^2 E}{\partial S \partial u_{11}} \, \delta S \delta u_{11} + \frac{\partial^2 E}{\partial u_{11}^2} \left(\delta u_{11} \right)^2 \right),$$

введем следующие обозначения:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial s^2} (\delta S)^2 = (s(x))^2, \quad \frac{\partial^2 E}{\partial u_{11}^2} (\delta u_{11})^2 = (u(x))^2,$$

а слагаемое $\frac{\partial^2 E}{\partial S \partial u_{11}} \delta S \delta u_{11}$ запишем следующим образом: wu(x)s(x). Следовательно, в выражении для термодинамического потенциала всей системы появятся слагаемые

$$\int \left(\frac{1}{2}s(x)^2 + \frac{1}{2}u(x)^2 + wu(x)s(x)\right) d^d x, \quad (3)$$

которые со знаком минус войдут и в статическое действие. Заметим, что величина u пропорциональна изменению объема, а значит, и плотности системы, т. е. не должна менять знака при пространственной инверсии. Отметим также, что и тензор деформации не меняет знака при смене знаков координат.

3. СТОХАСТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ И КВАНТОВО-ПОЛЕВАЯ МОДЕЛЬ

В этом случае взаимодействие параметра порядка со звуком вблизи фазового перехода описывается следующими стохастическими уравнениями [13]:

$$\frac{dS_i}{dt} = \lambda_0 \frac{\delta S^{st}}{\delta S_i} + \theta_i(\mathbf{x}, t),$$

$$\frac{ds}{dt} = -\kappa \Delta \frac{\delta S^{st}}{\delta s} + \theta_s(\mathbf{x}, t),$$

$$M\ddot{u} = -\Delta \frac{\delta S^{st}}{\delta u} + DM\Delta \dot{u} + \theta_u(\mathbf{x}, t).$$
(4)

Первое из уравнений (4) описывает релаксацию компонент параметра порядка с коэффициентом релаксации λ_0 . Второе уравнение описывает перенос энергии из-за диффузии, а коэффициент κ есть температурная проводимость. Последнее уравнение следует из стандартного уравнения движения звуковых волн. Величина M является обратным квадратом адиабатической скорости звука, D — константа затухания [13]. В уравнениях (4) величины θ_i , θ_s , θ_u играют роль «случайных» сил. Средние значения этих сил равны нулю, а для их корреляторов выполняются соотношения [6,13]

$$\langle \theta_i(\mathbf{x}, t)\theta_j(\mathbf{x}', t')\rangle = 2\lambda_0 \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(t - t')\delta_{ij},$$

$$\langle \theta_s(\mathbf{x}, t)\theta_s(\mathbf{x}', t')\rangle = -2\kappa \nabla^2 \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(t - t'), \quad (5)$$

$$\langle \theta_u(\mathbf{x}, t)\theta_u(\mathbf{x}', t')\rangle = 2DM \nabla^4 \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(t - t').$$

Эту стохастическую модель можно свести к рассмотрению некоторой квантово-полевой модели. Можно показать [20], что стохастическая модель полностью эквивалентна квантово-полевой модели с удвоенным числом полей, а именно S_i , \tilde{S}_i , (i = 1, 2), $s, \tilde{s}, u, \tilde{u}$. Функционал действия в этом случае имеет вид

$$S = \iint d^{d}x \, dt \left[\tilde{S}_{1}(\mathbf{x}, t)\lambda_{0}\tilde{S}_{1}(\mathbf{x}, t) + \tilde{S}_{2}(\mathbf{x}, t)\lambda_{0}\tilde{S}_{2}(\mathbf{x}, t) - \tilde{S}_{1} \left[\frac{\partial S_{1}}{\partial t} - \lambda_{0}\frac{\delta S^{st}}{\delta S_{1}} \right] - \tilde{S}_{2} \left[\frac{\partial S_{2}}{\partial t} - \lambda_{0}\frac{\delta S^{st}}{\delta S_{2}} \right] + \tilde{u}DM\nabla^{4}\tilde{u} - \tilde{s}\kappa\Delta\tilde{s} - \tilde{u} \left[M\frac{\partial^{2}u}{\partial t^{2}} + \Delta\frac{\delta S^{st}}{\delta u} - DM\Delta\frac{\partial u}{\partial t} \right] - \tilde{s} \left[\frac{\partial s}{\partial t} + \kappa\Delta\frac{\delta S^{st}}{\delta s} \right] \right]. \quad (6)$$

Переход к квантово-полевой модели позволяет в полной мере использовать методы теории поля для анализа нашей модели. Это означает, что функции Грина стохастической задачи можно вычислять с помощью обычных функций Грина модели (6), которые определяются производящим функционалом [20]

$$G(J) = \int DS_1 DS_2 D\tilde{S}_1 D\tilde{S}_2 Ds D\tilde{s} Du D\tilde{u} \times \\ \times \exp\left(S + J_{\varphi}\varphi + J_{\tilde{\varphi}}\tilde{\varphi}\right), \quad (7)$$

где $\varphi = (S_1, S_2, s, u), \ \tilde{\varphi} = (\tilde{S}_1, \tilde{S}_2, \tilde{s}, \tilde{u}),$ по ним проводится суммирование, $J_{\varphi}, \ J_{\tilde{\varphi}}$ — источники соответствующих полей, кроме того, в последних двух слагаемых под знаком экспоненты проводится интегрирование по пространственным и временным аргументам. Обеспечивающий нормировку G(0) = 1множитель включен в величину $DS_1 \dots D\tilde{u}$.

Вычислим входящие в равенство (6) вариационные производные и подставим их в это равенство. Тогда выражение (6) можно представить в виде суммы двух слагаемых:

$$S = \int d^d x \, dt (S_0(\mathbf{x}, t)) + V(\varphi(\mathbf{x}, t), \tilde{\varphi}(\mathbf{x}, t)), \qquad (8)$$

где первое слагаемое в равенстве (8) — часть действия, квадратичная по динамическим переменным, а второе слагаемое описывает взаимодействие этих полей. Далее удобно провести сдвиги на константы, которые позволяют исключить из рассмотрения линейные по источникам слагаемые в производящем функционале (7). Покажем это на примере суммы слагаемых [20]

$$A_1 = \tilde{S}_1 \lambda_0 \tilde{S}_1 - \tilde{S}_1 \left[\frac{\partial}{\partial t} + \lambda_0 (r_0 - \Delta) \right] S_1 + J_{S_1} S_1 + J_{\tilde{S}_1} \tilde{S}_1, \quad (9)$$

В равенстве (9) предполагается интегрирование по временным и пространственным координатам. Обозначая $\lambda_0 = D/2$, первые два слагаемых запишем в виде

$$\tilde{S}_1 \lambda_0 \tilde{S}_1 - \tilde{S}_1 \left[\frac{\partial}{\partial t} + \lambda_0 (r_0 - \Delta) \right] S_1 = -LKL^T / 2, \quad (10)$$

где $L = (S_1, \tilde{S}_1)$, оператор K равен

$$\begin{bmatrix} 0 & (\partial_t + \lambda_0 [r_0 - \Delta]^T) \\ (\partial_t + \lambda_0 [r_0 - \Delta]) & -D \end{bmatrix},$$

а знак T означает транспонирование. Для такой блочной матрицы с симметричной операцией $D = D^T$ обратный оператор $\Delta^{(S)} = K^{-1}$ записывается в виде [20]

$$\Delta^{(S)} = \begin{bmatrix} \Delta_{12}^{(S)} D \Delta_{21}^{(s)} & \Delta_{12}^{(S)} \\ \Delta_{21}^{(S)} & 0 \end{bmatrix},$$
(11)

где

$$\Delta_{12}^{(S)} = (\partial_t + \lambda_0 [r_0 - \Delta])^{-1},$$

$$\Delta_{21}^{(S)} = [(\partial_t + \lambda_0 [r_0 - \Delta])^T]^{-1}.$$
(12)

Введем далее обозначение

$$\Delta_{11}^{(S)} = \Delta_{12}^{(S)} D \Delta_{21}^{(S)}, \tag{13}$$

при этом

$$(\partial_t + \lambda_0 [r_0 - \Delta])^T = (-\partial_t + \lambda_0 [r_0 - \Delta]).$$
(14)

Тогда запаздывающая функция Грина $\Delta_{12}^{(S)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t')$ линейного оператора $L = = \partial_t + \lambda_0 [r_0 - \Delta]$ является затравочным коррелятором вида

$$\Delta_{12}^{(S)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') = \langle S_1(\mathbf{x}, t)\tilde{S}_1(\mathbf{x}', t') \rangle_0, \qquad (15)$$

а опережающая функция Грина равна

$$\Delta_{21}^{(S)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') = \langle \tilde{S}_1(\mathbf{x}, t) S_1(\mathbf{x}', t') \rangle_0.$$
(16)

Линейному оператору $-D\delta(x-x')$ соответствует функция Грина

$$\Delta_{11}^{(S)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') = \langle S_1(\mathbf{x}, t) S_1(\mathbf{x}', t') \rangle_0.$$
(17)

Понятно, что в общем случае имеем

$$\langle S_i S_j \rangle = \langle S_i S_i \rangle \delta_{ij}, \langle S_i S_j \rangle = \langle S_i S_i \rangle \delta_{ij}, \langle \tilde{S}_i \tilde{S}_j \rangle = 0.$$
 (18)

Заменой переменных вида

$$L = y + J_S K^{-1}$$

где вектор-строка

$$J_S = \begin{pmatrix} J_S & J_{\tilde{S}_1} \end{pmatrix},$$

величина

$$A_1 = -\frac{LKL^T}{2} + J_S L^T$$

приводится к виду

$$A_1 = -\frac{yKy^T}{2} + \frac{J_SK^{-1}J_S^T}{2}.$$

Подчеркнем еще раз, что в последнем соотношении ядро K^{-1} имеет смысл функций Грина линейной задачи $KL = J_s$ [20]. По переменным y интегралы оказываются гауссовыми и могут быть вычислены точно. Переменные набора $\{u, \tilde{u}, s, \tilde{s}\}$ связаны между собой билинейными слагаемыми в действии. Поэтому процедура избавления от линейных по этим полям слагаемых с источниками аналогична рассмотренной выше. В этом случае оператор K_1 имеет вид

$$K_1 = \begin{bmatrix} 0 & a & 0 & k \\ b & c & n & 0 \\ 0 & n & 0 & d \\ k & 0 & l & q \end{bmatrix},$$

где

$$a = \left[M \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta - DM\Delta \frac{\partial}{\partial t} \right]^T,$$

$$b = \left[M \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta - DM\Delta \frac{\partial}{\partial t} \right],$$

$$c = -2DM\nabla^4, \quad k = -w\kappa\Delta,$$

$$d = \left[\frac{\partial}{\partial t} - \kappa\Delta \right]^T, \quad l = \left[\frac{\partial}{\partial t} - \kappa\Delta \right],$$

$$n = -w\Delta, \quad q = 2\kappa\Delta.$$

(19)

Выражение для обратной матрицы можно представить следующим образом:

$$(K_1^{-1})_{11} = \Delta_1^{-1}(-cdl - nq^2),$$

$$(K_1^{-1})_{12} = \Delta_1^{-1}l(ad - kn),$$

$$(K_1^{-1})_{13} = \Delta_1^{-1}(ckl + anq),$$

$$(K_1^{-1})_{14} = \Delta_1^{-1}(-dan + kn^2),$$

(20)

$$(K_1^{-1})_{21} = \Delta_1^{-1} d(bl - kn),$$

$$(K_1^{-1})_{22} = (K_1^{-1})_{24} = 0,$$

$$(K_1^{-1})_{22} = \Delta_1^{-1} n(-bl + k^2).$$

(21)

$$(K_1^{-1})_{31} = \Delta_1^{-1}(cdk + bnq),$$

$$(K_1^{-1})_{32} = \Delta_1^{-1}k(-ad + kn),$$

$$(K_1^{-1})_{32} = \Delta_1^{-1} k(-aa + kn),$$

$$(K_1^{-1})_{33} = \Delta_1^{-1} (-ck^2 - abq),$$

$$(K_1^{-1})_{34} = \Delta_1^{-1} b(-ad - kn),$$

$$(K_1^{-1})_{34} = \Delta_1^{-1} (-ad - kn),$$

$$(K_1^{-1})_{34} = \Delta_1^{-1} (-ad - kn),$$

$$(K_1^{-1})_{34} = \Delta_1^{-1} (-ad - kn),$$

$$(K_1^{-1})_{41} = \Delta_1^{-1} n(-bl + kn),$$

$$(K_1^{-1})_{42} = (K_1^{-1})_{44} = 0,$$

$$(K_1^{-1})_{43} = \Delta_1^{-1} a(bl - kn),$$

(23)

$$\Delta_1 = (ad - kn)(bl - kn). \tag{24}$$

В равенствах (20)–(23) обратная матрица K^{-1} записана поэлементно. В частности,

$$\Delta_{12} = (K_1^{-1})_{12} = l(bl - kn)^{-1} = \\ = \left(\left[M \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta - DM \Delta \frac{\partial}{\partial t} \right] - \\ - kw^2 \Delta^2 \left(\frac{\partial}{\partial t} - \kappa \Delta \right)^{-1} \right)^{-1}. \quad (25)$$

Фурье-образ функции Грина $\Delta_{12}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t')$ имеет вид

$$\Delta_{12}(\mathbf{p},\omega) = \left(-M\omega^2 + p^2 \left[1 - \frac{\kappa w^2 p^2}{\kappa p^2 - i\omega}\right] - DMp^2 i\omega\right)^{-1}.$$
 (26)

Отметим еще раз, что в нашем случае набора переменных $(u, \tilde{u}, s, \tilde{s})$ выражениям (25), (26) соответствуют именно функции Грина $\langle u\tilde{u}\rangle_0$. В работе [13] эта функция обозначена как $\langle \tilde{u}u\rangle_0$.

После исключения в производящем функционале слагаемых, линейных по динамическим переменным, равенство (7) может быть представлено в виде

$$G(J) = N^{-1} \times$$

$$\exp\left(-\int d^{d}x \, dt \, V\left[\frac{\delta}{\delta J_{S_{1}}}, \dots, \frac{\delta}{\delta J_{u}}, \frac{\delta}{\delta J_{\tilde{u}}}, \dots, \frac{\delta}{\delta J_{\tilde{S}_{1}}}\right]\right) \times$$

$$\times \exp\left[\frac{1}{2} \int d^{d}x_{1} d^{d}x_{2} dt_{1} dt_{2} J_{i}(\mathbf{x}_{1}, t_{1}) \times$$

$$\times \Delta_{ij}^{(S)}(\mathbf{x}_{1} - \mathbf{x}_{2}, t_{1} - t_{2}) J_{j}(\mathbf{x}_{2} - t_{2})\right] \times$$

$$\times \exp\left(\frac{1}{2} \int d^{d}x_{1} d^{d}x_{2} dt_{1} dt_{2} J_{k}(\mathbf{x}_{1}, t_{1}) \times$$

$$\times \Delta_{kl}(\mathbf{x}_{1} - \mathbf{x}_{2}, t_{1} - t_{2}) J_{l}(\mathbf{x}_{2}, t_{2})\right). \quad (27)$$

В равенстве (27) индексы *i*, *j* пробегают значения $\{S_1, S_2, \tilde{S}_1, \tilde{S}_2\}$ с учетом равенств (18), индексы *k*, l — значения $\{u, \tilde{u}, s, \tilde{s}\}$ с учетом того, что функции Грина $\langle \tilde{u}\tilde{u} \rangle, \langle \tilde{s}\tilde{s} \rangle, \langle \tilde{u}\tilde{s} \rangle, \langle \tilde{s}\tilde{u} \rangle$ равны нулю, а по повторяющимся индексам проводится суммирование, *N* определяется из условия нормировки G(J = 0) = 1 и обычно опускается. Здесь следует сделать следующее замечание. В выражение для той части действия, которая учитывает взаимодействие полей, входят композитные операторы вида $\tilde{S}_i S_i$ и $S_i S_i$. При проведении расчетов мы рассматривали входящие в них операторы как отдельные операторы, но обладающие одинаковыми координатами.

×

4. ФОНОННЫЙ ОКЛИК

Рассмотрим функцию Грина $\langle u(\mathbf{x}, t_x)\tilde{u}(\mathbf{y}, t_y)\rangle$, где среднее означает усреднение с плотностью вероятности в конфигурационном пространстве равной $\exp(S)$, где S — действие. Эта функция получается из генерирующего функционала следующим образом:

$$G^{(u)} = \langle u(\mathbf{x}, t_x) \tilde{u}(\mathbf{y}, t_y) \rangle =$$

= $\frac{\delta}{\delta J_u} (\mathbf{x}, t_x) \frac{\delta}{\delta J_{\tilde{u}}} (\mathbf{y}, t_y) G(J)_{|J=0}.$ (28)

Далее рассматриваются только связные диаграммы [21]. Записывая функцию $G^{(u)}$ в виде

$$G^{(u)} = G_0^{(u)} + G_0^{(u)} \Sigma G^{(u)},$$

где $G_0^{(u)}$ — невозмущенная функция Грина, Σ — собственно-энергетическая часть, вычислим исходя из (28) последнюю величину во втором порядке по теории возмущений. В этом приближении фурьеобраз $\Sigma(\mathbf{p}, \omega)$ записывается следующим образом:

$$\Sigma(\mathbf{p},\omega) = 8 \left\{ \gamma_{u0}^2 \lambda_0 p^2 + \frac{\lambda_0 \gamma_{s0}^2 \kappa^2 w^2 p^6}{[-i\omega + \kappa p^2]^2} - \frac{\lambda_0 \gamma_{u0} \gamma_{s0} \kappa w p^4}{[-i\omega + \kappa p^2]} \right\} \times \int \frac{d^d p_1 d\omega_1}{[2\pi]^{d+1}} \Delta_{12}^{(S)}(\mathbf{p}_1,\omega_1) \Delta_{11}^{(S)}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p},\omega_1 - \omega).$$
(29)

Заметим теперь, что интеграл в равенстве (29) есть фурье-преобразование величины

$$\Delta_{12}^{(S)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t')\Delta_{11}^{(S)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t').$$

Оказывается, что интеграл в (29) проще считать, вычисляя это фурье-преобразование. В координатном пространстве функции $\Delta_{12}^{(S)}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'', t' - t''),$ $\Delta_{11}^{(S)}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'', t' - t'')$ равны

$$\Delta_{12}^{(S)}(\mathbf{x},t) = \frac{1}{(4\pi)^{d/2} (\lambda_0 t)^{d/2}} \times \\ \times \theta(t) \exp\left[-\lambda_0 r_0 t - \frac{(|x|)^2}{4\lambda_0 t}\right], \quad (30)$$

$$\Delta_{11}^{(S)}(\mathbf{x},t) = \frac{\exp[-\lambda_0 r_0|t|]}{(2\pi)^{d/2}|x|^{-1+d/2}} \times \\ \times \int_0^\infty dk \, k^{d/2} J_{1+d/2}(k|x|) \frac{\exp[-\lambda_0 k^2|t|]}{(r_0+k^2)}, \quad (31)$$

где $\mathbf{x} = \mathbf{x}' - \mathbf{x}'', t = t' - t''$. В равенствах (30), (31) $\theta(t)$ — тэта-функция Хэвисайда, $J_{\nu}(x)$ — функция Бесселя. Подставим эти выражения в интеграл

$$I = \int d^d x \, dt \times \\ \times \exp[i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - i\omega t] \Delta_{12}^{(S)}(\mathbf{x}, t) \Delta_{11}^{(S)}(\mathbf{x}, t). \quad (32)$$

Примем теперь во внимание следующее равенство:

$$\int_{0}^{\infty} dq \, q^{d/2} J_{-1+d/2}(q|x|) \frac{\exp[-\lambda_0 t q^2]}{(r_0 + q^2)} = \\ = \frac{1}{2} \left(\frac{|x|r_0}{2}\right)^{-1+d/2} \exp[\lambda_0 r_0|t|] \times \\ \times \left[\left(|x|^2 \frac{r_0}{4}\right)^{(2-d)/4} I_{-1+d/2}(|x|\sqrt{r_0}) \times \right] \\ \times \Gamma\left(1 - \frac{d}{2}\right) \Gamma\left(\frac{d}{2}\right) - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \left(|x|^2 \frac{r_0}{4}\right)^n \times \\ \times \gamma\left(1 - n - \frac{d}{2}, \lambda_0 r_0 t\right) \right], \quad (33)$$

где $I_{\nu}(x)$ — модифицированная функция Бесселя, $\gamma(a,x)$ — неполная гамма-функция. Тогда интеграл (32) равен

$$I = \frac{(r_0)^{-1+d/2}\lambda_0\Gamma(1-d/2)\Gamma(d/2)}{(2)^{1+d/2}(2\pi)^{d/2}(-i\omega+\lambda_0p^2)^2} \times \\ \times_1 F_1\left(2,\frac{d}{2},-\frac{p^2\lambda_0^2r_0}{p^2\lambda_0-i\omega}\right). \quad (34)$$

В равенстве (34) величина ${}_{1}F_{1}(a, b, x)$ есть функция Кумера, $\Gamma(x)$ — гамма-функция. Отметим, что слагаемые, которые возникают от интегралов с неполной гамма-функцией, оказываются равными нулю.

5. О ВОЗМОЖНОСТИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ВТОРОГО РОДА

Влияние решеточных степеней свободы на тип фазового перехода рассматривалось ранее различными авторами. Так, в работе [22] на примере упруго-изотропного сегнетоэлектрика было показано, что наличие сдвиговых напряжений и акустических волн приводит к реализации фазового перехода первого рода, близкого ко второму. Этот вывод справедлив и для модели Изинга. В монографии [23] для магнитного перехода в ферромагнитное состояние в простой модели учета обменострикции как функции относительного объема системы также анализировалась возможность изменения типа фазового перехода. В этой модели происходит изменение термодинамического потенциала, приводящее к уменьшению коэффициента при четвертой степени параметра порядка. Смена знака этого коэффициента нарушает условие существования перехода второго рода.

Вернемся к нашей модели. Действие в квантовополевой теории ренормгруппы выбирается безразмерным в канонической размерности [20]. Поэтому все слагаемые, входящие в действие, должны быть безразмерными величинами. Величина $\beta_c = 1/T_C$ обычно не пишется, так как ее убирают подходящим растяжением переменных действия. Всем переменным можно приписать канонические размерности, определив их из требования безразмерности каждого из вкладов в действие. В статическом случае должна соблюдаться инвариантность относительно растяжения всех величин и координаты (импульса) [20]. В динамике существуют два независимых преобразования масштабов, в одном из которых, как и в статическом случае, растягиваются величины и координаты (импульс), а во втором — величины и время (частота). Поэтому любая величина обладает двумя независимыми каноническими размерностями, а именно: импульсной d_F^p , где d — обозначение канонической размерности, F — величина, для которой она определяется (индекс р указывает на импульсную размерность), и частотной d_{F}^{ω} , где индекс «*ω*» указывает на частотную размерность. Сейчас действие должно быть инвариантным относительно общего масштабного преобразования, в котором одновременно и согласованно растягиваются все времена и координаты (или частоты и импульсы). Тогда общие канонические размерности d_F для каждой величины F определяются соотношениями [20]

$$d_F = d_F^p + \Delta_\omega d_F^\omega, \, \omega \sim p^{\Delta_\omega}. \tag{35}$$

Обратимся теперь к той части динамического действия, которая описывает взаимодействие в системе и характеризуется внешним параметром е. Если $d_e \geq 0$, то взаимодействие оказывается (инфракрасно) существенным и должно приниматься во внимание при исследовании фазового перехода. Если $d_e < 0$, то взаимодействие с этим внешним параметром необходимо отбросить. Отсюда следует, что в модели, описывающей критическую динамику, все инфракрасные несущественные вклады должны быть отброшены, в том числе и в свободной части действия [20]. В рассматриваемой модели величина $\Delta_{\omega} \approx 2$. Можно показать, что действие (6) является мультипликативно ренормируемым и для него имеем $d_M = 2 - 2\Delta_\omega, d_{DM} = -2\Delta_\omega$, что совпадает с результатами в [13]. Таким образом, в динамическом действии должны быть опущены слагаемые, пропорциональные коэффициентам М и DM. Формально это означает, что продольные колебания решетки при исследовании фазового перехода несущественны. Ниже уточним этот вывод. В этом случае неренормированное действие запишется в виде

$$S_{c} = \int d^{d}x \, dt (\tilde{S}_{1}\lambda_{0}\tilde{S}_{1} - \tilde{S}_{1}[\dot{S}_{1} + \lambda_{0}([r_{0} - \Delta]S_{1} + \frac{g_{10} - 12\gamma_{u0}^{2}}{6}(S_{1}^{2} + S_{2}^{2})S_{1} + \frac{g_{20}}{12}S_{1}S_{2}^{2} + 2(\gamma_{s0} - w\gamma_{u0})sS_{1})] + \tilde{S}_{2}\lambda_{0}\tilde{S}_{2} - \tilde{S}_{2}\left[\dot{S}_{2} + \lambda_{0}([r_{0} - \Delta]S_{2} + \frac{g_{10} - 12\gamma_{u0}^{2}}{6}(S_{1}^{2} + S_{2}^{2})S_{2} + \frac{g_{20}}{12}S_{1}^{2}S_{2} + 2(\gamma_{s0} - w\gamma_{u0})sS_{2})\right] - \tilde{s}\kappa\Delta\tilde{s} - \tilde{s}[\dot{s} + \kappa\Delta(1 - w^{2})s + (\gamma_{s0} - w\gamma_{u0})(S_{1}^{2} + S_{2}^{2})]). \quad (36)$$

Обратим внимание на то, что имеет место перенормировка константы взаимодействия g_{10} . Фазовый переход второго рода может иметь место только в том случае, если выполняется неравенство

$$\gamma_{10} - 12\gamma_{u0}^2 > 0. \tag{37}$$

Следовательно, при наличии обменной стрикции и в отсутствие сдвиговых напряжений могут возникнуть условия для реализации перехода первого рода, если неравенство (37) будет противоположным. Таким образом, в рассматриваемой модели, описывающей звуковые волны в области фазового перехода второго рода, должно выполняться неравенство (37) и отсутствовать сдвиговые напряжения в системе.

При записи производящего функционала для функций Грина с действием (36) нужно принять во внимание, что невозмущенные функции Грина $\Delta_{12}^{(S)}$ и $\Delta_{11}^{(S)}$ имеют тот же вид, что и раньше, а для функций $\langle s\tilde{s} \rangle_0$ и $\langle ss \rangle_0$ получим следующие выражения:

$$\langle s\tilde{s} \rangle_0 = \left(\frac{\partial}{\partial t} + (1 - w^2)\kappa\Delta \right)^{-1}, \langle ss \rangle_0 = \left(\frac{\partial}{\partial t} + (1 - w^2)\kappa\Delta \right)^{-1} \times \times 2\kappa\Delta \left(\frac{\partial}{\partial t} + (1 - w^2)\kappa\Delta \right)^{-1T}.$$
 (38)

6. РЕНОРМГРУППОВОЕ УРАВНЕНИЕ

Нас интересует критическое поведение величины I (34), полученное на основе действия (6). Однако в предыдущем разделе было показано, что слагаемые, содержащие упругие переменные, не влияют на фазовый переход. Поэтому исследование критического

поведения различных функций Грина нужно проводить на основе базового действия S_{cB} [20]. Оно получается из (36) заменой величины $r_0 = (T - T_{C0})$ на $r = (T - T_C)$ (где T_C — температура перехода, наблюдаемая экспериментально), величины λ_0 на ее ренормированное значение λ , а также заменой неренормированных параметров взаимодействия $g_{i0}i = 1, 2$ на параметры $g_{iB} = g_i \mu^{2\varepsilon}$ (где $g_i - g_i \mu^{2\varepsilon}$ ренормированные параметры, μ — затравочная масса) и $\gamma_{i0}(j = s, u)$ — на величины $\gamma_{iB} = \gamma_i \mu^{\varepsilon}$. Выражение для I содержит полюс относительно малой величины є. Поэтому необходимо ренормировать эту величину для исключения расходимости. Выше уже указывалось, что действие (6) является мультипликативно ренормируемым. Следовательно, мы можем работать в схеме с минимальными вычитаниями [20]. Поэтому в рассматриваемом приближении ренормировка I сводится просто к вычитанию из нее полюсной части. В этом случае ренормированная величина I_R записывается следующим образом:

$$I_R = \frac{r\lambda}{2^3(2\pi)^2} [\ln r - \ln 4\pi] \times \\ \times \frac{\Gamma(2)}{(\lambda p^2 - i\omega)^2} \exp\left(\frac{-p^2\lambda^2 r}{\lambda p^2 - i\omega}\right). \quad (39)$$

В равенстве (39) отброшены малые слагаемые, пропорциональные степеням ε^n с n > 1, а также принята во внимание только экспоненциальная часть функции Кумера, не зависящая от этого малого параметра. Заметим, что по аналогии с получением базового действия проведена замена неренормированных параметров r_0 , λ_0 на их ренормированные значения r, λ . Функция I_R получена нами в однопетлевом приближении и не содержит констант взаимодействия $g_{1B}, g_{2B}, \gamma_{uB}, \gamma_{sB}$. Фактически нужно исследовать критическое поведение функции $\langle S_i(\mathbf{x},t)S_i(\mathbf{x},t)S_j(\mathbf{y},t')S_j(\mathbf{y},t')\rangle$. Формально исследуется поведение этой функции, когда спиновые индексы одинаковы и равны, скажем, индексу i = 1. Наличие других компонент учитывается симметрийными множителями. Так, в однопетлевом приближении этот множитель равен

$$B = (g_{1B} - 12\gamma_{uB}^2) \left(\frac{10}{3} + \frac{2\alpha}{3}\right) + g_{2B}(g_{1B} - 12\gamma_{uB}^2)\frac{12 + 4\alpha}{2}, \qquad (40)$$
$$\alpha = \frac{g_{2B}}{2(g_{1B} - 12\gamma_{uB}^2)}.$$

Поэтому исследуем ренормгрупповое уравнение для такого коррелятора. Для этого рассмотЖЭТФ, том **160**, вып. 1 (7), 2021

рим связную ренормированную функцию Грина $W_R^{(\tilde{M}M\tilde{N}N)}(p,\omega,g_1,g_2,r,\lambda,\mu)$.В этой функции имеется \tilde{M} вставок типа $\tilde{S}S$, M вставок типа SS, \tilde{N} сомножителей \tilde{S} и N сомножителей S. Мы опустили индексы у спиновых переменных, поскольку, как указано выше, все индексы равны единице. Величины g_1, g_2, r, λ являются ренормированными. Тогда ренормгрупповое уравнение для функции $W_R^{(\tilde{M}M\tilde{N}N)}(p,\omega,g_1,g_2,r,\lambda,\mu)$ записывается в виде

$$\begin{bmatrix} \mu \frac{\partial}{\partial \mu} + \beta_1(g_1) \frac{\partial}{\partial g_1} + \beta_2(g_2) \frac{\partial}{\partial g_2} - \\ -\gamma_r r \frac{\partial}{\partial r} - \gamma_\lambda \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} + N\gamma_S + \tilde{N}\gamma_{\tilde{S}} - M\gamma_{S^2} - \tilde{M}\gamma_{(\tilde{S}S)} \end{bmatrix} \times \\ \times W_R^{(\tilde{M}M\tilde{N}N)}(p,\omega,g_1,g_2,r,\lambda,\mu) = 0.$$
(41)

В равенстве (41) параметры $\gamma_i (i = r, S, \tilde{S}, S^2, \tilde{S}S)$ есть аномальные размерности [20] величин, приведенных в скобках, $\beta_j (j = 1, 2)$ — бета-функции соответствующих ренормированных зарядов $g_{1,2}$. Они связаны с неренормированными зарядами g_{10}, g_{20} соотношениями [20]

$$g_{i0} = g_i \mu^{2\varepsilon} Z_{g_i}, \quad i = 1, 2,$$
 (42)

где μ — затравочная масса, Z_{g_i} , (i = 1, 2) — константы ренормировки зарядов [20]. Нас будет интересовать функция $W_R^{(\tilde{M}M\tilde{N}N)}$ непосредственно в критической точке фазового перехода, в которой обращаются в нуль коэффициенты $\beta_1(g_1)$, $\beta_2(g_2)$. Обозначим значения ренормированных констант взаимодействия в точке перехода как g_1^* , g_2^* . Используя метод получения уравнения в критической точке [20], получим следующее ренормгрупповое уравнение для искомой ренормированной функции W:

$$\begin{bmatrix} p\frac{\partial}{\partial p} + \Delta_{\omega}\omega\frac{\partial}{\partial\omega} + \Delta_{r}r\frac{\partial}{\partial r} - \tilde{N}\Delta_{\tilde{S}} - N\Delta_{S} + M\Delta_{S^{2}} + \\ + \tilde{M}\Delta_{(\tilde{S}S)} \end{bmatrix} W_{R}^{(\tilde{M}M\tilde{N}N)}(p,\omega,g_{1}^{*},g_{2}^{*},r,\lambda,\mu) = 0, \quad (43)$$

где $\Delta_i = d_i + \gamma_i^*$. В последнем равенстве аномальная размерность γ_i^* получается путем подстановки в ее выражение величин g_1^*, g_2^* . Обратим внимание на следующее обстоятельство. Критическая размерность Δ_{λ} обращается в нуль [20]. Поэтому в уравнении (43) отсутствует слагаемое с производной ∂_{λ} .В результате возникает связь между аномальной размерностью γ_{λ}^* в критической точке и критической размерностью Δ_{ω} вида [20]

$$\Delta_{\omega} = -(d_{\lambda}^p + \gamma_{\lambda}^*)/d_{\lambda}^{\omega},$$

при этом $d^p_{\lambda} = -2, \, d^{\omega}_{\lambda} = 1.$

Ведем также безразмерные переменные

$$\frac{p}{\mu} = \zeta, \quad \frac{r}{\mu^2} = z, \quad \frac{\omega}{\lambda\mu^2} = q.$$
 (44)

В этих безразмерных переменных уравнение (43) можно записать в виде

$$\begin{bmatrix} -\zeta \frac{\partial}{\partial \zeta} - \Delta_r z \frac{\partial}{\partial z} - \Delta_\omega q \frac{\partial}{\partial q} + \\ + N \Delta_S + \tilde{N} \Delta_{\tilde{S}} - M \Delta_{S^2} - \tilde{M} \Delta_{(\tilde{S}S)} \end{bmatrix} \times \\ \times W_R^{\prime(\tilde{M}M\tilde{N}N)}(\zeta, z, q, g_1^*, g_2^*) = 0.$$
(45)

Штрих у ренормированной функции W означает, что она записана через безразмерные переменные. Решение уравнения (45) имеет вид

$$W_{R}^{\prime(MMNN)}(\zeta, z, q, g_{1}^{*}, g_{2}^{*}) =$$

$$= W_{R}^{\prime(\tilde{M}\tilde{M}\tilde{N}N)}(1, z\zeta^{-\Delta_{r}}, q\zeta^{-\Delta_{\omega}}, g_{1}^{*}, g_{2}^{*}) \times$$

$$\times \exp\left[\int_{0}^{\zeta} \frac{dt}{t} (N\Delta_{S} + \tilde{N}\Delta\tilde{S} - M\Delta_{S^{2}} - \tilde{M}\Delta_{(\tilde{S}S)})\right]. \quad (46)$$

В равенстве (46) параметр t — переменная интегрирования, от которой критические размерности Δ_i под знаком интеграла не зависят. В интересующем нас случае будем иметь

$$W_{R}^{\prime(1100)}(\zeta, z, q, g_{1}^{*}, g_{2}^{*}) =$$

$$= W_{R}^{\prime(\tilde{1}100)}\left(1, \frac{r}{\mu^{2}}\left(\frac{p}{\mu}\right)^{-1/\nu}, \frac{\omega}{\lambda\mu^{2}}\left(\frac{p}{\mu}\right)^{-\Delta\omega}, g_{1}^{*}, g_{2}^{*}\right) \times$$

$$\times \left(\frac{p}{\mu}\right)^{-(2d-2/\nu+\Delta\omega)}. \quad (47)$$

В правой части уравнения (47) принято во внимание, что критическая размерность Δ_r величины r = $= T - T_C$, где T_C — истинная температура перехода, не меняется при переходе от статики к динамике [20], т.е. равна $1/\nu$. Аномальная размерность вставки S^2 есть $2 - 1/\nu$ [24]. Размерность компоненты параметра порядка d_S равна d/2 - 1 [13, 20]. Таким образом, критическая размерность Δ_{S^2} равна $d - 1/\nu$. Размерность $d_{\tilde{S}} = d/2 + 1$. Следовательно, $d_{(\tilde{S}S)} = d$. Из данных работы [13] можно получить следующее соотношение для аномальных размерностей: $\gamma_{(\tilde{S}S)} = -\gamma_r - \gamma_\lambda$. В этом случае

$$\gamma^*_{(\tilde{S}S)} = \Delta_\omega - 1/\nu,$$

а критическая размерность

$$\Delta_{(\tilde{S}S)} = d + \Delta_{\omega} - 1/\nu$$

В результате в последнем сомножителе в правой части уравнения (47) и возникает указанный показатель степени. В монографии [20] сформулировано утверждение, что нетривиальный критический скейлинг характеризуется таким асимптотическим поведением, в котором аргументы скейлинговой функции

$$W_R^{\prime(\tilde{1}100)}\left(1, \frac{r}{\mu^2}\left(\frac{p}{\mu}\right)^{-1/\nu} \frac{\omega}{\lambda\mu^2}\left(\frac{p}{\mu}\right)^{-\Delta_\omega}, g_1^*, g_2^*\right)$$

оказываются величинами порядка (или меньше) единицы, что приводит к взаимно согласованной малости переменных p, r, ω :

$$p \to 0, \quad r \sim p^{1/\nu}, \quad \omega \sim p^{\Delta_\omega}.$$
 (48)

Интересно рассмотреть случай, когда к нулю стремится величина $r = (T - T_C)$. В этой ситуации величину $W_R^{\prime(\tilde{1}100)}(\zeta, z, q, g_1^*, g_2^*)$ запишем в несколько ином виде:

.~

$$W_{R}^{\prime(1100)}(\zeta, z, q, g_{1}^{*}, g_{2}^{*}) =$$

$$= W_{R}^{\prime(\tilde{1}100)}\left(1, \frac{p}{\mu}\left(\frac{r}{\mu^{2}}\right)^{-\nu}, \frac{\omega}{\lambda\mu^{2}}\left(\frac{r}{\mu^{2}}\right)^{-\nu\Delta\omega}, g_{1}^{*}, g_{2}^{*}\right) \times$$

$$\times \left(\frac{r}{\mu^{2}}\right)^{-\nu(2d-2/\nu+\Delta\omega)}. \quad (49)$$

Тогда самосогласованная малость величи
н $r, \, p, \, \omega$ представляется в виде

$$r \to 0, \quad p \sim r^{\nu}, \quad \omega \sim r^{\nu \Delta \omega}.$$
 (50)

Отметим теперь следующее обстоятельство. Если выразить величину I_R , определенную равенством (39), через инвариантные безразмерные переменные (44), то полученное выражение совпадает с величиной $W_R^{\prime(\bar{1}100)}(\zeta, z, q, g_1^*, g_2^*)/B(g_1^*, g_2^*)$, где $B(g_1^*, g_2^*)$ определено в (40) с соответствующей заменой параметров взаимодействия (42) их ренормированными значениями в критической точке.

7. ДИСПЕРСИОННОЕ УРАВНЕНИЕ ЗВУКОВЫХ ВОЛН

Дисперсионное уравнение для звуковых (упругих) волн определяется полюсом функции $G^{(u)}$. Это уравнение справедливо и вблизи температуры перехода в несоизмеримую фазу. Принимая во внимание (26), получим [13]

$$p^{2}\left(1 - \frac{\kappa w^{2} p^{2}}{\kappa p^{2} - i\omega}\right) - M\omega^{2} - DMp^{2}i\omega - \Sigma(\mathbf{p},\omega) = 0.$$
(51)

Действительная часть этого уравнения определяет зависимость частоты волны от волнового вектора. В общем виде уравнение для определения закона дисперсии можно записать следующим образом:

$$p^{2}(1 - 8\lambda_{0}\gamma_{u0}^{2}\operatorname{Re} I_{R}) - \frac{w\kappa^{2}p^{6}}{(\kappa p^{2})^{2} + \omega^{2}} \times \\ \times [w - 8\lambda_{0}\gamma_{u0}\gamma_{s0}\operatorname{Re} I_{R}] - \frac{8w\kappa\omega p^{4}\lambda_{0}\gamma_{u0}\gamma_{s0}}{(\kappa p^{2})^{2} + \omega^{2}}\operatorname{Im} I_{R} - \\ - \frac{8\lambda_{0}\gamma_{s0}^{2}w^{2}p^{6}}{[(\kappa p^{2})^{2} + \omega^{2}]^{2}} [(\kappa p^{2})^{2} - \omega^{2}]\operatorname{Re} I_{R} + \frac{16\lambda_{0}\gamma_{s0}^{2}w^{2}p^{8}\omega\kappa}{[(\kappa p^{2} + \omega^{2})]^{2}} \times \\ \times \operatorname{Im} I_{R} - M\omega^{2} = 0.$$
(52)

Это неявное уравнение зависимости частоты ω от волнового вектора p аналитически вряд ли может быть решено. Поэтому необходимо сделать существенное упрощение этого уравнения. Первое упрощение состоит в том, что мы пренебрегаем вкладом от энтропии в это уравнение, т. е. полагаем константу w равной нулю. В этом приближении уравнение (52) приобретает вид

$$p^{2}(1 - 8\lambda_{0}\gamma_{u0}^{2}\operatorname{Re} I_{R}) - M\omega^{2} = 0,$$
 (53)

где p — модуль волнового вектора упругой волны.

Выразим коррелятор I_R через безразмерные переменные (44). Используя теперь равенство (49), будем иметь

$$I_{R}(\zeta, z, q) = I_{R}\left(1, \frac{p}{\mu}\left(\frac{r}{\mu^{2}}\right)^{-\nu}, \frac{\omega}{\lambda\mu^{2}}\left(\frac{r}{\mu^{2}}\right)^{-\nu\Delta_{\omega}}\right) \times \left(\frac{r}{\mu^{2}}\right)^{-\nu(2d-2/\nu+\Delta_{\omega})} \times \left(\frac{r}{\mu^{2}}\right)^{-\nu(2d-2/\nu+\Delta_{\omega})}.$$
 (54)

Запишем квадрат частоты в уравнении (53) в виде

$$\begin{aligned}
\omega^2 &= \omega_0^2 + \delta \omega^2, \\
\omega_0^2 &= p2/M.
\end{aligned}$$
(55)

С учетом равенств (53)–(55) величина $\delta \omega^2$ может быть представлена следующим образом:

$$\delta\omega^{2} = -8\lambda_{0}\gamma_{u0}^{2}\omega_{0}^{2} \times \\ \times \operatorname{Re} I_{R}\left(1, \frac{p}{\mu}\left(\frac{r}{\mu^{2}}\right)^{-\nu}, \frac{\omega}{\lambda\mu^{2}}\left(\frac{r}{\mu^{2}}\right)^{-\nu\Delta_{\omega}}\right) \times \\ \times \left(\frac{r}{\mu^{2}}\right)^{-\nu(2d-2/\nu+\Delta_{\omega})}.$$
(56)

Изменение квадрата частоты, как видно из равенства (56), прямо пропорциональна квадрату константы γ_{u0} , определяющей величину связи между магнитной подсистемой и решеткой. Величина этой константы определяется обменной стрикцией. В дигерманиде железа, обладающем слоистой структурой, эти константы будут различными при распространении звуковых волн вдоль главной оси и в слое. Обменная стрикция будет сильнее в слое, поскольку расстояние между магнитными атомами внутри слоя оказывается меньше, чем это расстояние между слоями. Отсюда ясно, что при распространении упругих волн вдоль главной оси изменение частоты волны будет меньше, чем при распространении волны вдоль слоя.

Определим фазовую скорость упругой волны со стандартным соотношением $c = \omega/p$, где ω — частота волны, а *р* — модуль волнового вектора. Используя это определение, запишем разность квадратов частот $\delta \omega^2$ в уравнении (56) так: $\delta \omega^2 = (c^2 - c_0)p^2$. В этом равенстве с — скорость звуковой волны, наблюдаемая в эксперименте, c_0 — адиабатическая скорость звуковой волны, распространяющейся вдоль оси [100] кристалла. Здесь необходимо сделать важное замечание. В критической области температур адиабатическую скорость звука, обратный квадрат которой определяет величину M в (55), можно брать как линейную экстраполяцию изменения скорости звука при температурах значительно выше, чем T_C [25]. Используем далее приближение $c^2 - c_0^2 =$ $= \delta c^2 \sim -(\delta c)^2$. В этом случае из равенства (56) будем иметь

$$\frac{\delta c}{c_0} \sim \gamma_{u0} \left[8\lambda_0 \operatorname{Re} I_R \left(1, \frac{p}{\mu} \left(\frac{r}{\mu^2} \right)^{-\nu} \right), \\ \frac{\omega}{\lambda \mu^2} \left(\frac{r}{\mu^2} \right)^{-\nu \Delta_\omega} \right) \right]^{1/2} \times \\ \times \left(\frac{r}{\mu^2} \right)^{-\nu (d-1/\nu + \Delta_\omega/2)} . \quad (57)$$

В монографии [20] приведено значение индекса $\nu \approx 0.671$ для размерности пространства d = 3, в работе [10] рассчитана величина $\Delta_{\omega} = 2 + R\eta$, где R = 0.726(1 - 0.189) для d = 3, а индекс $\eta = 0.040$ [20]. В этом случае модуль показателя степени в последнем сомножителе в правой части (57) равен 1.69.

Из экспериментальных данных работы [14] следует, что скорость звука продольной волны вдоль направления [100] изменяется существенно больше, чем в направлении [001], в котором это изменение оказывается наименьшим. Понятно также, почему изменение скорости волны вдоль направления [110] оказывается промежуточным по величине, поскольку γ_{u0} определяет тогда обменную стрикцию по диаго
нали в слое.

Отметим, что характер изменения скорости упругой волны формально совпадает с температурным поведением функции $f(r) = |r|(\ln |r| - \ln 4\pi),$ входящей в выражение для I_R , так как в критической области последнее справедливо как выше, так и ниже температуры перехода [20]. При смещении от точки перехода вверх по температуре эта функция уменьшается по величине в той области температур, где существенны флуктуации параметра порядка. При температуре перехода она имеет максимум, в котором ее значение равно нулю. При температурах ниже температуры перехода f(r) также сначала уменьшается при удалении от точки перехода, достигая минимума, а затем начинает расти. Температура минимума равна $T = T_C - T_0$, температура $T_0 \sim 4\pi/e \sim 4.62$ К. Тогда можно положить, что в критической области $c = c(T_C) + \delta c$, где $\delta c \sim Q f(r), Q$ — некоторая константа. При этом значение температуры, в которой функция f(r) достигает локального минимального значения, находится в хорошем согласии с экспериментальными данными работы [14].

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрено распространение продольной упругой (звуковой) волны в окрестности фазового перехода в несоизмеримую магнитную структуру в слоистых тетрагональных системах на примере соединения FeGe₂. Описание проводилось на основе анализа критической динамики с введением в рассмотрение случайных сил с корреляторами гауссова типа. На этом этапе важным оказывается то, каким образом вводится динамическая переменная, описывающая стохастическую решеточную динамику. Для введения этой переменной учитываем изменение плотности термодинамического потенциала в результате флуктуации. Представим систему как набор подсистем, слабо взаимодействующих между собой (например, только за счет градиентов параметров порядка), тогда флуктуация в малой подсистеме пропорциональна минимальной работе, которая совершается над подсистемой, включающей и изменение тензора деформации. В результате удается ввести динамическую переменную, описывающую стохастическую решеточную динамику и включить слагаемые с этой переменной в изменение термодинамического потенциала системы, а значит, и в действие нашей задачи. Путем удвоения числа полей задача была сведена к квантово-полевой модели. Определение функций Грина проводилось с использованием генерирующего функционала, в котором было проведено преобразование «смещения на константу», для избавления от слагаемых, линейных по источникам полей. Дисперсионное уравнение упругих волн определялось полюсом функции Грина $\langle u\tilde{u} \rangle$. Собственно-энергетическая часть определялась с точностью до второго порядка по теории возмущений.

Установлено, что в критической области вблизи температуры перехода второго рода в несоизмеримую магнитную структуру изменение скорости упругой волны относительно адиабатической скорости этой волны, получаемой линейной аппроксимацией высокотемпературных значений, отнесенное к адиабатической скорости, имеет степенной характер вида $(T - T_C)^{-\nu(d-1/\nu + \Delta_{\omega}/2)}$. Изменение квадрата частоты упругой волны с температурой также имеет степенной характер с показателем степени, удвоенным по сравнению с написанным выше. Показано, что изменение скорости звука в критической области коррелирует с температурным поведением функции $|r|(\ln |r| - \ln 4\pi)$. Различная величина изменения скорости продольного звука в направлениях [100], [110], [001] связана с тем, что константы обменострикции при распространении звука в этих направлениях не совпадают между собой, причем обменострикция при распространении вдоль направления [001] оказывается наименьшей.

Отметим, в заключение, что подход, развиваемый в статье для описания распространения звука вблизи магнитного фазового перехода второго рода беспорядок-порядок может быть распространен и на переходы в соизмеримую магнитную фазу, которая описывается двухкомпонентным параметром порядка. Магнитный переход в этом случае не должен сопровождаться изменением тетрагональной кристаллической структуры.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (шифр «Квант») Г.р. № АААА-А18-118020190095-4.

ЛИТЕРАТУРА

- K. P. Belov, G. I. Katayev, and R. Z. Levitin, J. Appl. Phys. Suppl. **31**, 1535 (1960).
- Л. Д. Ландау, Т. М. Халатников, ДАН СССР 96, 469 (1954).

- J. R. Neighbours, R. W. Olivers, and C. H. Stillwell, Phys. Rev. Lett. 10, 125 (1963).
- 4. H. Mori, Progr. Theor. Phys. 33, 423 (1965).
- K. Tani and H. Mori, Progr. Theor. Phys. 39, 876 (1968).
- B. I. Halperin, P. C. Hoenberg, and S.-Keng Ma, Phys. Rev. Lett. 29, 148 (1972).
- 7. Ш. Ма, Современная теория критических явлений, Мир, Москва (1980).
- 8. H. K. Jenssen, Z. Phys. B 23, 377 (1976).
- C. De Domimicis and L. Peleti, Phys. Rev. B 18, 363 (1977).
- **10**. Н. В. Антонов, А. Н. Васильев, ТМФ **60**, 59 (1984).
- R. Bausch, H. H. Janssen, and H. Wagner, Z. Phys. B 24, 113 (1976).
- 12. R. Dengler and F. Schwabl, Z. Phys. B 69, 327 (1987).
- 13. B. Drossel and F. Schwabl, Z. Phys. B 91, 93 (1993).
- **14**. К. Б. Власов, Е. В. Устелемова, Р. И. Зайнуллина и др., ФТТ **32**, 1385 (1990).
- 15. Р. И. Зайнуллина, М. А. Миляев, ФТТ 61, 1336 (2019).

- H. L. Smith, Y. Chen, D. S. Kim et al., Phys. Rev. Mater. 2, 103602 (2018).
- 17. О. В. Ковалев, *Неприводимые и индуцирован*ные представления и копредставления федоровских групп, Наука, Москва (1986).
- 18. В. В. Меньшенин, ФТТ 61, 652 (2019).
- **19**. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, ч. 1, Наука, Москва (1976).
- 20. А. Н. Васильев, Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике, Изд-во ПИЯФ, Санкт-Петербург (1998).
- А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, Методы теории поля в статистической физике, Изд-во Добросвет, Москва (1998).
- **22**. А. И. Ларкин, С. А. Пикин, ЖЭТФ **56**, 1664 (1969).
- **23**. *Физика магнитных диэлектриков*, под ред. Г. А. Смоленского, Наука, Москва (1974).
- 24. D. J. Amit, Field Theory, the Renormalization Group and Critical Phenomena, Singapore Nat. Printers (Pte) Ltd, Singapore (1978).
- 25. K. Kawasaki and A. Ikushima, Phys. Rev. B 1, 3143 (1970).

ТРАНСПОРТНОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ СУБДИФФУЗИИ СМЕШАННОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

В. П. Шкилев*

Институт химии поверхности им. А. А. Чуйко Национальной академии наук Украины 03164, Киев, Украина

> Поступила в редакцию 22 января 2021 г., после переработки 2 марта 2021 г. Принята к публикации 2 марта 2021 г.

Предлагается транспортное уравнение для модели, представляющей собой комбинацию модели случайных барьеров и модели многократного захвата. Отрицательные корреляции, обусловленные барьерами, моделируются путем добавления к уравнению источникового и стокового членов. В случае процессов, сохраняющих вероятность, предлагаемое уравнение эквивалентно известному ранее уравнению. Однако в случае процессов с потоками вероятности через границы результаты принципиально различаются. В частности, это транспортное уравнение дает разные значения времени первого прохождения для стационарной и нестационарной субдиффузии. В случае стационарной субдиффузии оно воспроизводит результат модели дробного броуновского движения, а в случае нестационарной субдиффузии — модели случайных блужданий с непрерывным временем. На примере диффузии в гармоническом потенциале продемонстрирована термодинамическая согласованность уравнения.

DOI: 10.31857/S0044451021070117

1. ВВЕДЕНИЕ

Субдиффузия — это случайные блуждания, характеризующиеся тем, что скорость роста среднеквадратичного смещения не остается постоянной, как у обычной диффузии, а со временем уменьшается. Подобного рода замедляющаяся диффузия встречается во многих областях [1–5]. Существуют два принципиально отличающиеся друг от друга вида субдиффузии: стационарная и нестационарная. При стационарной субдиффузии среднее количество скачков, совершаемых частицей, пропорционально времени, как и при обычной диффузии. Замедление диффузии происходит из-за того, что при одном и том же количестве скачков частица смещается на меньшее расстояние, чем при обычной диффузии. Это связано с тем, что частица имеет тенденцию возвращаться в ранее посещавшиеся места, т. е. скачки назад более вероятны, чем скачки вперед. Характерными особенностями этого вида субдиффузии являются ее независимость от момента начала наблюдения за диффундирующей час-

При нестационарной субдиффузии смещение как функция количества скачков остается таким же, как и при обычной диффузии. Замедление диффузии происходит вследствие снижения со временем подвижности частиц, которое, как правило, связано с задержкой частиц в разного рода ловушках. Характерной особенностью этого вида субдиффузии является ее зависимость от момента начала наблюдения за частицей. В частности, если в начальный момент времени частицы находятся в равновесии с окружающей средой, то, как и при обычной диффузии, среднеквадратичное смещение пропорционально времени и проводимость не зависит от частоты. Отличие от обычной диффузии проявляется только в отличии формы функции распределения от гауссовой [6]. К моделям, описывающим нестационарную субдиффузию, относятся модель случайных ловушек [6, 8], модель многократного захвата [6,15,16], модель случайных блужданий с непрерыв-

тицей и зависимость проводимости от частоты [6]. Существует несколько моделей, описывающих стационарную субдиффузию: модель случайных барьеров [6–8], модель Лоренца [9,10], модель случайных блужданий на фракталах [3,11], модель вязкоупругости [4,5,12], модель дробного броуновского движения (fractional Brownian motion) [4,5,13,14].

^{*} E-mail: shkilevv@ukr.net

ным временем (continuous time random walk, CTRW) [4,5,17], модель стохастического коэффициента диффузии (diffusing diffusivity) [18].

Как показывают эксперименты, в реальных физических системах часто одновременно присутствуют оба вида субдиффузии [11,19–21]. Для математического описания таких систем необходимы соответствующие модели. Обычно такие модели строятся путем комбинирования известных моделей стационарной и нестационарной субдиффузии [11,21–26].

Чтобы с помощью математической модели можно было решать различные практические задачи, желательно иметь для этой модели транспортное уравнение, аналогичное уравнению Фоккера – Планка. В настоящее время известна одна модель субдиффузии смешанного происхождения, для которой существует такое уравнение. Это комбинация модели случайных барьеров и модели многократного захвата, первоначально предложенная в работах [27-29]. Авторы этих работ использовали полученное ими уравнение для описания времяпролетного эксперимента. Поэтому они рассматривали только неравновесное начальное условие и внешнюю силу считали не зависящей от времени. Обобщение этого уравнения на произвольные начальные условия и зависящую от времени силу было осуществлено в работах [30-33].

Авторы работы [34] рассмотрели две модели субдиффузии: стационарную, в которой замедление диффузии обусловлено отрицательными корреляциями, т.е. тем фактом, что скачки назад более вероятны, чем скачки вперед, и нестационарную, в которой замедление диффузии обусловлено снижением со временем подвижности частиц. Пропагаторы (плотности вероятности) обеих моделей удовлетворяют одному и тому же субдиффузионному уравнению, которое в изображениях Лапласа записывается как (преобразование Лапласа функции времени f(t) будем обозначать через f(s): $f(s) = \int_{0}^{\infty} \exp(-st)f(t) dt$

$$s\rho(x,s) - \delta(x) = h^2 \Theta(s) \frac{\partial^2 \rho(x,s)}{\partial x^2}.$$
 (1)

Здесь s — переменная Лапласа, x — пространственная координата (ради простоты здесь и далее рассматриваем одномерный случай), $\Theta(s)$ — функция памяти, равная в данном случае $\nu s^{0.5}$, h и ν — постоянные параметры, $\rho(x,s)$ — изображение Лапласа плотности вероятности $\rho(x,t)$ найти частицу в точке x в момент времени t.

С помощью уравнения (1) можно вычислить вероятность выживания частицы на полубесконечном интервале с поглощающей границей. На больших временах эта вероятность ведет себя как $t^{-0.25}$. Авторы работы [34] вычислили эту вероятность в рамках обеих моделей также и непосредственно, без использования уравнения (1). Оказалось, что результат, даваемый этим уравнением, правилен в рамках нестационарной модели, но неправилен в рамках стационарной модели. В последней вероятность выживания на больших временах ведет себя так же, как и в случае нормальной диффузии, а именно, как $t^{-0.5}$. Тем самым авторы показали, что хотя в рамках стационарной модели пропагатор удовлетворяет уравнению (1), это уравнение не может использоваться для вычисления вероятности выживания на полубесконечном интервале. В принципе, вывод о том, что уравнение (1) не соответствует стационарной модели, можно было бы сделать на основе анализа одной лишь формы этого уравнения. Это уравнение отличается от обычного уравнения лиффузии только тем, что коэффициент лиффузии зависит от переменной Лапласа. Оно, так же как и обычное уравнение диффузии, предполагает, что частица может совершить скачок в обоих направлениях с равной вероятностью. Следовательно, оно не может адекватно представлять замедляющуюся диффузию, обусловленную тем фактом, что скачки в разных направлениях имеют разную вероятность.

Ясно, что полученный авторами работы [34] результат относится также и к модели случайных барьеров, поскольку в этой модели субдиффузия обусловливается отрицательными корреляциями, но транспортное уравнение имеет вид (1). Этот результат означает, что уравнение (1) не может использоваться в рамках модели случайных барьеров для описания таких процессов, как случайные блуждания на полубесконечном интервале с поглощающей границей. Поскольку транспортное уравнение для модели субдиффузии, представляющей собой комбинацию модели случайных барьеров и модели многократного захвата, основано на уравнении (1), результат работы [34] относится и к нему. Следовательно, для того чтобы транспортное уравнение, предложенное в работах [27-33], могло использоваться для решения задач с поглощающими границами, оно должно быть усовершенствовано.

В данной работе уравнение (1) преобразуется к виду обыкновенного уравнения диффузии с источником и стоком. Показывается, что полученное таким образом уравнение адекватно представляет замедляющуюся диффузию, обусловленную отри-
цательными корреляциями. В случае диффузии в неограниченном пространстве полученное уравнение эквивалентно уравнению (1), но в случае процессов с потоками вероятности через границы оно дает принципиально иные результаты. В частности, вероятность выживания на полубесконечном интервале, вычисленная с помощью этого уравнения, убывает на больших временах быстрее, чем в случае нормальной диффузии, тогда как вероятность выживания, вычисленная с помощью уравнения (1), убывает медленнее, чем в случае нормальной диффузии. Среднее время первого прохождения для аномальной субдиффузии на ограниченном интервале с поглощающими границами, полученное с помощью этого уравнения, оказывается конечным, тогда как та же величина, вычисленная с помощью уравнения (1), является бесконечной. Предлагаемое уравнение дает результаты, качественно согласующиеся с результатами, получаемыми в рамках модели дробного броуновского движения. Поскольку модель дробного броуновского движения, так же как и модель случайных барьеров, описывает замедляющуюся диффузию, обусловленную отрицательными корреляциями, данный факт может служить аргументом в пользу предлагаемого уравнения.

Аналогично уравнению (1) может быть преобразовано также и транспортное уравнение для субдиффузии смешанного происхождения, предложенное в работах [27-33]. В настоящей работе рассматриваются следующие вопросы, касающиеся полученного в результате такого преобразования уравнения: 1) на примере субдиффузии в гармоническом потенциале показывается термодинамическая согласованность уравнения; 2) выводятся формулы, позволяющие находить параметры уравнения на основе второго и четвертого моментов в случае чистой субдиффузии или на основе первого и второго моментов в случае субдиффузии в постоянном силовом поле; 3) предлагаются конкретные аналитические выражения для фигурирующих в уравнении функций памяти.

2. МОДЕЛЬ СЛУЧАЙНЫХ БАРЬЕРОВ

2.1. Модифицированное уравнение

Случайные блуждания в модели случайных барьеров являются одним из видов так называемых усиленных случайных блужданий (reinforced random walks). Это случайные блуждания, в которых блуждающая частица имеет тенденцию возвращаться в ранее посещавшиеся места. Они широко изучаются в математическом, а также экологическом контекстах [35, 36]. Большинство разработанных в этой области моделей являются вычислительными. Одним из немногих исключений является модель, предложенная в работах [37, 38]. Суть этой модели состоит в том, что усиленные случайные блуждания представляются в виде комбинации двух независимых процессов: обычной диффузии и процесса, возвращающего частицу в одно из ранее посещавшихся мест. Кинетическое уравнение в рамках этой модели имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2} - r\rho(x,t) + r \int_0^t K(t,\tau)\rho(x,\tau) \, d\tau. \quad (2)$$

Здесь D — коэффициент диффузии, r — скорость возвращающего процесса, $K(t, \tau)$ — положительная функция, удовлетворяющая условию нормировки

$$\int_{0}^{t} K(t,\tau) \, d\tau = 1$$

Последний член этого уравнения представляет приток вероятности в точку x как результат выбора момента времени τ в прошлом с вероятностью $K(t, \tau)$ и перемещения частицы в эту точку с вероятностью $\rho(x, \tau)$ [39].

Покажем, что уравнение (1) может быть приведено к виду (2). Для этого умножим его на Θ_{∞} ($\Theta_{\infty} = \lim_{s\to\infty} \Theta(s)$), разделим на $\Theta(s)$ и прибавим к обеим частям выражение $s\rho(x,s) - \delta(x)$. В результате получим

$$s\rho(x,s) - \delta(x) = h^2 \Theta_{\infty} \frac{\partial^2 \rho(x,s)}{\partial x^2} - \left[\frac{\Theta_{\infty}}{\Theta(s)} - 1\right] [s\rho(x,s) - \delta(x)]. \quad (3)$$

Теперь введем функцию $\phi(s)$:

$$\phi(s) = 1 - \frac{s}{r} \left[\frac{\Theta_{\infty}}{\Theta(s)} - 1 \right]. \tag{4}$$

Здесь r — коэффициент в разложении функции $\Theta(s)$ при больших s:

$$\Theta(s) = \Theta_{\infty} \left(1 - \frac{r}{s} + \frac{c}{s^2} + \ldots \right).$$

При больших s функция $\phi(s)$ стремится к нулю, а при малых — к единице. Функция $\Theta(s)$ выражается через нее как

$$\Theta(s) = \frac{\Theta_{\infty}s}{s + r(1 - \phi(s))}.$$
(5)

Отсюда видно, что если в качестве $\phi(s)$ взять преобразование Лапласа плотности вероятности, т. е. монотонно убывающую от единицы до нуля (при *s* изменяющемся от нуля до бесконечности) функцию, то ей будет соответствовать монотонно возрастающая функция $\Theta(s)$. При *s*, стремящемся к бесконечности, эта функция $\Theta(s)$ будет стремиться к конечному значению Θ_{∞} , а при *s*, стремящемся к нулю, — либо к конечному значению, либо к нулю, в зависимости от поведения функции $\phi(s)$ в окрестности нуля. Если в этой окрестности функция $\phi(s)$ представима в виде

$$\phi(s) = 1 - k_1 s + \dots$$

то значение будет конечным:

$$\Theta_0 = \frac{\Theta_\infty}{1 + rk_1}.$$

Если же функция $\phi(s)$ представима в виде

$$\phi(s) = 1 - k_2 s^{\alpha} + \dots$$

с параметром α , заключенным в пределах от 0 до 1, то функция $\Theta(s)$ будет представима в этой окрестности в виде

$$\Theta(s) = \frac{\Theta_{\infty}}{rk_2} s^{1-\alpha}.$$

Из этого рассмотрения следует, что, задавая разные плотности вероятности $\phi(s)$, можно получать функции $\Theta(s)$ такие, что уравнение (1) будет описывать как переходную (переходящую в нормальную на больших временах), так и асимптотическую (продолжающуюся неограниченно долго) субдиффузию.

С использованием функции $\phi(s)$ уравнение (3) запишется как

$$s\rho(x,s) - \delta(x) = h^2 \Theta_{\infty} \frac{\partial^2 \rho(x,s)}{\partial x^2} - r\rho(x,s) + r\phi(s)\rho(x,s) + r\frac{1-\phi(s)}{s}\delta(x).$$
(6)

Переход к оригиналам дает

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2} - r\rho(x,t) + r \int_0^t \phi(t-\tau)\rho(x,\tau) d\tau + r \left[1 - \int_0^t \phi(\xi) d\xi \right] \delta(x).$$
(7)

Это уравнение является частным случаем уравнения (2) с коэффициентом диффузии, равным $h^2\Theta_{\infty}$, и функцией

$$K(t,\tau) = \phi(t-\tau) + \left[1 - \int_{0}^{t} \phi(\xi) \, d\xi\right] \delta(\tau).$$

Предпоследний член в правой части уравнения (7) соответствует возврату частицы в ранее посещавшиеся места, а последний — возврату в точку старта.

Уравнение (7) эквивалентно уравнению (1), но, в отличие от него, оно может адекватно представлять случайные блуждания с отрицательными корреляциями. Для этого необходимо, чтобы возвращающий процесс сохранял вероятность, т. е. чтобы источник и сток, проинтегрированные по всему пространству, взаимно компенсировались. Это условие выглядит следующим образом:

$$\Sigma(t) - \int_{0}^{t} \phi(t-\tau) \Sigma(\tau) \, d\tau = 1 - \int_{0}^{t} \phi(\xi) \, d\xi. \quad (8)$$

Здесь через $\Sigma(t)$ обозначена суммарная вероятность $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x,t) dx$. В случае процесса в неограниченном пространстве вероятность сохраняется: $\Sigma(t) = 1$, поэтому данное условие выполняется. Однако в случае процесса в ограниченной области с потоками вероятности через границы оно выполняться не будет. Поэтому уравнение (7) должно быть модифицировано.

В данной работе рассматривается одна из простейших возможных модификаций. Она состоит в том, что в уравнении (7) изменяется только последний член. Модифицированное уравнение записывается в виде

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2} - r\rho(x,t) + r \int_0^t \phi(t-\tau)\rho(x,\tau) d\tau + r \left[\Sigma(t) - \int_0^t \phi(t-\tau)\Sigma(\tau) d\tau \right] \delta(x).$$
(9)

Здесь величина $\Sigma(t)$ равна интегралу от $\rho(x,t)$ по всей доступной области. Очевидно, что в этом уравнении источник и сток взаимно компенсируются в любом случае. Несмотря на свою простоту, эта модификация дает качественно правильные результаты. Покажем это на двух примерах.

2.2. Вероятность выживания

Найдем вероятность выживания частицы, стартующей из точки x_0 ($x_0 > 0$) на полубесконечной прямой x > 0 с поглощающей границей x = 0. Запишем уравнение (9) в изображениях Лапласа:

$$s\rho(x,s) - \delta(x) = D \frac{\partial^2 \rho(x,s)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \rho(x,s)}{\partial x^2} - \kappa \rho(x,s) + \kappa \Sigma(s) \delta(x).$$
(10)

Здесь

$$\kappa = r(1 - \phi(s)) = s \left[\frac{\Theta_{\infty}}{\Theta(s)} - 1 \right].$$

Уравнение (10) по виду совпадает с уравнением, описывающим диффузию с ресеттингом (diffusion with resetting) [40]. В данном случае «скорость ресеттинга» κ зависит от переменной Лапласа. Но при вычислении вероятности выживания эта зависимость никак не сказывается, поэтому мы можем прямо воспользоваться результатом работы [40]. В этой работе получено следующее выражение для преобразования Лапласа вероятности выживания:

$$Q(s) = \frac{1 - \exp\left(-x_0\sqrt{\frac{s+\kappa}{D}}\right)}{s + \kappa \exp\left(-x_0\sqrt{\frac{s+\kappa}{D}}\right)}.$$
 (11)

Подставляя сюда

$$D = h^2 \Theta_{\infty}, \quad \kappa = s \left[\frac{\Theta_{\infty}}{\Theta(s)} - 1 \right],$$

получаем

$$Q(s) = \frac{1 - \exp\left(-x_0\sqrt{\frac{s}{h^2\Theta(s)}}\right)}{s + s\left[\frac{\Theta_{\infty}}{\Theta(s)} - 1\right]\exp\left(-x_0\sqrt{\frac{s}{h^2\Theta(s)}}\right)}.$$
 (12)

Пусть при малых *s* функция памяти ведет себя как $\Theta(s) \propto s^{1-\alpha}$ с параметром α , заключенным в пределах от 0 до 1. Тогда функция Q(s), вычисленная по формуле (12), будет вести себя как $Q(s) \propto s^{-\alpha/2}$, а соответствующая вероятность выживания — как $Q(t) \propto t^{\alpha/2-1}$. В то же время вероятность выживания для нормальной диффузии ведет себя как $Q(t) \propto t^{-1/2}$, т.е. убывает медленнее.

Таким образом, модифицированное уравнение предсказывает, что отрицательные корреляции

должны ускорять убывание вероятности выживания. Подтверждением справедливости этого предсказания является тот факт, что в модели дробного броуновского движения, в которой замедление диффузии происходит за счет отрицательных корреляций, вероятность выживания уменьшается быстрее, чем в нормальной диффузии. Если взять модель дробного броуновского движения, в которой среднеквадратичное смещение растет по закону $MSD(t) \propto t^{\alpha}$, то вероятность выживания будет убывать по такому же закону, какой предсказывается модифицированным уравнением: $Q(t) \propto t^{\alpha/2-1}$ [41]. Кроме того, справедливость этого предсказания можно усмотреть из следующего рассуждения. Отрицательные корреляции затрудняют удаление частицы от точки старта. Значит, на больших временах частица будет находиться в некоторой ограниченной области с большей вероятностью, чем в отсутствие отрицательных корреляций. А поскольку подвижность частицы при наличии отрицательных корреляций остается такой же, как и при обычной лиффузии, все точки этой области, включая поглощающую границу, будут посещаться чаще, чем при обычной диффузии. Следовательно, вероятность для частицы выжить на больших временах при наличии отрицательных корреляций будет меньше, чем в их отсутствие.

Напомним, что в случае нестацинарной субдиффузии, описываемой уравнением (1), при функции памяти $\Theta(s) \propto s^{1-\alpha}$ вероятность выживания на больших временах ведет себя как $Q(t) \propto t^{-\alpha/2}$, т. е. она убывает медленнее, чем при нормальной диффузии.

Второй пример — это вычисление среднего времени прохождения для частицы, стартующей из точки x_0 на интервале (a, b) с поглощающими границами. Здесь тоже можно воспользоваться результатом для диффузии с ресеттингом. В работе [42] получено следующее выражение для преобразования Лапласа вероятности выживания:

$$Q(s) = \frac{1 - g(x_0, s)}{s + \kappa g(x_0, s)},$$
(13)

где

$$g(x_0, s) = \frac{\exp\left[(b - x_0)\sqrt{\frac{s + \kappa}{D}}\right] + \exp\left[(x_0 - a)\sqrt{\frac{s + \kappa}{D}}\right]}{1 + \exp\left[(b - a)\sqrt{\frac{s + \kappa}{D}}\right]}$$
(14)

(данное выражение для $g(x_0, s)$ получается в результате упрощения выражения, приведенного в работе [42]). Среднее время первого прохождения вычисляется по формуле $T_r = \lim_{s\to 0} Q(s)$. Подставляя

$$D = h^2 \Theta_{\infty}, \quad \kappa = s \left[\frac{\Theta_{\infty}}{\Theta(s)} - 1 \right]$$

в выражения (13) и (14) и устремляя s к нулю, получаем для T_r конечное значение:

$$T_r = \frac{(b - x_0)(x_0 - a)}{2h^2\Theta_{\infty}}.$$
 (15)

Как известно, уравнение (1) дает

$$T_r = \frac{(b - x_0)(x_0 - a)}{2h^2\Theta(0)}.$$
(16)

При $\Theta(s) \propto s^{1-\alpha}$ это значение будет бесконечным. Тот факт, что для субдиффузии, обусловленной отрицательными корреляциями, среднее время первого прохождения в рассматриваемом случае должно быть конечным, подтверждается соответствующим результатом модели дробного броуновского движения [43].

2.3. Переносной член

В заключение данного раздела запишем полное транспортное уравнение для модели случайных барьеров, включающее переносной член, обусловленный зависящей от пространственной координаты и времени силой. Поскольку, согласно уравнению (9), возвращающий процесс и диффузия являются независимыми процессами, естественно предположить, что, так же как и в уравнении Фоккера – Планка, переносной член должен быть просто добавлен к правой части:

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2} - \frac{D}{k_B T} \frac{\partial [F(x,t)\rho(x,t)]}{\partial x} - r\rho(x,t) + r \int_0^t \phi(t-\tau)\rho(x,\tau) \, d\tau + r \left[\Sigma(t) - \int_0^t \phi(t-\tau)\Sigma(\tau) \, d\tau \right] \delta(x). \quad (17)$$

Здесь k_B — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, F(x,t) — сила. В случае, когда вероятность сохраняется, т. е. когда $\Sigma(t) = 1$, это уравнение можно, исключая источник и сток, привести к виду

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = h^2 \int_0^t \Theta(t-\tau) \frac{\partial^2 \rho(x,\tau)}{\partial x^2} d\tau - \frac{h^2}{k_B T} \int_0^t \Theta(t-\tau) \frac{\partial [F(x,\tau)\rho(x,\tau)]}{\partial x} d\tau.$$
(18)

Это уравнение ранее было получено в рамках модели случайных барьеров в работе [30].

3. СУБДИФФУЗИЯ СМЕШАННОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

3.1. Транспортное уравнение

Транспортное уравнение для комбинации модели случайных барьеров и модели многократного захвата, предложенное в работах [27–33], имеет следующий вид:

$$\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} = h^2 \int_0^t \Theta(t-\xi) \int_0^{\xi} \Psi(\xi-\tau) \frac{\partial^2 \rho(x,\tau)}{\partial x^2} d\tau d\xi - \frac{h^2}{k_B T} \int_0^t \Theta(t-\xi) \frac{\partial}{\partial x} \left[F(x,\xi) \int_0^{\xi} \Psi(\xi-\tau) \rho(x,\tau) d\tau \right] d\xi + h^2 \int_0^t \Theta(t-\xi) \frac{\partial^2 \rho(x,0)}{\partial x^2} \int_{\xi}^{\infty} \Psi(\tau) d\tau d\xi - \frac{h^2}{k_B T} \int_0^t \Theta(t-\xi) \frac{\partial [F(x,\xi) \rho(x,0)]}{\partial x} \times \int_{\xi}^{\infty} \Psi(\tau) d\tau d\xi.$$
(19)

Здесь $\Theta(t)$ — функция памяти, обусловленная барьерами, а $\Psi(t)$ — функция памяти, обусловленная ловушками. Данный вариант уравнения соответствует равновесному начальному распределению вероятности между транспортным состоянием и ловушками. Если в начальный момент времени частица с вероятностью, равной единице, находится в транспортном состоянии, то два последних члена уравнения (19), содержащие $\rho(x, 0)$, будут отсутствовать. Следует отметить, что модель многократного захвата эквивалентна континуальному пределу модели случайных блужданий с непрерывным временем [15, 16], поэтому данное уравнение справедливо также и в модели субдиффузии смешанного происхождения, представляющей собой комбинацию модели

случайных барьеров и модели случайных блужданий с непрерывным временем.

Согласно изложенному выше, уравнение (19) справедливо только в применении к процессам, сохраняющим вероятность. Чтобы получить уравнение, справедливое в общем случае, нужно преобразовать это уравнение аналогично тому, как это было сделано в предыдущем разделе для уравнения модели случайных барьеров. В результате этих преобразований получается следующее уравнение:

$$\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} = h^2 \int_0^t \Psi(t-\tau) \frac{\partial^2 \rho(x,\tau)}{\partial x^2} d\tau - \frac{h^2}{k_B T} \frac{\partial}{\partial x} \left[F(x,t) \int_0^t \Psi(t-\tau) \rho(x,\tau) d\tau \right] + h^2 \frac{\partial^2 \rho(x,0)}{\partial x^2} \int_t^\infty \Psi(\tau) d\tau - \frac{h^2}{k_B T} \frac{\partial [F(x,t) \rho(x,0)]}{\partial x} \int_t^\infty \Psi(\tau) d\tau - \frac{h^2}{k_B T} \frac{\partial [F(x,t) \rho(x,0)]}{\partial x} \int_t^\infty \Psi(\tau) d\tau + r \left[\Sigma(t) - \int_0^t \phi(t-\tau) \Sigma(\tau) d\tau \right] \rho(x,0). \quad (20)$$

Здесь предполагается, что параметр Θ_{∞} , фигурирующий в преобразованиях, равен единице. Это предположение допустимо, поскольку функции $\Theta(s)$ и $\Psi(s)$ входят в уравнение (19) таким образом, что однозначно должно быть определено только их произведение. Относительно вида уравнения (20) можно сказать следующее. Если в его правой части оставить только два первых члена, то получим транспортное уравнение для модели многократного захвата (а также CTRW), соответствующее неравновесному начальному условию. Если оставить четыре члена, то получим транспортное уравнение для этой модели, соответствующее равновесному начальному условию. Источники и стоки в этом уравнении имеют такой же смысл и такой же вид, как и в уравнениях (9) и (17), за исключением того, что начальное распределение вероятности записано в общем виде $(\rho(x,0)$ вместо $\delta(x)).$

3.2. Субдиффузия в гармоническом потенциале

В данном разделе транспортное уравнение (20) применяется к описанию субдиффузии в гармоническом потенциале. С помощью этого уравнения вычисляются преобразование Лапласа функции релаксации $\Gamma(s)$ и динамическая восприимчивость $B(\omega)$. Показывается, что найденные функции удовлетворяют соотношению

$$B(\omega) = 1 - i\omega\Gamma(i\omega),$$

требуемому теорией линейного отклика. Этот факт может служить подтверждением термодинамической согласованности уравнения (20).

Функция релаксации вычисляется в два этапа. Вначале находится стационарное распределение вероятности в присутствии постоянной возмущающей силы. Затем это распределение используется в качестве начального распределения и вычисляется его релаксация к равновесному состоянию в отсутствие возмущающей силы.

В стационарном состоянии все члены уравнения (20) исчезают, кроме двух первых членов в правой части. Для определения стационарного распределения остается уравнение

$$h^{2}\Psi_{0}\frac{\partial^{2}\rho(x)}{\partial x^{2}} = \frac{h^{2}\Psi_{0}}{k_{B}T}\frac{\partial[F(x)\rho(x)]}{\partial x}.$$
 (21)

Здесь

$$\Psi_0 = \int_0^\infty \Psi(\tau) \, d\tau, \quad F(x) = a - bx$$

a — постоянная составляющая силы, -bx — гармоническая составляющая силы. Решением этого уравнения является

$$\rho(x) = \exp\left[\frac{ax}{k_BT} - \frac{bx^2}{2k_BT}\right].$$
 (22)

Предполагая возмущающую силу малой, запишем это как

$$\rho_0(x) = \left[1 + \frac{ax}{k_B T}\right] \exp\left[-\frac{bx^2}{2k_B T}\right].$$
 (23)

Эта функция далее используется в качестве начального распределения при решении уравнения (20), записанного в изображениях Лапласа:

$$s\rho(x,s) - \rho_0(x) = h^2 \Psi(s) \frac{\partial^2 \rho(x,s)}{\partial x^2} + \frac{h^2 \Psi(s)}{k_B T} \frac{\partial [bx \rho(x,s)]}{\partial x} + \frac{h^2 (\Psi_0 - \Psi(s))}{s} \frac{\partial^2 \rho_0(x)}{\partial x^2} + \frac{h^2 (\Psi_0 - \Psi(s))}{s k_B T} \frac{\partial [bx \rho_0(x)]}{\partial x} - r(1 - \phi(s))\rho(x,s) + r\frac{1 - \phi(s)}{s} \rho_0(x).$$
(24)

Решение этого уравнения ищем в виде

$$\rho(x,s) = \left[\frac{1}{s} + \Gamma(s)\frac{ax}{k_BT}\right] \exp\left[-\frac{bx^2}{2k_BT}\right].$$
 (25)

Подставляя соотношения (23) и (25) в уравнение (24), находим, что это уравнение удовлетворяется при функции релаксации

$$\Gamma(s) = \frac{1}{s} \left[1 - \frac{\frac{h^2 b}{k_B T} \Psi_0}{s + r(1 - \phi(s)) + \frac{h^2 b}{k_B T} \Psi(s)} \right].$$
 (26)

С использованием функции $\Theta(s)$ это выражение можно переписать как

$$\Gamma(s) = \frac{1}{s} \left[1 - \frac{\frac{h^2 b}{k_B T} \Psi_0 \Theta(s)}{s + \frac{h^2 b}{k_B T} \Psi(s) \Theta(s)} \right].$$
 (27)

Ранее выражение для функции релаксации, эквивалентное данному, было получено методом субординации [32].

Чтобы найти динамическую восприимчивость, прибавим к гармонической силе периодическую возмущающую силу

$$F_0 \exp(i\omega t),$$
 (28)

где ω — частота. На больших временах решение уравнения (20) с такими силами будет периодическим и имеет вид

$$\rho(x,t) = \left[1 + \frac{F_0 B(\omega) x}{k_B T} \exp(i\omega t)\right] \times \\ \times \exp\left(-\frac{bx^2}{2k_B T}\right), \quad (29)$$

где $B(\omega)$ — динамическая восприимчивость, которую требуется найти. На больших временах члены

уравнения (20), содержащие начальное распределение $\rho(x,0)$, стремятся к нулю. Следовательно, нужно решить уравнение

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = h^2 \int_0^{\cdot} \Psi(t-\tau) \frac{\partial^2 \rho(x,\tau)}{\partial x^2} d\tau + \frac{h^2}{k_B T} \times \frac{\partial}{\partial x} \left[(bx - F_0 \exp(i\omega t)) \int_0^t \Psi(t-\tau) \rho(x,\tau) d\tau \right] - r\rho(x,t) + r \int_0^t \phi(t-\tau) \rho(x,\tau) d\tau.$$
(30)

Подставляя сюда (29), устремляя t к бесконечности и пренебрегая членом с F_0^2 , находим

$$B(\omega) = \frac{\frac{h^2 b}{k_B T} \Psi_0}{i\omega + r(1 - \phi(i\omega)) + \frac{h^2 b}{k_B T} \Psi(i\omega)}.$$
 (31)

Как видим, соотношение $B(\omega) = 1 - i\omega\Gamma(i\omega)$ удовлетворяется.

3.3. Определение функций памяти

В данном разделе приводятся выражения, позволяющие находить функции $\Psi(s)$ и $\phi(s)$ по известным первому и второму моментам в случае процессов с постоянной силой или по второму и четвертому моментам в случае отсутствия силы при равновесном начальном условии. Показывается, что рассматриваемая модель способна описывать броуновскую, но не гауссову диффузию.

Решение уравнения (20) с начальным условием $\rho(x,0) = \delta(x)$ в неограниченном пространстве при наличии постоянной силы F в переменных Фурье–Лапласа имеет вид

$$\rho(k,s) = \frac{1}{s} \left[1 - \frac{\Psi_0}{\Psi(s)} \right] + \frac{\Psi_0}{\Psi(s)} \frac{1}{s + h^2 \Psi(s) \Theta(s) (k^2 - i\eta k)}, \quad (32)$$

где k — переменная Фурье, $\eta = F/k_B T$. Функция $\Theta(s)$, как и прежде, выражается через $\phi(s)$:

$$\Theta(s) = \frac{s}{s + r(1 - \phi(s))}.$$

Заметим, что решение, соответствующее неравновесному начальному условию, находится отсюда путем подстановки $\Psi(s)$ вместо Ψ_0 , в результате чего получается выражение, содержащее только произведение функций $\Psi(s)$ и $\Theta(s)$. Такое выражение не позволяет найти эти функции по отдельности. С использованием функции (32) моменты вычисляются по формуле

$$M_n(s) = \frac{1}{i^n} \frac{\partial^n \rho(k, s)}{\partial k^n}$$

Первый и второй моменты записываются как

$$M_1(s) = \frac{h^2 \Psi_0 \eta}{s[s + r(1 - \phi(s))]},$$
(33)

$$M_2(s) = \frac{2h^2\Psi_0\Theta(s)}{s^2} \left[1 + \frac{h^2\Psi(s)\Theta(s)\eta^2}{s}\right].$$
 (34)

Из (33) функция
 $\phi(s)$ выражается следующим образом:

$$\phi(s)) = 1 - \frac{1}{r} \left[\frac{h^2 \Psi_0 \eta}{s M_1(s)} - s \right].$$
(35)

Фигурирующие здесь параметр r и произведение $h^2 \Psi_0$ находятся из условия, чтобы функция $\phi(s)$ стремилась к нулю, когда s стремится к бесконечности. Это дает

$$h^2 \Psi_0 = \frac{A}{\eta}, \quad r = \frac{B}{A},$$

где A и B — коэффициенты в разложении функции $M_1(s)$ при больших s:

$$M_1(s) \approx \frac{A}{s^2} - \frac{B}{s^3} + \dots$$

Таким образом, по известному первому моменту находим параметр r, произведение $h^2 \Psi_0$ и функцию $\phi(s)$. Затем на основе первого и второго моментов можно найти произведение $h^2 \Psi(s)$:

$$h^{2}\Psi(s) = h^{2}\Psi_{0}\frac{\eta M_{2}(s) - 2M_{1}(s)}{2\eta s M_{1}^{2}(s)}.$$
 (36)

Как и в случае обычной диффузии, по известному пропагатору найти средний квадрат диффузионного скачка h^2 невозможно. Однозначно определяется только коэффициент диффузии в случае нормальной диффузии или произведение $h^2\Psi(s)$ в рассматриваемом здесь случае.

Второй и четвертый моменты при равной нулю силе записываются как

$$M_2(s) = \frac{2h^2\Psi_0}{s[s+r(1-\phi(s))]},$$
(37)

$$M_4(s) = \frac{24h^2\Psi_0 h^2\Psi(s)\Theta(s)^2}{s^3}.$$
 (38)

Из (37) функция $\phi(s)$ выражается следующим образом:

$$\phi(s) = 1 - \frac{1}{r} \left[\frac{2h^2 \Psi_0}{sM_2(s)} - s \right].$$
 (39)

Параметрrи произведение $h^2 \Psi_0$ находятся по формулам

$$h^2 \Psi_0 = \frac{A}{2}, \quad r = \frac{B}{A},$$

где A и B — коэффициенты в разложении функции $M_2(s)$ при больших s:

$$M_2(s) \approx \frac{A}{s^2} - \frac{B}{s^3} + \dots$$

Произведение $h^2 \Psi(s)$ находится на основе второго и четвертого моментов по формуле

$$h^2 \Psi(s) = h^2 \Psi_0 \frac{M_4(s)}{6sM_2^2(s)}.$$
(40)

Аналогичные выражения для второго и четвертого моментов были получены в работе [44]. Авторы этой работы использовали для описания субдиффузии смешанного происхождения комбинацию модели CTRW и модели составных процессов [45]. Обе эти модели являются нестационарными, поэтому авторы трансформировали модель CTRW так, чтобы результирующая модель могла проявлять стационарные свойства (см. в [44] Supplementary Information Text S15). Вследствие этого их основное уравнение фактически соответствует не комбинации «CTRW + составные процессы», а комбинации «случайные барьеры + составные процессы». Следует отметить, что модель многократного захвата является частным видом модели составных процессов [45], поэтому полученные в настоящей работе выражения (37) и (38) могут быть получены как частные случаи общих выражений, выведенных в [44].

Из выражений (37) и (38) следует, что в отсутствие случайных барьеров, т. е. при $\Theta(s) = \phi(s) = 1$, рассматриваемая модель описывает броуновскую, но не гауссову диффузию. Интересно, что если взять модель многократного захвата с одним типом ловушек, то выражение для эксцесса в рассматриваемой здесь модели совпадает с таковым в модели работы [46], построенной по принципу субординации с проинтегрированным квадратом процесса Орнштейна – Уленбека в качестве субординатора.

В модели многократного захвата с одним типом ловушек произведение $h^2\Psi(s)$ записывается как

$$h^2\Psi(s) = \frac{h^2W(s+\nu)}{s+\nu+\omega},\tag{41}$$

где W — частота диффузионных скачков, ω — скорость перехода из транспортного состояния в ловушки, ν — скорость перехода из ловушек в транспортное состояние. В этом случае выражения для второго и четвертого моментов как функций времении при $\Theta(s) = \phi(s) = 1$ приобретают вид

$$M_2(t) = 2Dt, (42)$$

$$M_4(t) = 24D^2 \left[\frac{t^2}{2} + \frac{a}{\lambda^2} (e^{-\lambda t} - 1) + \frac{a}{\lambda} t \right], \qquad (43)$$

где

$$D = \frac{h^2 W \nu}{\nu + \omega}, \quad \lambda = \nu + \omega, \quad a = \frac{\omega}{\nu}.$$

Если в качестве масштаба времени взять $2/(\nu + \omega)$, то получается следующее выражение для эксцесса $K = M_4(t)/M_2^2(t)$:

$$K = 3 + \frac{3a}{2t^2}(e^{-2t} - 1) + \frac{3a}{t}.$$
 (44)

При соответствующем соотношении скоростей ν и ω (при $\omega = 2\nu$) это совпадает с результатом, полученным в работе [46].

3.4. Аналитические выражения для функций памяти

В данном разделе приводятся аналитические выражения для функций $h^2\Psi(t)$ и $\phi(t)$, предназначенные для использования при численном решении транспортного уравнения.

Простейшее выражение для функции $h^2 \Psi(t)$ получается в результате перехода от изображений Лапласа к оригиналам в выражении (41):

$$h^{2}\Psi(t) = D\left[(1+a)\delta(t) - a\lambda e^{-\lambda t}\right].$$
 (45)

Этому выражению соответствует следующая зависимость среднеквадратичного смещения от времени в процессе, стартующем из неравновесного состояния в отсутствие случайных барьеров:

$$MSD(t) = 2D\left[t + \frac{a}{\lambda}\left(1 - e^{-\lambda t}\right)\right].$$
 (46)

Данная зависимость качественно правильно передает поведение среднеквадратичного смещения, обычно наблюдающегося в эксперименте. В некоторых случаях она может давать и количественное описание [47].

Выражение для $\Theta(t)$, аналогичное (45), выглядит следующим образом:

$$\Theta(t) = \delta(t) - re^{-(r+\kappa)t}.$$
(47)

Здесь r — как и прежде, скорость возвращающего процесса, а κ — формальный параметр. Соответствующее выражение для $\phi(t)$ записывается как

$$\phi(t) = \kappa e^{-\kappa t}.\tag{48}$$

В отсутствие ловушек, т.е. при $h^2\Psi(t) = h^2W$, эти выражения дают зависимость среднеквадратичного смещения от времени, совпадающую с (46) при следующих значениях параметров:

$$D = \frac{h^2 W \kappa}{r + \kappa}, \quad \lambda = r + \kappa, \quad a = \frac{r}{\kappa}.$$

Выражения, позволяющие количественно описывать не только переходную, но и асимптотическую субдиффузию, можно получить с использованием степенных функций. Функцию $h^2\Psi(t)$ возьмем в виде

$$h^{2}\Psi(t) = h^{2}W\left[\delta(t) - \frac{a\nu(1-\alpha)}{(1+\nu t)^{2-\alpha}}\right]$$
(49)

с формальными параметрами a, ν, α , удовлетворяющими условиям $a \in [0,1], \nu > 0, \alpha < 1$. Этому выражению соответствует следующая зависимость среднеквадратичного смещения от времени в процессе, стартующем из неравновесного состояния в отсутствие случайных барьеров:

$$\operatorname{MSD}(t) = 2h^2 W \left[(1-a)t + \frac{a}{\nu \alpha} ((1+\nu t)^{\alpha} - 1) \right] \quad (50)$$

при $\alpha \neq 0$ и

$$MSD(t) = 2h^2 W \left[(1-a)t + \frac{a}{\nu} \ln(1+\nu t) \right]$$
 (51)

при $\alpha = 0$. Если параметр *a* не равен единице, то эти зависимости соответствуют переходной субдиффузии, а если a = 1 и $\alpha \in (0, 1)$, то — асимптотической. Следует отметить, что если в (49) положить a = 1, то величина Ψ_0 , фигурирующая в формуле (37), будет равна нулю. Это означает, что при достижении равновесного состояния частицы полностью теряют подвижность, т.е. такая модель описывает только процессы, стартующие из неравновесного состояния.

Аналогом выражения (49) для функци
и $\phi(t)$ является

$$\phi(t) = \frac{\kappa(1-\beta)}{(1+\kappa t)^{2-\beta}},\tag{52}$$

где κ и β — формальные параметры, удовлетворяющие условиям $\kappa > 0$, $\beta < 1$. С такой функцией $\phi(t)$ рассматриваемая модель в отсутствие ловушек описывает переходную субдиффузию при $\beta \leq 0$ и

асимптотическую при $\beta \in (0,1)$. Это следует из того, что преобразование Лапласа функции (52) при малых *s* имеет вид $\phi(s) = 1 - k_1 s + \ldots$, если $\beta \leq 0$, и $\phi(s) = 1 - k_2 s^{\gamma} + \ldots$ с параметром γ , меньшим единицы, если $\beta \in (0,1)$.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренное в данной работе транспортное уравнение предназначено для описания процессов в неупорядоченных средах со статическим беспорядком. Фигурирующие в этом уравнении функции памяти должны определяться на основании экспериментальных данных. Для этой цели могут использоваться данные различных экспериментов: восстановление флуоресценции после обесцвечивания (fluorescence recovery after photobleaching, FRAP), флуоресцентная корреляционная спектроскопия (fluorescence correlation spectroscopy, FCS), отслеживание одиночной частицы (single particle tracking, SPT) и др. Некоторые теоретические формулы, устанавливающие связь между функциями памяти и экспериментальными данными, приведены в данной работе. Это выражения для функции релаксации, для динамической восприимчивости и для моментов функции распределения. В работе [31] приведена зависимость проводимости от частоты, а в работе [33] — выражения, описывающие кривые, получаемые в FRAP-, FCS- и SPT-экспериментах.

Неупорядоченные среды отличаются большим разнообразием свойств, поэтому универсальных, применимых к любой среде аналитических выражений для функций памяти не существует. В каждом случае аналитическое выражение должно подбираться так, чтобы оно удовлетворительно описывало найденные на основании эксперимента зависимости. (По-видимому, впервые подобный подход использовался в работе [44].) В настоящей работе приведены простейшие выражения, которые могут рассматриваться как первые претенденты на роль функций памяти. Если они оказываются неудовлетворительными, то следует брать более сложные выражения. Например, вместо одной экспоненты в формуле (45) или одной степенной функции в формуле (49) следует соответственно взять взвешенную сумму нескольких экспонент или степенных функций. После того как функции памяти определены, транспортное уравнение можно использовать для решения конкретных задач.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. R. Metzler and J. Klafter, J. Phys. A 37, R61 (2004).
- Anomalous Transport: Foundations and Applications, ed. by R. Klages, G. Radons, and I. M. Sokolov, Wiley-VCH, Weinheim (2007).
- S. Havlin and D. Ben-Avraham, Adv. Phys. 51, 187 (2002).
- 4. I. M. Sokolov, Soft Matter 8, 9043 (2012).
- F. Höfling and T. Franosch, Rep. Progr. Phys. 76, 046602 (2013).
- J. W. Haus and K. W. Kehr, Phys. Rep. 150, 264 (1987).
- V. M. Kenkre, Z. Kalay, and P. E. Parris, Phys. Rev. E 79, 011114 (2009).
- 8. J. C. Dyre, J. Non-Crist. Sol. 135, 219 (1991).
- 9. M. J. Saxton, Biophys. J. 66, 394 (1994).
- B. J. Sung and A. Yethiraj Phys. Rev. Lett. 96, 228103 (2006).
- Y. Meroz, I. M. Sokolov, and J. Klafter, Phys. Rev. E 81, 010101 (2010).
- 12. R. Kupferman, J. Stat. Phys. 114, 291 (2004).
- 13. А. Н. Колмогоров, ДАН СССР 26, 115 (1940).
- 14. B. B. Mandelbrot and J. W. van Ness, SIAM Rev. 10, 422 (1968).
- 15. P. W. Shmidlin, Phys. Rev. B 16, 2362 (1977).
- 16. J. Noolandi, Phys. Rev. B 16, 4474 (1977).
- 17. E. W. Montroll and G. H. Weiss, J. Math. Phys. 6, 167 (1965).
- M. V. Chubynsky and G. W. Slater, Phys. Rev. Lett. 113, 098302 (2014).
- D. Mazza, A. Abernathy, N. Golob, T. Morisaki, and J. G. McNally, Nucl. Acids Res. 40, e119 (2012).
- 20. T. J. Stasevich, F. Mueller, A. Michelman-Ribeiro, T. Rosales, J. R. Knutson, and J. G. McNally, Biophys. J. 99, 3093 (2010).
- 21. A. V. Weigel, B. Simon, M. M. Tamkun, and D. Krapf, PNAS 108, 6438 (2011).
- 22. J.-H. Jeon, V. Tejedor, S. Burov, E. Barkai, C. Selhuber-Unkel, K. Berg-Sørensen, L. Oddershede, and R. Metzler, Phys. Rev. Lett. 106, 048103 (2011).
- 23. S. M. A. Tabei, S. Burov, H. Y. Kim, A. Kuznetsov, T. Huynh, J. Jureller, L. H. Philipson, A. R. Dinner, and N. F. Scherer, PNAS 110, 49114916 (2013).

- 24. T. Miyaguchi and T. Akimoto, Phys. Rev. E 91, 010102(R) (2015).
- 25. Y. Golan and E. Sherman, Nature Comm. 8, 15851 (2017).
- 26. T. Furnival, R. K. Leary, E. C. Tyo, S. Vajda, Q. M. Ramasse, J. M. Thomas, P. D. Bristowe, and P. A. Midgleya, Chem. Phys. Lett. 683, 370 (2017).
- 27. W. Schirmacher, Sol. St. Comm. 39, 893 (1981).
- 28. B. Movaghar, M. Grünewald, B. Pohlmann, D. Würtz, and W. Schirmacher, J. Stat. Phys. 30, 315 (1983).
- 29. K. Godzik and W. Schirmacher, J. de Phys. 42, 127 (1981).
- 30. В. П. Шкилев, ЖЭТФ 141, 953 (2012).
- **31**. В. П. Шкилев, ЖЭТФ **142**, 181 (2012).
- 32. V. P. Shkilev, Phys. Rev. E 97, 012102 (2018).
- 33. V. P. Shkilev, Phys. Rev. E 98, 032140 (2018).
- 34. Y. Meroz, I. M. Sokolov, and J. Klafter, Phys. Rev. Lett. 107, 260601 (2011).
- 35. E. Bolthausen and U. Schmock, Ann. Probab. 25, 531 (1997).
- H. G. Othmer and A. Stevens, SIAM J. Appl. Math. 57, 1044 (1997).

- 37. D. Boyer and C. Solis-Salas, Phys. Rev. Lett. 112, 240601 (2014).
- 38. D. Boyer and J. C. Romo-Cruz, Phys. Rev. E 90, 042136 (2014).
- 39. D. Boyer, M. R. Evans, and S. N. Majumdar, J. Stat. Mech. 2017, 023208 (2017).
- 40. M. R. Evans and S. N. Majumdar, Phys. Rev. Lett. 106, 160601 (2011).
- 41. J. H. Jeon, A. V. Chechkin, and R. Metzler, in *First-Passage Phenomena and Their Applications*, Vol. 35, ed. by R. Metzler, S. Redner, and G. Oshanin, World Scientific (2014), p. 175.
- 42. A. Pal and V. V. Prasad, Phys. Rev. E 99, 032123 (2019).
- 43. D. O'Malley, J. H. Cushman, and G. Johnson, J. Stat. Mech.: Theory and Experiment 2011, L01001 (2011).
- 44. S. Song, S. J. Park, M. Kim, J. S. Kim, B. J. Sung, S. Lee, J.-H. Kim, and J. Sung, PNAS 116, 12733 (2019).
- 45. Н. Г. Ван Кампен, Стохастические процессы в физике и химии, Высшая школа, Москва (1990).
- 46. A. V. Chechkin, F. Seno, R. Metzler, and I. M. Sokolov, Phys. Rev. X 7, 021002 (2017).
- 47. N. Destainville, A. Sauliere, and L. Salome, Biophys. J. 95, 3117 (2008).

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА И ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ ДЕКОРИРОВАННОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА НА КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

В. А. Мутайламов^{*}, А. К. Муртазаев

Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук 367003, Махачкала, Россия

> Поступила в редакцию 15 февраля 2021 г., после переработки 15 марта 2021 г. Принята к публикации 15 марта 2021 г.

С использованием методов вычислительной физики исследовано статическое критическое поведение трехмерной декорированной модели Изинга на кубической решетке. Рассмотрен случай, когда обменное взаимодействие между узловыми спинами $J_n = -1$ является антиферромагнитным, а взаимодействие J_d между узловыми спинами и декорированными изменяется в пределах [-3.0; 3.0]. Для различный значений J_d определено основное состояние модели, вычислены критические температуры и критические индексы, построена фазовая диаграмма. Показано, что при любых соотношениях обменных взаимодействий в модели при переходе из упорядоченного состояния в парамагнитное наблюдается фазовый переход второго рода, а критические индексы близки к значениям для стандартной модели Изинга.

DOI: 10.31857/S0044451021070129

1. ВВЕДЕНИЕ

В современной физике конденсированного состояния интенсивно изучаются модели магнитных материалов, в которых помимо обменных взаимодействий учитываются различные усложняющие факторы, не учитываемые моделями первого приближения. Эти факторы могут оказывать значительное влияние на характер критического поведения магнетиков и приводить к появлению большого разнообразия магнитных упорядоченных состояний и фазовых переходов между ними.

В последние годы возрос интерес к исследованию декорированных структур благодаря разнообразию наблюдаемых в них новых явлений и особенностей по сравнению с исходными недекорированными решетками. В частности, декорирование порождает множество фрустрационных эффектов, может приводить как к подавлению фазовых переходов, существующих в недекорированных решетках, так и к возникновению новых фазовых переходов. Кроме того, появляются новые типы частичного упорядочения, а также дополнительные экстремумы теплоемкости. Богатство критического поведения декорированных решеток обусловлено возможностью многократного декорирования.

Понятие декорированная решетка, относящееся к магнитной модели Изинга, впервые предложено в 1951 г. в работе Сиози [1]. Суть его заключается во введении дополнительных спинов в промежутки между узлами исходной решетки. Это понятие можно обобщить и на другие типы кристаллических решеток. Фактически, подавляющее большинство реальных структур являются декорированными.

Большого прогресса достигло исследование планарных декорированных структур методами теоретической физики. Так, например, найдены точные решения для декорированных моделей со смешанными спинами на двумерной квадратной решетке [2, 3], точное решение для двукратно декорированной модели на квадратной решетке [4]. Исследованы магнитные и магнитокалорические свойства с построением фазовых диаграмм основного состояния модели Изинга со смешанными спинами на треугольной решетке [5]. Изучены декорированные структуры на квадратной решетке с многоспиновым взаимодействием [6, 7].

При изучении критических свойств моделей магнитных материалов успешно применяются и мето-

^{*} E-mail: vadim.mut@mail.ru

ды вычислительной физики. В частности, данные методы применялись нами ранее для изучение критических свойств двумерной декорированной модели Изинга на квадратной решетке [8, 9]. Методы численного эксперимента применимы для структур, для которых нет точного аналитического решения. Это, как правило, трехмерные модели, модели со сложным гамильтонианом, учитывающим влияние дополнительных факторов (внешнее поле, анизотропия и т. п.). Методы вычислительной физики строго математически обоснованы и позволяют исследовать критические свойства широкого спектра моделей магнитных материалов.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД

Нами методами численного эксперимента исследовано статическое критическое поведение трехмерной декорированной модели Изинга на кубической решетке. В данной модели декорированные спины располагаются между узлами исходной кубической решетки в x-, y- и z-направлениях. Рассмотрен случай, когда обменное взаимодействие присутствует как между спинами, расположенными в узлах решетки (узловые спины), так и между декорированными спинами и узловыми. Схематически структура решетки приведена на рис. 1.

Гамильтониан исследованной модели может быть представлен в следующем виде:

$$H = -\frac{1}{2}J_n \sum_{i,j} S_i S_j - \frac{1}{2}J_d \sum_{k,l} S_k S_l, \quad S_i = \pm 1, \quad (1)$$

где S_i — изинговский спин в узле решетки i, первая сумма учитывает обменное взаимодействие между



Рис. 1. Декорированная модель Изинга на кубической решетке (о — узловые спины, • — декорированные)

узловыми спинами, а вторая сумма — обменное взаимодействие между узловыми и декорированными спинами.

Обменное взаимодействие между узловыми спинами являлось антиферромагнитным и его величина $J_n = -1$ не менялась в ходе моделирования. При этом обменное взаимодействие между узловыми спинами и декорированными изменялось в широких пределах от антиферромагнитного с величиной $J_d = -3$ до ферромагнитного $J_d = 3$.

В процессе исследований нами моделировались частицы кубической формы с периодическими граничными условиями, содержащие $L \times L \times L$ элементарных ячеек в каждом кристаллографическом направлении. Как видно на рис. 1, на каждую кристаллографическую ячейку приходится один узловой спин и три декорированных. Частица ориентировалась в пространстве таким образом, чтобы оси координат совпадали с кристаллографическими осями.

Вычисления проводились как стандартным алгоритмом Метрополиса метода Монте-Карло [10, 11], так и методом Ванга-Ландау [12]. Метод Ванга-Ландау использовался для определения основного состояния спиновой системы при различных значениях J_d , для получения температурных зависимостей теплоемкости, модуля намагниченности и энтропии, для построения фазовой диаграммы. Результаты получены в температурном интервале от T = 0.01 до T = 10 с шагом $\Delta T = 0.01$ (температура приведена в единицах обменного интеграла $k_B T/|J_n|$, где k_B — постоянная Больцмана). Исследовались частицы с линейным размером L = 6, содержащие N = 864 спина. Выбранного размера достаточно для получения достоверной качественной картины за приемлемое время вычислений. Для улучшения статистики проводилось пять процессов моделирования при каждом значении Ја. Полученные результаты усреднялись между собой.

Алгоритм Метрополиса использовался для определения критических индексов и критических температур при нескольких значениях J_d . Моделировались частицы с линейными размерами от L = 10 до L = 30, содержащие соответственно от N = 4000до N = 108000 спинов. Вычисления проводились при температурах вблизи точки фазового перехода. В ходе моделирования для приведения спиновой системы в состояние термодинамического равновесия отбрасывался начальный неравновесный участок Марковской цепи в $5 \cdot 10^4$ шагов Монте-Карло на спин, заведомо больший, чем время релаксации исследуемой частицы. В равновесном состоянии вычислялись средние по ансамблю значения термодинамических величин. Длина равновесного участка составляла $1.5 \cdot 10^5$ шагов Монте-Карло на спин. Для улучшения статистики при каждой температуре Tдля всех линейных размеров L и значений обменного взаимодействия J_d проводилось десять процессов моделирования при различных начальных спиновых конфигурациях. Полученные результаты усреднялись между собой.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

3.1. Основное состояние

Для определения основного состояния анализировались спиновые конфигурации, получаемые в ходе моделирования методом Ванга – Ландау, соответствующие минимуму энергии. Всего было получено четыре типа основного состояния в зависимости от величины обменного взаимодействия J_d .

При значениях $J_d < -1$ спиновая система упорядочена антиферромагнитно: все узловые спины направлены в одну сторону, а все декорированные в другую. Число узловых спинов составляет 1/4 от общего числа спинов, число декорированных 3/4. В результате суммарный магнитный момент оказывается нескомпенсированным на величину 1/2. Модель фактически является ферримагнитной.

При значениях $J_d > 1$ система находится в ферромагнитном состоянии: узловые и декорированные спины направленны в одну сторону.

В области значений $-1 < J_d < 1$ в основном состоянии подрешетка узловых спинов упорядочена антиферромагнитно, а подрешетка декорированных спинов полностью разупорядочена. Суммарный магнитный момент в данном случае равен нулю. При этом в спиновой системе наблюдается вырождение в основном состоянии и появляются фрустрации, обусловленные конкуренцией обменных взаимодействий между узловыми и декорированными спинами. Строго говоря, модель не является полностью фрустрированной, так, здесь мы имеем дело с вырождением не всей спиновой системы, а лишь ее части. Такое состояние спиновой системы часто называют частично разупорядоченным.

При значениях $J_d = -1$ и $J_d = 1$ модель является полностью фрустрированной: разупорядочена не только декорированная подрешетка, но и узловая. Соответственно, фрустрации в данном случае обусловлены конкуренцией обменных взаимодействий как между узловыми и декорированными спинами, так и между узловыми спинами.



Рис. 2. Зависимость модуля вектора намагниченности от температуры при различных значениях обменного взаимодействия J_d

3.2. Термодинамические функции

На рис. 2 представлена зависимость модуля намагниченности М от температуры для различных значений обменного взаимодействия J_d (здесь и далее все величины приведены в относительных единицах). Для всех значений обменного взаимодействия в интервале $-1 \le J_d \le 1$ кривые намагниченности лежат вблизи нулевого значения и накладываются друг на друга, поэтому на графике для наглядности приведена только одна кривая для случая $J_d = 0$. При остальных значениях обменного интеграла наблюдается переход в парамагнитное состояние с ростом температуры. С ростом по модулю величины J_d область перехода смещается в сторону более высоких температур. Как следует из графика, температуры перехода совпадают для одинаковых значений $|J_d|$.

Температурные зависимости энтропии S приведены на рис. 3. Кривые энтропии для равных по модулю значений J_d точно накладываются друг на друга. В области значений $|J_d| \le 1$ для наглядности на рисунке приведен лишь один график, так как все кривые при таких значениях J_d расположены близко друг к другу. Как видно на графике, энтропия стремится к нулю при $T \to 0$ для значений обменного интеграла $|J_d| > 1$. При значениях $|J_d| \le 1$ энтропия стремится к отличному от нуля значению, что также указывает на наличие вырождения в основном состоянии. При $|J_d| = 1$ для линейного размера L = 6 это значение составило 0.525(1), а при $|J_d| < 1$ находится в диапазоне от 0.520(1) до 0.521(1). С ростом температуры энтропия для всех значений обменного интеграла стремится к величине $S = \ln(2)$.



Рис. 3. Зависимость энтропии от температуры при различных значениях обменного взаимодействия J_d



Рис. 4. Зависимость теплоемкости от температуры при различных значениях обменного взаимодействия J_d

На рис. 4 приведена зависимость теплоемкости C от температуры для различных значений $|J_d|$. Как и в случае с энтропией, графики для равных по модулю значений J_d накладываются друг на друга. На рисунке видно, что при $|J_d| > 1$ теплоемкость имеет ярко выраженные максимумы, соответствующие переходу из упорядоченного состояния в парамагнитное. С увеличением $|J_d|$ максимумы смещаются в строну более высоких температур. Максимумы при $|J_d| \leq 1$ соответствуют переходу из частично разупорядоченного состояния в парамагнитное. По сравнению с $|J_d| > 1$ они имеют более широкую форму пика, меньше по абсолютному значению и с увеличением $|J_d|$ смещаются в сторону более низких температур.



Рис. 5. Дополнительные экстремумы теплоемкости при величине обменного взаимодействия $|J_d| = 1.05$

3.3. Дополнительные экстремумы теплоемкости

Отдельно необходимо выделить небольшую область значений обменного интеграла $1 < |J_d| \le 1.2$, в которой на графике теплоемкости наблюдаются три экстремума. Пример такой зависимости приведен на рис. 5 для случая $|J_d| = 1.05$. Первый максимум имеет ярко выраженный характер и соответствует переходу из упорядоченного состояния в парамагнитное. Второй и третий максимумы более широкие и меньше первого по высоте. С увеличением обменного взаимодействия J_d второй и третий максимумы еще больше уменьшаются по высоте и нам не удалось их обнаружить при значениях $|J_d| > 1.2$. Появление этих максимумов связано с особенностями упорядочения магнитных подрешеток исследуемой модели.

После перехода в парамагнитное состояние с ростом температуры подрешетка декорированных спинов все время остается в разупорядоченном состоянии. В подрешетке же узловых спинов начинает наблюдаться антиферромагнитное упорядочение, которое возрастает с ростом температуры. Таким образом, спиновая конфигурация становится похожа на спиновую конфигурацию в частично разупорядочены на спиновую конфигурацию в частично разупорядочены с < 1: декорированные спины разупорядочены, узловые упорядочены антиферромагнитно. Дальнейший рост температуры приводит к разупорядочению уже и узловой подрешетки.

Сказанное демонстрирует рис. 6, на котором приведены температурные зависимости параметров порядка η спиновых подрешеток. График получен ал-



Рис. 6. Зависимость параметров порядка узловой подрешетки (\circ) и декорированной подрешетки (\triangle) от температуры. L = 14, $J_d = 1.10$

горитмом Метрополиса для линейного размера L = 14 при величине обменного взаимодействия $J_d = 1.10$. В качестве параметра порядка для декорированной подсистемы использовался модуль ее вектора намагниченности, а для узловой подсистемы модуль ее вектора антиферромагнетизма. Рост параметра порядка подрешетки узловых спинов соответствует второму максимуму теплоемкости, а спад параметра порядка — третьему.

Нам не удалось установить причину такого аномального поведения параметра порядка. Величина обменного взаимодействия J_d близка к области значений, при которых модель находится в частично разупорядоченной фазе. Вероятно, при небольших температурах часть спиновой системы из-за тепловых флуктуаций может легко переходить из парамагнитного состояния в частично разупорядоченное и обратно. Поскольку этим состояниям соответствуют различные значения энергии, то переходы между ними увеличивают энергетические флуктуации. Рост флуктуаций энергии приводит к закономерному росту теплоемкости и появлению второго экстремума на ее температурной зависимости.

Таким образом, в модели при данных условиях одновременно присутствуют две фазы: парамагнитная и частично разупорядоченная. С ростом температуры доля частично разупорядоченной фазы увеличивается и достигает своего максимального значения. Хотя при этом, как видно на рис. 6, она не полностью вытесняет парамагнитную фазу, так как параметр порядка подрешетки узловых спинов не достигает единицы. Количество переходов между



Рис. 7. Фазовая диаграмма, построенная по максимумам теплоемкости для линейного размера L = 6: AF — антиферромагнитная фаза, F — ферромагнитная, PD — частично разупорядоченная, MF — смешанная, P — парамагнитная

фазами уменьшается, что приводит к уменьшению энергетических флуктуаций и спаду второго экстремума теплоемкости.

Дальнейшее повышение температуры приводит к уменьшению доли частично разупорядоченной фазы и полному переходу системы в парамагнитное состояние. Количество переходов спиновой системы из одного фазового состояния в другое опять увеличивается, возрастают флуктуации энергии, до тех пор пока вся спиновая система не перейдет в полностью парамагнитную фазу. Данный процесс формирует третий экстремум на температурной зависимости теплоемкости.

3.4. Фазовая диаграмма

Температурные зависимости теплоемкости для различных значений обменного взаимодействия J_d использовались нами для построения фазовой диаграммы. Границы фаз определялись по положению максимумов теплоемкости. Итоговая фазовая диаграмма исследуемой модели для линейного размера L = 6 приведена на рис. 7. Как было сказано выше, нам не удалось обнаружить второй и третий максимумы теплоемкости при $|J_d| > 1.2$. Соответственно, нам не удалось определить точную границу между смешанной и парамагнитной фазами при данных значениях обменного взаимодействия. На графике эта граница указана пунктиром при $|J_d| = 1.2$. Вертикальные линии при значениях $|J_d| = 1$ соответствуют полностью фрустрирован-



Рис. 8. Зависимость производной логарифма плотности состояний от энергии. $L = 06, J_d = 1.10$

ному состоянию исследуемой модели. Как видно на рисунке, фазовая диаграмма симметрична относительно линии $J_d = 0$. Различается лишь тип упорядочения при различных значениях обменного взаимодействия $|J_d| > 1$: антиферромагнитное при отрицательных значениях и ферромагнитное при положительных.

3.5. Тип фазового перехода

Отдельного внимания заслуживает изучение фазового перехода из упорядоченного состояния в парамагнитное. Для определения типа перехода мы использовали производную логарифма плотности состояний по энергии и гистограммы энергии.

Производная логарифма плотности состояний g(E) по энергии E позволяет получить зависимость обратной температуры от энергии. В случае фазового перехода первого рода эта зависимость имеет характерную S-образную форму, симметричную относительно горизонтальной линии, соответствующей обратной температуре фазового перехода $1/T_c$ [13]. В случае фазового перехода второго рода график производной имеет горизонтальный участок, приходящийся на значение $1/T_c$. На рис. 8 приведена зависимость производной плотности состояний от энергии для значения обменного взаимодействия $J_d = 1.10$. Как видно на рисунке, в области $1/T_c$ на графике отсутствует S-образная форма, но имеется горизонтальный участок. Аналогичные зависимости наблюдались и при других значениях обменного взаимодействия J_d.



Рис. 9. Гистограмма энергии для величины обменного взаимодействия $J_d = 1.15, L = 48, T = 0.26375$

Моделирование алгоритмом Метрополиса генерирует ненормализованное каноническое распределение при заданной температуре. В случае фазового перехода первого рода распределение при температуре фазового перехода будет иметь два максимума, расположенных симметрично относительно равновесного значения энергии [14]. В случае фазового перехода второго рода должен наблюдаться один максимум, приходящийся на равновесное значение энергии. Форму канонического распределения воспроизводит гистограмма энергии, которая показывает, сколько раз в процессе моделирования выпадало то или иное энергетическое состояние спиновой системы. Отметим, что наличие двух максимумов однозначно указывает на фазовый переход первого рода, тогда как их отсутствие еще не служит доказательством фазового перехода второго рода. Два пика могут быть не обнаружены при малых линейных размерах модели, неточном определении критической температуры, слабой статистике.

Нами был получен только один максимум на гистограммах энергии при различных значениях обменного взаимодействия J_d . На рис. 9 приведена типичная нормированная на максимальное значение гистограмма, построенная для $J_d = 1.15$. Для ее получения использовалась частица с линейным размером L = 48, содержащая N = 442368 спинов. Моделирование проводилось при температуре T == 0.26375. В ходе вычислений отбрасывался неравновесный участок в $5 \cdot 10^4$ шагов Монте-Карло на спин, длина равновесного участка составила $9 \cdot 10^5$ шагов Монте-Карло на спин.

Таким образом, при всех значениях J_d нам не удалось обнаружить признаков фазового перехода первого рода. По всей видимости в исследованном диапазоне обменных взаимодействий переход из упорядоченного состояния в парамагнитное является фазовым переходом второго рода. Исходя из этого, нами с использованием теории конечно-размерного скейлинга была произведена оценка значений критических индексов намагниченности β , восприимчивости *γ* и радиуса корреляции *ν*. Для определения критических температур использовался метод куммулянтов Биндера четвертого порядка [15,16], а термодинамические функции вычислялись по флуктуационным соотношениям [16]. В результате нами было получено, что для всего диапазона $|J_d| >$ > 1 значение критических индексов составило $\beta =$ $= 0.33(1), \gamma = 0.25(1)$ и $\nu = 0.64(2)$. Эти значения совпадают со значениями индексов, полученных для «обычной» модели Изинга на простой кубической решетке: $\beta = 0.32630(22), \gamma = 1.23701(28)$ и $\nu =$ = 0.629912(86) [16].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Добавление декорированных спинов в антиферромагнитную модель Изинга на кубической решетке в значительной степени может изменять свойства модели. От величины и знака обменного взаимодействия между узловыми спинами и декорированными зависит тип упорядочения в основном состоянии, появляются фрустрационные эффекты, возникают дополнительные экстремумы теплоемкости. Появляется смешанная фаза в определенной области температур и значений обменного взаимодействия. При этом для любых значений обменного взаимодействия переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную и из ферромагнитной фазы в парамагнитную является фазовым переходом второго рода. Критические индексы вдоль всей линии фазового перехода второго рода соответствуют критическим индексам изинговского класса универсальности статического критического поведения.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. I. Syozi, Prog. Theor. Phys. 35, 306 (1951).
- J. Strečka, M. Rebič, O. Rojas, and S. M. de Souza, J. Mag. Magn. Mater. 469, 655 (2019).
- J. Strečka, O. Rojas, and S. M. de Souza, Phys. Lett. A 383, 2451 (2019).
- H. Čenčariková, J. Strečka, and M. L. Lyra, J. Mag. Magn. Mater. 401, 1106 (2016).
- 5. L. Gálisová snd J. Strečka, Physica E 99, 244 (2018).
- M. Jaščur, V. Štubňa, K. Szałowski et al., J. Mag. Magn. Mater. 417, 92 (2016).
- V. Štubňa and M. Jaščur, J. Mag. Magn. Mater. 442, 364 (2017).
- Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин, А. К. Муртазаев и др., ФТТ 62, 683 (2020).
- V. A. Mutailamov and A. K. Murtazaev, Low Temp. Phys. 46, 1016 (2020).
- 10. D. P. Landau, Physica A 205, 41 (1994).
- К. Биндер, Методы Монте-Карло в статистической физике, Мир, Москва (1982).
- D. P. Landau, Shan-Ho Tsai, and M. Exler, Amer. J. Phys. 72, 1294 (2004).
- 13. Y. Komura and Y. Okabe, Phys. Rev. E 85, 010102(R) (2012).
- 14. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E 64, 056101 (2001).
- 15. K. Binder, Phys. Rev. Lett. 47, 693 (1981).
- 16. A. M. Ferrenberg, J. Xu, and D. P. Landau, Phys. Rev. E 97, 043301 (2018).

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА МЕЖСЛОЕВОЙ ПЕРЕНОС ЗАРЯДА И ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СЛОЕВ В ДВУХСЛОЙНОМ ДВУМЕРНОМ ОРГАНИЧЕСКОМ МЕТАЛЛЕ (BETS)₄CoBr₄(DCB)

Р. Б. Любовский a,b , С. И. Песоцкий $^{a,b^*}$, В. Н. Зверев c ,

Е. И. Жиляева^а, А. М. Флакина^а, Р. Н. Любовская^а

^а Институт проблем химической физики Российской академии наук 142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

^b Международная лаборатория сильных магнитных полей и низких температур 53-421, Вроцлав, Польша

> ^с Институт физики твердого тела Российской академии наук 142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

> > Поступила в редакцию 10 февраля 2021 г., после переработки 15 марта 2021 г. Принята к публикации 18 марта 2021 г.

Сопротивление и магнитосопротивление в органическом металле (BETS)₄CoBr₄(DCB) исследовано при атмосферном и гидростатическом давлениях до 10 кбар. Межслоевое сопротивление при атмосферном давлении увеличивается с понижением температуры до $T \approx 25$ K, а затем падает при дальнейшем уменьшении температуры. Поведение магнитосопротивления показывает некогерентный перенос во всем диапазоне температур. Низкотемпературное металлоподобное поведение связано с переносом через резонансные примеси. Давление ослабляет неметаллический рост сопротивления, но перенос остается некогерентным. Фурье-спектр осцилляций Шубникова – де Гааза при атмосферном давлении содержит две основные частоты, $F_{\alpha} \approx 860$ Tл и $F_{\beta} \approx 4400$ Tл, с циклотронными массами $m_{\alpha} \approx 1.0m_e$ и $m_{\beta} \approx 1.9m_e$. Приложенное давление увеличивает основные частоты на несколько процентов. Скорее всего, это связано с уменьшением размеров элементарной ячейки под давлением. Циклотронная масса под давлением практически не меняется.

DOI: 10.31857/S0044451021070130

1. ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известные традиционные органические квазидвумерные металлы представляют собой монокристаллические образцы катион-радикальных солей, синтезированных на основе молекулы бис(этилендитио)тетратиафульвалена (BEDT-TTF) или ее производных. В процессе синтеза образуются слоистые образцы, в которых катион-радикальные слои, состоящие из молекул BEDT-TTF и обладающие металлической проводимостью вдоль слоя, чередуются с непроводящими анионными слоями [1–3]. В результате получается слоистый органический металл с анизотропией проводимости (отношение проводимости вдоль слоя к проводимости перпендикулярно слоям) примерно 10^3-10^4 при комнатной температуре. Как правило, в традиционном органическом металле кристаллическая и электронная структуры соседних катион-радикальных слоев одинаковы. Это приводит к одной и той же поверхности Ферми для каждого слоя катион-радикалов. Важной особенностью многих традиционных органических металлов является снижение как внутрислоевого, так и межслоевого сопротивления при понижении температуры [3].

В данной работе представлены результаты исследования органического металла $(BETS)_4CoBr_4(DCB)$ (DCB = $C_6H_4Cl_2$), который

^{*} E-mail: pesot@icp.ac.ru



Рис. 1. Температурные зависимости внутрислоевого (1) и межслоевого (2) сопротивлений в (BETS)₄CoBr₄(DCB) при атмосферном давлении (данные из работы [6]). Вставка — схематическое изображение геометрии контактов для измерения внутрислоевого (1) и межслоевого (2) сопротивлений

принадлежит к новому семейству квазидвумерных органических металлов, так называемых двухслойных металлов, свойства которых заметно отличаются от свойств традиционных органических металлов [4, 5]. В этих материалах электронная и кристаллическая структуры соседних катион-радикальных слоев различны и свойства катион-радикального слоя транслируются через слой.

Анализ структуры и свойств (BETS)₄CoBr₄(DCB) [4, 6, 7] выявил наличие двух различных чередующихся катион-радикальных слоев. Расчет зонной структуры показал, что один из слоев представляет собой изолятор с очень малой щелью. Второй слой представляет собой металл с поверхностью Ферми, характерной для упаковки молекул BETS θ -типа (см. ниже вставку к рис. 2). Исследования квантовых осцилляций в (BETS)₄CoBr₄(DCB) показали хорошее согласие частотного спектра квантовых осцилляций с теоретическими расчетами для традиционных металлов с упаковкой θ -типа [6, 7]. Этот спектр содержит частоты, связанные с движением по замкнутым орбитам, и частоты, вызванные интерференционными процессами.

Внутрислоевое сопротивление соединения $(BETS)_4CoBr_4(DCB)$ (рис. 1) демонстрирует характеристики традиционного металлического типа. В то же время температурная зависимость межслоевого сопротивления, показанная на рис. 1, значительно отличается от таковой для большинства традиционных органических слоистых металлов [3]. При этом подобная зависимость уже наблюдалась в некоторых двухслойных металлах [4].

Особый интерес представляет характер изменения режима температурной зависимости межслоевого сопротивления при низких температурах. Обычно межслоевой электронный перенос можно отнести к трем возможным режимам [2, 3, 8, 9]: когерентному, некогерентному и слабонекогерентному. При когерентном переносе время рассеяния электронов, τ_c , внутри слоя намного больше времени перехода на соседний слой, $\tau_z = \hbar/t_z$, где t_z — интеграл переноса между слоями. Следовательно, электрон может пройти через много слоев, прежде чем он рассеется в слое. В этом случае определена составляющая p_z импульса электрона, межслоевой перенос имеет обычный металлический характер, а вся система представляет собой анизотропную трехмерную систему. В некогерентном режиме, $\tau_c \ll \tau_z$, электрон многократно рассеивается в слое, прежде чем перейдет на следующий слой с измененным импульсом. В этом случае составляющая импульса p_{z} не определена, электронная система имеет двумерный характер, а межслойный перенос осуществляется в основном за счет прыжков, вызванных взаимодействием электрона с дефектами решетки и фононами. Температурная зависимость межслоевого сопротивления имеет неметаллический характер, и сопротивление возрастает с понижением температуры.

Однако если существует ненулевой интеграл переноса t_z между соседними слоями, даже в случае сильного рассеяния внутри слоя, $\tau_c \ll \tau_z$, то всегда существует вероятность прямого одночастичного туннелирования электрона на соседний слой с сохранением импульса. Межслоевое сопротивление ρ_z , связанное с таким процессом, имеет металлоподобную температурную зависимость, определяемую рассеянием внутри слоя:

$$\rho_z(T) \sim \rho_c(T) \left(\frac{t_c}{t_z}\right)^2 \left(\frac{c}{d}\right)^2$$

где ρ_c и t_c — внутрислоевые сопротивление и интеграл переноса, c — период решетки в слое, d — расстояние между слоями [2, 3]. В этом случае после однократного туннельного процесса электрон многократно рассеивается в слое и полный перенос остается некогерентным, импульс p_z по-прежнему не определен и система является двумерной. Это так называемый режим слабонекогерентного переноса. Общая температурная зависимость межслоевого сопротивления в условиях сильного рассеяния внут-

ри слоя определяется конкуренцией между прыжковым переносом и прямым туннелированием [10].

Рассмотренные выше режимы имеют существенные различия в поведении магнитосопротивления [11-13]. В данной работе на основе анализа температурных, полевых и угловых зависимостей магнитосопротивления обсуждаются особенномежслоевого электронного сти транспорта в двумерном двухслойном органическом металле $(BETS)_4CoBr_4(DCB)$, а также оценивается влияние гидростатического давления до 10 кбар на межслоевой перенос и на электронную структуру этого металла.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

Были измерены монокристаллические образцы в виде неправильных параллелепипедов со средним размером $1.0 \times 0.5 \times 0.1$ мм³. Проводящие слои перпендикулярны наименьшему размеру кристалла. Измерения межслоевого и внутрислоевого сопротивлений проводились стандартным четырехконтактным методом на переменным токе, направленном перпендикулярно или параллельно проводящим слоям. Учитывая сильную анизотропию сопротивления, для разных направлений тока мы использовали разные геометрии измерительных контактов (вставка на рис. 1). Измерения магнитосопротивления проводились в сверхпроводящем магните с максимальным полем 15 Тл с помощью вставки, позволяющей изменять ориентацию образца в поле как в полярной, так и в азимутальной плоскостях, не извлекая образец из магнита. Измерения под давлением проводились в ячейке высокого давления типа поршень-цилиндр с передающей давление гидрофобной кремнеорганической жидкостью. В исследованиях при атмосферном давлении и в ячейке высокого давления использовались разные образцы, имеющие одинаковый химический состав.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Температурные зависимости относительного межслоевого сопротивления и сопротивления вдоль проводящих слоев для монокристалла (BETS)₄CoBr₄(DCB) при атмосферном давлении представлены на рис. 1.

Сопротивление вдоль слоев монотонно уменышается при охлаждении до гелиевых температур почти на два порядка. Это соответствует нормальной температурной зависимости сопротивления металлов. Межслоевое сопротивление практически монотонно возрастает с понижением температуры до



Рис. 2. Полевые зависимости продольного (1) и поперечного (2) межслоевых магнитосопротивлений. Измерительный ток перпендикулярен проводящей плоскости, T = 1.5 К, P = 1 бар. Левая вставка — осцилляции Шубникова-де Гааза (увеличенная часть кривой 1 в интервале полей 12.5-14 Тл). Правая вставка — схематическое изображение поверхности Ферми в $(BETS)_4 CoBr_4(DCB)$ [6,7]

температуры $T_{max} = 25$ К. Дальнейшее охлаждение сопровождается уменьшением сопротивления. Неметаллический тип температурной зависимости при понижении температуры для двухслойных металлов вполне ожидаем. В отличие от традиционных квазидвумерных органических металлов, расстояние между двумя соседними одинаковыми металлическими слоями вдвое больше, $d \approx 30$ Å [4], перекрытие волновых функций намного меньше и, соответственно, интеграл переноса t_z существенно меньше. Таким образом, условие сильнонекогерентного переноса, $\tau_{\rm c} \ll \tau_z$, по-видимому, надежно выполняется, и межслоевой перенос заряда обусловлен прыжковым механизмом и имеет неметаллическую температурную зависимость до достижения очень низких температур. Однако можно предположить, что при определенном значении интеграла межслоевого переноса туннелирование на соседний слой с сохранением импульса начинает играть доминирующую роль в межслоевом переносе при низких температурах и температурная зависимость сопротивления приобретает металлический тип, характерный для слабонекогерентного электронного транспорта. В этом случае температуру T_{max} можно рассматривать как температуру смены режима межслоевого транспорта с некогерентного на слабонекогерентный.

На рис. 2 показаны полевые зависимости межслоевого магнитосопротивления соединения



Рис. 3. Угловая зависимость межслоевого магнитосопротивления в полярной плоскости. Азимутальный угол произвольный, T = 1.5 К, B = 14 Тл, P = 1 бар

(BETS)₄CoBr₄(DCB) при атмосферном давлении в магнитном поле, перпендикулярном (продольное магнитосопротивление) и параллельном (поперечное магнитосопротивление) проводящим слоям, с измерительным током, перпендикулярным проводящим слоям. На полевых зависимостях продольного магнитосопротивления наблюдаются осцилляции Шубникова – де Гааза, которые уже хорошо видны в полях B > 10 Тл. Частотный спектр колебаний содержит основные частоты $F_{\alpha} \approx 860$ Тл и $F_{\beta} \approx 4400$ Тл и набор комбинационных частот [6,7]. Неосциллирующая часть полевой зависимости продольного магнитосопротивления монотонно возрастает с увеличением поля. Поперечное магнитосопротивление также растет с увеличением поля, но примерно на порядок меньше. Такое поведение неосциллирующей части магнитосопротивления в слоистых металлах характерно как для некогерентного, так и для слабонекогерентного межслоевого электронного транспорта [11–13].

На рис. 3 показана зависимость магнитосопротивления от полярного угла θ между направлением поля и нормалью к проводящим слоям при атмосферном давлении. Азимутальный угол в плоскости проводящих слоев выбран произвольно. Данная зависимость практически не меняется при изменении азимутального угла.

Сравнительный анализ угловой и полевой зависимостей магнитосопротивления соединения (BETS)₄CoBr₄(DCB) позволяет сделать следующие выводы: 1) поперечное магнитосопротивление изотропно в азимутальной плоскости и не превышает

нескольких процентов в максимальном магнитном поле, параллельном проводящим слоям; 2) угловая зависимость в полярной плоскости определяется главным образом проекцией поля на нормаль к проводящим слоям. Такое поведение неосциллирующей части угловой зависимости магнитосопротивления характерно как для слабонекогерентного [14], так и для некогерентного межслоевого переноса [15] и связано с неопределенностью составляющей импульса p_z при реализации обоих режимов.

Однако только для случая слабонекогерентного переноса следует ожидать полуклассических угловых осцилляций (angular magnetoresistance oscillations, AMRO) на угловой зависимости магнитосопротивления при достаточно сильном магнитном поле, $\omega_c \tau_c \geq 1$, где ω_c — циклотронная частота [11, 12]. В исследуемых образцах это соотношение достигается уже в полях B > 10 Тл, что подтверждается наблюдением в них осцилляций Шубникова-де Гааза (см. рис. 2). В то же время на угловых зависимостях магнитосопротивления нет признаков AMRO даже при самых низких температурах. Таким образом, межслоевой перенос при температурах ниже T_{max} не соответствует слабонекогерентному режиму. Скорее всего, некогерентный перенос происходит в (BETS)₄CoBr₄(DCB) во всем диапазоне температур от комнатной до гелиевых. Можно предположить, что этот перенос происходит одновременно по двум некогерентным параллельным каналам. Первый канал связан с прыжками между соседними слоями в результате взаимодействия электронов с фононами и дефектами решетки. С понижением температуры сопротивление этого канала увеличивается. Второй некогерентный канал позволяет переносить электроны между слоями через резонансные примеси с уровнями энергии вблизи уровня Ферми металлического катион-радикального слоя [16]. Такие примеси должны располагаться между проводящими слоями.

Расчеты в простейшем приближении показали, что при очень малой концентрации резонансных примесей, $n_i \ll N$, где N — концентрация всех других примесных центров, сопротивление резонансного канала $\rho_i(T)$ примерно пропорционально внутрислоевому сопротивлению $\rho_c(T)$ и имеет металлический тип температурной зависимости [16]. Поскольку количество резонансных примесей невелико, сопротивление соответствующего канала при комнатной температуре может быть достаточно большим и значительно превышать сопротивление прыжкового канала. Однако при гелиевых температурах сопротивление резонансного канала падает в десятки



Рис. 4. Температурные зависимости относительного межслоевого сопротивления при давлениях P = 0.5 кбар (1), 4 кбар (2), 7 кбар (3), 10 кбар (4)

150

200

250

300 T, K

50

100

раз и может шунтировать сопротивление прыжкового канала (см. рис. 1).

Таким образом, общее межслоевое сопротивление при более высоких температурах в основном определяется сопротивлением, которое увеличивается с понижением температуры (прыжковый канал), а при более низких температурах — сопротивлением, которое уменьшается с понижением температуры (резонансный канал), что приводит к появлению T_{max} — температуры, при которой меняется характер зависимости.

Температурные зависимости межслоевого сопротивления $(BETS)_4CoBr_4(DCB)$ при разгидростатических личных внешних давлениях представлены на рис. 4. Приложение давления последовательно уменьшает неметаллический рост сопротивления, возникающий с понижением температуры. Этот факт неудивителен, поскольку давление уменьшает расстояние между металлическими слоями, увеличивая интеграл переноса и, следовательно, увеличивая вероятность прямого туннелирования электронов на соседний слой. В то же время, если давление слабо влияет на концентрацию резонансных примесей, можно предположить, что вклад этих примесей в межслоевой перенос должен сохраняться при высоких давлениях. Вероятно, этот эффект, наблюдается на рис. 4. Сдвиг T_{max} в сторону более низких температур с увеличением давления согласуется с этим предположением. Таким образом, внешнее давление, по-видимому, ослабляет рост сопротивления неметаллического типа при понижении температуры,



Рис. 5. Фурье-спектры осцилляций Шубникова – де Гааза при P = 1 бар (a), 10 кбар (b) и $\theta = 0$, T = 1.5 К

но даже давления P = 10 кбар недостаточно для полного подавления некогерентного межслоевого переноса в этом диапазоне температур (1.5–300 K).

В то же время давление P = 10 кбар не приводит к качественным изменениям электронной структуры металлических катион-радикальных слоев. На рис. 5 представлены фурье-спектры осцилляций Шубникова – де Гааза в (BETS)₄CoBr₄(DCB) при атмосферном давлении и при максимальном давлении P = 10 кбар. Эти спектры практически идентичны. (Свойства квантовых осцилляций при атмосферном давлении подробно исследованы в работах [6,7].) Спектр при P = 10 кбар содержит две основные частоты, $F_{\alpha} \approx 960$ Тл и $F_{\beta} \approx 4700$ Тл, связанные с α - и β -орбитами (см. вставку на рис. 2). Соответствующие циклотронные массы равны $m_{\alpha} =$ $= (1.0 \pm 0.1)m_e$ и $m_{eta} = (1.8 \pm 0.1)m_e$, где m_e – масса свободного электрона. Комбинационная частота $F_{\beta-\alpha} \approx 3750$ Тл также хорошо определена. Соответствующая циклотронная масса равна $m_{\beta-\alpha} =$ $= (0.9 \pm 0.1) m_e \approx m_\beta - m_\alpha$. Эта частота соответствует эффекту квантовой интерференции [17, 18].

Полученные результаты показывают отсутствие качественных изменений поверхности Ферми при давлении 10 кбар. Количественные изменения представляют собой небольшое (5–10 %) увеличение частоты осцилляций при повышении давления до 10 кбар. Такой рост легко объяснить уменьшением размера элементарной ячейки под давлением и, как следствие, увеличением размеров обратной ячейки и зоны Бриллюэна. С учетом того, что частота F_{β} соответствует β -орбите, покрывающей 100 % первой зоны Бриллюэна (два электрона на элементарную ячейку) [6], увеличение именно этой частоты позволяет точно оценить увеличение размера обратной элементарной ячейки в проводящей плоскости, что составляет примерно 6%. В то же время значения циклотронных масс под давлением практически не меняются, по крайней мере в пределах погрешности измерения.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе исследованы зависимости межслоевого сопротивления и магнитосопротивления в двумерном органическом двухслойном металле $(BETS)_4CoBr_4(DCB)$ от температуры, направления и величины магнитного поля и внешнего гидростатического давления до 10 кбар. Обсуждается природа максимума на температурной зависимости сопротивления. Приведены аргументы в пользу некогерентного межслоевого переноса электронов во всем диапазоне температур от 1.5 до 300 К. Скорее всего, при низких температурах перенос происходит в основном через резонансные примеси. Приложение внешнего гидростатического давления снижает рост межслоевого сопротивления неметаллического типа при высоких температурах, в то время как общий некогерентный межслоевой перенос сохраняется при всех температурах. Давление до 10 кбар не вызывает качественных изменений электронной структуры металлических слоев. Его влияние ограничивается небольшим количественным изменением площади поверхности Ферми, вызванным уменьшением размера элементарной ячейки.

Финансирование. Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (госрегистрация № АААА-А19-119092390079-8), а один из авторов (В. Н. З.) — Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 21-52-12027).

ЛИТЕРАТУРА

 G. Saito and Y. Yoshida, Bull. Chem. Soc. Jpn. 80(1), 1 (2007).

- 2. M. V. Kartsovnik, Chem. Rev. 104, 5737 (2004).
- M. V. Kartsovnik, in *The Physics of Organic Super*conductors and Conductors, ed. by A. Lebed, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg (2008), p. 185.
- R. Lyubovskaya, E. Zhilyaeva, A. G. Shilov et al., Eur. J. Inorg. Chem. 24, 3820 (2014).
- Т. Г. Прохорова, Э. Б. Ягубский, Успехи химии 86(2), 164 (2017) [Т. G. Prokhorova and E. B. Yagubskii, Russ. Chem. Rev. 86(2), 164 (2017)].
- Р. Б. Любовский, Г. В. Шилов и др., Письма в ЖЭТФ 98, 204 (2015) [R. B. Lyubovskii, S. I. Pesotskii, G. V. Shilov et al., JETP Lett. 98, 181 (2013)].
- A. Audouard, J.-Y. Fortin, D. Vignolles et al., Synth. Met. 226, 171 (2017).
- R. H. McKenzie and P. Moses, Phys. Rev. Lett. 81, 4492 (1998).
- P. Moses and R. H. McKenzie, Phys. Rev. B 60, 7998 (1999).
- 10. D. B. Gutman and D. L. Maslov, Phys. Rev. B 77, 035115 (2008).
- 11. P. D. Grigoriev, Phys. Rev. B 83, 245129 (2011).
- P. D. Grigoriev, M. V. Kartsovnik, and W. Biberacher, Phys. Rev. B 86, 165125 (2012).
- 13. P. D. Grigoriev, Phys. Rev. B 88, 054415 (2013).
- 14. M. V. Kartsovnik, D. Andres, S. V. Simonov et al., Phys. Rev. Lett. 96, 166601 (2006).
- Р. Б. Любовский, С. И. Песоцкий, О. А. Богданова и др., Изв. АН РАН, сер. Химическая № 7, 1340 (2011) [R. B. Lyubovskii, S. I. Pesotskii, О. А. Bogdanova et al., Rus. Chem. Bull. **60**, 1363 (2011)].
- M. V. Kartsovnik, P. D. Grigoriev, W. Biberacher, and N. D. Kushch, Phys. Rev. B 79, 165120 (2009).
- 17. L. M. Falicov and H. Stachowiak, Phys. Rev. 147, 505 (1966).
- R. W. Stark and C. B. Friedberg, Phys. Rev. Lett. 26, 556 (1971).

СВЯЗЬ ВЕЛИЧИН ПРОСТЫХ ЧИСЕЛ С ИХ НОМЕРАМИ

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 18 февраля 2021 г., после переработки 18 февраля 2021 г. Принята к публикации 18 февраля 2021 г.

Уравнение Эйлера порождает бесконечное число связей между величинами простых чисел и их номерами. Эти связи осуществляются условно сходящимися рядами. Аналитическая функция, осуществляющая эти связи, бесконечное число раз проходит через значение, равное единице. Расстояние между первой и второй такими точками оказывается аномально большим.

DOI: 10.31857/S0044451021070142

1. ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] было показано, что в распределении нулей дзета-функции Римана существует дальний порядок, что делает возможным установить номер нуля с точностью ± 1 , если известно значение только одного нуля, и однозначно, если известно значение трех последовательных нулей. Формула Эйлера устанавливает жесткую связь значений простых чисел с дзета-функцией Римана [2].

Точка z = 1 является простым полюсом дзета-функции. Это позволяет ввести две аналитические функции { κ, ξ }, связывающие значение простых чисел P с их номерами N. Полученная связь позволяет восстановить значение функций { κ, ξ } на полуоси P > 0. В качестве примера мы приводим значения функции κ в двух областях: $P < 10^6$ и $2.4 \cdot 10^7 < P < 5 \cdot 10^7$. Функция κ бесконечное число раз проходит через значение $\kappa = 1$. Значения функции ξ однозначно определены в целочисленных точках {N, P(N)}. Среднее расстояние между простыми числами δ равно $\ln(P/\kappa)$. Для получения уравнений для функций $\{\kappa, \xi\}$ воспользуемся уравнением Эйлера для дзета-функции Римана [2], записанным в виде

2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

$$\ln \zeta(z) = \sum_{P} \frac{1}{P^z} - \sum_{P} \left[\ln \left(1 - \frac{1}{P^z} \right) + \frac{1}{P^z} \right], \quad (1)$$

где *P* — простые числа. Функция Римана имеет простой полюс в точке *z* = 1. Используя разложение в ряд дзета-функции Римана

$$\zeta(z) = \frac{1}{z-1} \left\{ 1 + C(z-1) + \sum_{k=1}^{\infty} C_k (z-1)^{k+1} \right\}, \quad (2)$$

где *С* — константа Эйлера, получим из разложений (1), (2) следующее уравнение:

^{*} E-mail: ovc@itp.ac.ru

$$\sum_{N=1}^{\infty} \left(\frac{1}{N^z} - \frac{\ln P}{P^z} \right) = 2C + \sum_P \frac{\ln P}{P^z (P^z - 1)} + \frac{\sum_{k=1}^{\infty} C_k (z - 1)^k (k + 2) + (z - 1) \left(\sum_{k=1}^{\infty} C_k (z - 1)^k \right)^2 - C^2 (z - 1)}{1 + C(z - 1) + \sum_{k=1}^{\infty} C_k (z - 1)^{k+1}}.$$
 (3)

Ряды в правой части уравнения (3) быстро сходятся в окрестности z = 1 и порождают бесконечное число связей на простые числа P как функцию их номера N. В частности, находим первые два равенства

$$\sum_{N=1}^{\infty} \left(\frac{1}{N} - \frac{\ln P}{P}\right) = 2C + \sum_{P} \frac{\ln P}{P(P-1)},$$
$$\sum_{N=1}^{\infty} \left(\frac{\ln^2 P}{P} - \frac{\ln N}{N}\right) = \tag{4}$$

$$= -\sum_{P} \frac{\ln^2 P}{P-1} \left(\frac{1}{P} + \frac{1}{P-1} \right) + 3C_1 - C^2.$$

В результате оказывается возможным определить две аналитические функции $\{\kappa, \xi\}$ на полуоси P > 0:

$$P = N \ln\left(\frac{P}{\kappa}\right) + \xi \ln^2\left(\frac{P}{\kappa}\right),\tag{5}$$

где κ — медленная функция от P, а ξ — быстро осциллирующая неявная функция N, однозначно определенная в целочисленных точках $\{N, P(N)\}$. Величина $|\xi| \leq 1$.

Ряд в левой части *k*-го уравнения бесконечной системы равенства (4) может быть записан в виде

$$\sum_{N=1}^{\infty} \left(\frac{\ln^k N}{N} - \frac{\ln^{k+1} P}{P} \right). \tag{6}$$

Все эти ряды являются условно сходящимися. В результате функция { $\kappa(P), P > 0$ } бесконечное число раз проходит через значение $\kappa = 1$. В области $P \gg 1$ функция κ восстанавливается с помощью уравнения (5) и простых чисел в окрестности точки P. Ниже мы приведем значения функции $\kappa(P)$ в широкой области $N < 5 \cdot 10^7$, используя асимптотическое приближение и банк данных для простых чисел P(N).

Из первого уравнения (4) следует всего лишь условная сходимость ряда $\sum_{N} (1/N - \ln P(N)/P(N))$. Однако функция $\kappa(P)$, определяющая сходимость, является очень нетривиальной, и оценки для зависимости N(P), полученные в работах [3–5], оказываются довольно грубыми.

Первое значение величины P_0 , для которого $\kappa(P_0) = 1$, оказывается достаточно большим, и для его нахождения мы воспользуемся численными значениями функции $\kappa(P)$, полученными в асимптотическом приближении в трех точках, соответствующих значениям $\langle N \rangle$ равным $\langle N \rangle = \{6, 5, 4\}$:

$$\frac{P}{\kappa} = 9.33091735, \quad \kappa = 1.436086, \\ \frac{P}{\kappa} = 8.3311375, \quad \kappa = 1.2723356, \\ \frac{P}{\kappa} = 7.02868758, \quad \kappa = 1.10973776.$$
(7)

Интерполяция по трем точкам позволяет записать функцию
 κ в интервале $P_0 \leq P < 14$ в неявном виде:

$$\kappa = 1.2723356 + \alpha_1 \left(\frac{P}{\kappa} - 8.3311375\right) + \alpha_2 \left(\frac{P}{\kappa} - 8.3311375\right)^2, \quad (8)$$

где параметры α_1, α_2, P_0 равны

$$\alpha_1 = 0.1468733, \quad \alpha_2 = 1.6916836 \cdot 10^{-2}, \\ \{\kappa = 1, \quad P_0 = 5.6472442\}.$$
(9)

Из уравнений (8), (9) находим значения первой и второй производных κ по P в точке P_0 :

$$\frac{\partial \kappa}{\partial P}\Big|_{P=P_0} = 4.2584129 \cdot 10^{-2},$$

$$\frac{\partial^2 \kappa}{\partial P^2}\Big|_{P=P_0} = 1.2069243 \cdot 10^{-2}.$$
(10)



Рис. 1. Зависимость величины κ от $\ln(P/\kappa)$ в интервале $6.35 < \ln(P/\kappa) < 11.5$



Рис. 2. Зависимость величины κ от $\ln(P/\kappa)$ в интервале 15.24 $< \ln(P/\kappa) < 15.5; \kappa = 2.911 + 10^{-2}W;$ $\ln(P/\kappa) = 14.84 + T$

Используя формулы (9), (10), находим нечетную функцию $\kappa(P)$ в области $P \leq P_0$ (первые три члена разложения):

$$\kappa = \gamma_1 P + \gamma_2 P^3 + \gamma_3 P^5, \tag{11}$$

где константы $\gamma_{1,2,3}$ имеют следующие значения:

$$\gamma_1 = 0.303279, \quad \gamma_2 = -5.8058416 \cdot 10^{-3}, \\ \gamma_3 = 5.7965908 \cdot 10^{-5}.$$
 (12)

В табл. 1 мы приводим значения величины κ как неявной функции параметра P/κ в интервале $540 < < P < 7.3 \cdot 10^6$. Часть этих данных была использована для построения графика, представленного на рис. 1.

Значение величины P, при котором функция κ второй раз проходит через значение $\kappa = 1$, оказывается аномально большим, существенно превосходящим величину $P = 7.3 \cdot 10^6$. Поэтому целесообразно привести еще две таблицы значений функции κ в областях $8.16 \cdot 10^6 < P < 1.58 \cdot 10^7$ и $9.2 \cdot 10^8 < P <$ $< 9.825 \cdot 10^8$ (табл. 2, 3), а также график зависимости

Таблица 1. Зависимость величины κ от $\ln(P/\kappa)$ в интервале $5.35 < \ln(P/\kappa) < 14.74$

$\ln(P/\kappa)$	κ
5.35986733	2.532557395
6.361764094	2.7785552736
6.656853070	2.7376907868
7.138752753	2.7991641109
7.240179252	2.866279247
7.679349235	2.8825805393
8.1531214638	2.9498744213
8.7361532971	2.96730411698
8.9738055746	2.9580785715
9.1078202553	2.935500058
9.1641636965	2.919485504
9.7288761507	2.925208492
9.8249648932	2.9342652576
9.8613751177	2.9442329767
9.8759351769	2.9947880488
9.900228354	3.0065822195
9.928897597	2.9770170407
9.9451740301	2.97048106437
9.9744924046	2.964698903
10.0983306239	2.9327967962
10.4741457273	2.953829756
10.9297175937	2.9549719277
11.4952340659	2.9401961334
12.294175355	2.9401995052
12.758840765	2.9490812862
12.9966888249	2.94683360385
13.00172510718	2.94625054098
13.2011721141	2.94050117017
13.4388887258	2.9500020520
13.754458736	2.9360893117
13.991422373	2.9338110441
14.1882942799	2.93402098171
14.3527898788	2.9388529294
14.5045135422	2.9247033152
14.628134333	2.9259205748
14.737507751	2.93074136764

$\ln(P/\kappa)$	κ
14.842012977	2.9243479799
14.8420644714	2.92476583005
14.8422005715	2.925043205288
14.93482165159	2.92766521445
15.0221175005	2.92412428438
15.105787376	2.9215655575
15.1768393655	2.92145015378
15.2446168534	2.9218232556
15.2561829441	2.923054851016
15.2616646486	2.92704088393
15.2696793082	2.9258098905
15.27669576	2.9238602422
15.2835251379	2.92398668898
15.2885691113	2.92648243034
15.2944510732	2.92793492459
15.3018253923	2.9248193697
15.3089118352	2.9236628357
15.31630130749	2.91988575077
15.3230581547	2.91969750252
15.3410729589	2.9195137771
15.35243137362	2.91685184742
15.3748482399	2.9212716555
15.37861615754	2.92206461207
15.3809690351	2.9203751964
15.3817957353	2.91967658363
15.3841847891	2.91840517525
15.3956681915	2.91906708912
15.4072591843	2.91908981313
15.41813991587	2.9207073572
15.4296689062	2.91809831012
15.4355021939	2.919670940958
15.44077484115	2.920568271677
15.4454792496	2.919897317768
15.45287846854	2.917865400382
15.45722005856	2.91806190337
15.46372783078	2.91827610925
15.474893680726	2.917512899447
15.4811222298	2.91525849714
15.4859377749	2.9138585193
15.4882792369	2.9164619053
15.4912758845	2.918129923
15.4960674804	2.91782284429
15.498561695	2.917669126
15.502901555	2.9173601436
15 506369399	2 9159441886

Таблица 2. Зависимость κ от $\ln(P/\kappa)$ в интервале $14.84 < \ln(P/\kappa) < 15.51$

Таблица 3. Зависимость κ от величины $\ln(P/\kappa)$ в интервале $18.87 < \ln(P/\kappa) < 19.65$

$\ln(P/\kappa)$	κ
18.872100641387	2.883917549832
18.88530470456	2.883821647853
18.898513188825	2.88385749774
18.915277601838	2.883709814489
19.5834048502	2.8775419576
19.60644413388	2.876702036015
19.64044301007	2.87672022243
19.64099174063	2.87666572901
19.64148063226	2.87675655906
19.64207172507	2.87661380433
19.64280973796	2.8764997721
19.6431621368	2.87653112677
19.6436317364	2.8766133494
19.6448815012	2.8765666246
19.645324773	2.8764057000
19.6458210148	2.87652288395
19.646377446	2.876417377328
19.6469020285	2.87642625346
19.646903686	2.87642507113
19.6474709814	2.876316271829
19.6479757649	2.8763774043
19.64851833796	2.87633459382
19.6490325534	2.87636853505

 κ от $\ln(P/\kappa)$ в области $0.4 < \ln(P/\kappa) - 14.84 < 2/3$ (рис. 2). Эти данные позволяют провести хотя и грубую, но важную и все еще разумную оценку второго значения величины P, при которой $\kappa = 1$.

Величина κ является однозначной функцией P. Но функция $\ln(P/\kappa)$ не является монотонно растущей. Поэтому существуют узкие области, в которых величина κ как функция $\ln(P/\kappa)$ не является однозначной. Одна из таких областей расположена внутри интервала $1.548 \cdot 10^7 < P < 1.549 \cdot 10^7$. В табл. 4 мы приводим значения величины $\{\kappa, \ln(P/\kappa)\}$ в двенадцати точках P, лежащих внутри этого интервала.

Используя значение величи
н $\{P,\kappa\}$ в трех верхних строках табл. 2:

 $\{\ln(P/\kappa) = (14.8420129777; 14.8420644714;$ $14.8422005715)\},\$

135

T	$ ilde{\kappa}$	x
2011.42105263	4.351222317	8.554212465
3796.68421052	3.997343055	8.57788639
4883.14035087	3.74338389	8.593618401
5519.6545455	3.858519304	8.593777486
5892.5438596	4.060487546	8.589254386
6367.36363636	4.11998825	8.590278655
6815.350877193	4.2075043814	8.5901682678
7332.92982456	4.2858290451	8.5908226267
7676.368421052	4.2521941541	8.5941942923
7976.052631578	4.2475754424	8.5962877457
9534.754385964	4.2117179325	8.6003945486
11236.754385964	4.2944709531	8.6157294793

Таблица 4. $P = 1.548 \cdot 10^7 + T$; $\kappa = 2.91 \cdot 10^{-3} \tilde{\kappa}$; $\ln(P/\kappa) = 15.4 + 10^{-2} x$

мы получаем следующую интерполяционную формулу для функции $\kappa(P)$ в интервале $8.1638 \cdot 10^6 < < P < 8.1666 \cdot 10^6$:

$$\kappa = 2.92 + 10^{-3} \tilde{\kappa},$$
 (13)

где

$$\tilde{\kappa} = 4.7658300529 + 2.102225195 \cdot 10^{-4} (T - T_0) - -3.347544609 \cdot 10^{-8} (T - T_0)^2, \quad (14)$$
$$P = 816 \cdot 10^4 + T, \quad T_0 = 4278.298245614.$$

Подставляя в формулы (5), (12), (13) значения простых чисел из банка данных, получим значения функции ξ в целочисленных точках (N, P(N)), лежащих в интервале $8.1638 \cdot 10^6 < P < 8.1666 \cdot 10^6$. Эти значения приведены в табл. 5.

Из табл. 1–4 следует очень нетривиальное поведение функции κ даже в области значений P между двумя ближайшими точками, в которых κ обращается в единицу. Имеется очень широкая область, важная для численных расчетов, в которой функция κ имеет плавную огибающую при наличии слабых осцилляций. Данные, приведенные в табл. 2, 3, позволяют получить достаточно хорошую интерполяционную формулу в этой области:

$$\tilde{\kappa} = 2.883826627 - 9.8747968051 \cdot 10^{-3} (\ln(P/\tilde{\kappa}) - 18.892799033) + 1.34071370507 \cdot 10^{-5} \times (\ln(P/\tilde{\kappa}) - 18.892799033)^2, \quad (15)$$

Таблица 5. Значения *ξ* и *κ* (*N* — номер простого числа, *P* — простое число)

N	P	ξ	κ
550000	8163047	-0.289294796	2.92445623145
550001	8163049	-0.347704066	2.9244568166
550002	8163107	-0.155136627	2.92447367049
550003	8163109	-0.2135527505	2.924474224764
550004	8163121	-0.227172944	2.92447770492
550005	8163131	-0.2497587709	2.92448057862
550006	8163139	-0.28130680031	2.92448287276
550007	8163143	-0.33077031933	2.92448401822
550008	8163191	-0.18326496992	2.92449768021
550009	8163193	-0.241690687923	2.92449824612
550010	8163227	-0.15694272000	2.92450782548
550011	8163241	-0.1616987974	2.924511747435
550012	8163251	-0.1843532127	2.92451454079
550013	8163271	-0.1623029385	2.92452010742
550014	8163283	-0.1760342491	2.9245234345
550015	8163313	-0.1093341666	2.924531710179
550016	8163319	-0.1499013199143	2.92453335807
550017	8163329	-0.172600317414	2.9245360992
550018	8163359	-0.1059799123081	2.92454428245
550019	8163401	$1.41546012621\cdot 10^{-2}$	2.92455563775
550020	8163427	$6.280542115015\cdot 10^{-2}$	2.9245626608043
550021	8163457	0.129258533298	2.9245709444
550022	8163473	0.133236916658	2.92457482922
550023	8163479	$9.26148988163 \cdot 10^{-2}$	2.92457641284
550024	8163487	$6.0907749269 \cdot 10^{-2}$	2.92457852059
550025	8163497	$3.8112724199 \cdot 10^{-2}$	2.92458114925
550026	8163503	$-2.517521573681\cdot 10^{-3}$	2.924582723234
550027	8163539	$9.05388780683\cdot 10^{-2}$	2.9245921165
550028	8163541	$3.207341553 \cdot 10^{-2}$	2.9245926358
550029	8163557	$3.597497581 \cdot 10^{-2}$	2.9245967806
550030	8163563	$-4.6758427602 \cdot 10^{-3}$	2.92459833049
550031	8163583	$1.7017722726\cdot 10^{-2}$	2.924603479
550032	8163599	$2.08808701541 \cdot 10^{-2}$	2.924607579
550033	8163607	$-1.08811450877 \cdot 10^{-2}$	2.9246096225
550034	8163613	$-5.1549106935 \cdot 10^{-2}$	2.9246111524
550035	8163629	$-4.7713395122 \cdot 10^{-2}$	2.92461522

Таблица 5. (продолжение)

N	P	ξ	κ
550036	8163637	$-7.948912575 \cdot 10^{-2}$	2.92461724749
550037	8163641	-0.129066461013	2.924618259589
550038	8163647	-0.16974607895	2.92461977572
550039	8163709	$3.8621840882\cdot 10^{-2}$	2.92463530133
550040	8163713	$-1.097194955 \cdot 10^{-2}$	2.9246362941
550041	8163737	$2.83270265313\cdot 10^{-2}$	2.9246422285
550042	8163739	$-3.01610440384\cdot10^{-2}$	2.9246427213
550043	8163769	$3.5756985394 \cdot 10^{-2}$	2.924650081
550044	8163803	0.119385368367	2.924658349
550045	8163817	0.114168334318	2.9246617313
550046	8163821	$6.4549862555\cdot 10^{-2}$	2.9246626952
550047	8163823	$6.05220132773 \cdot 10^{-3}$	2.9246631767
550048	8163829	$-3.46898216005\cdot 10^{-2}$	2.9246646198
550049	8163833	$-8.43110339885\cdot10^{-2}$	2.92466558047
550050	8163839	-0.1250564841428	2.92466701947
550051	8163847	-0.156928229725	2.9246689344
550052	8163871	-0.1178130955035	2.924674653
550053	8163917	$1.88269990635 \cdot 10^{-2}$	2.92468550726
550054	8163923	$-2.19472538302\cdot 10^{-2}$	2.9246869125
550055	8163929	$-6.2723563236 \cdot 10^{-2}$	2.924688315
550056	8163971	$5.60415135045\cdot 10^{-2}$	2.9246980679
550057	8163983	$4.18300552139\cdot 10^{-2}$	2.9247008326
550058	8163989	$1.0331726483 \cdot 10^{-3}$	2.92470221137
550059	8163997	$-3.09071589937\cdot 10^{-2}$	2.9247040459
550060	8164003	$-7.17088403903\cdot 10^{-2}$	2.924705419
550061	8164027	$-3.28077521019\cdot 10^{-2}$	2.92471088701
550062	8164031	$-8.2474210274\cdot 10^{-2}$	2.92471179515
550063	8164033	-0.14099584436	2.92471224858
550064	8164069	$-4.9030238574 \cdot 10^{-2}$	2.92472036443
550065	8164073	$-9.87062938677\cdot 10^{-2}$	2.92472126083
550066	8164099	$-5.10543058019\cdot 10^{-2}$	2.92472706136
550067	8164111	$-6.5353559954\cdot 10^{-2}$	2.92472972326
550068	8164127	$-6.19733337456\cdot10^{-2}$	2.92473325746
550069	8164141	$-6.74496536088\cdot10^{-2}$	2.92473633583
550070	8164147	-0.10830070674	2.9247376511
	l		l

Таблица 5. (продолжение)

N	Р	ξ	κ
550071	8164159	-0.12263288378	2.92474027445
550072	8164183	$-8.3945836937 \cdot 10^{-2}$	2.9247454922
550073	8164201	$-7.1796186709 \cdot 10^{-2}$	2.9247493802
550074	8164213	$-8.616540604 \cdot 10^{-2}$	2.92475196015
550075	8164217	-0.1358743653	2.924752818
550076	8164249	$-6.1946370214 \cdot 10^{-2}$	2.924759642
550077	8164259	$-8.517693224 \cdot 10^{-2}$	2.92476176066
550078	8164291	$-1.1325784660407\cdot 10^{-2}$	2.9247684948
550079	8164297	$-5.222826795 \cdot 10^{-2}$	2.9247697499
550080	8164307	$-7.5486266417 \cdot 10^{-2}$	2.9247718362

где $\tilde{\kappa}$ — огибающая функция κ . Формула (15) имеет исключительно широкую область применимости. В частности, из нее следует, что вторая точка, в которой функция κ обращается в единицу, находится при значениях P около

$$P \sim 3.27 \cdot 10^{112}$$
. (16)

Это делает возможным сформулировать кластерно-обогатительный подход, позволяющий с высокой скоростью находить простые числа.

В настоящее время показано [6], что на множестве чисел вида $M_n = 2^n - 1$ существует подмножество чисел \tilde{n} такое, что $M_{\tilde{n}}$ есть простое число.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Зависимость величины простого числа от его номера определяется в основном аналитической функцией κ , связанной с дзета-функцией Римана уравнением Эйлера. Показано, что функция κ бесконечное число раз проходит через значение, равное единице. Средняя плотность простых чисел очень слабо зависит от величины P и лишь логарифмически мала по сравнению с единицей. Получено бесконечное число связей для функции κ . Определяющую роль играет условная сходимость рядов в левой части уравнений (4). Полученные результаты позволяют сформулировать кластерно-обогатительный подход для вычисления простых чисел, резко ускоряющий этот процесс.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. Н. Овчинников, ЖЭТФ **159**, 569 (2021).

- H. M. Edwards, *Riemann's Zeta Function*, Acad. Press, New York, London (1974).
- 3. П. Л. Чебышёв, Об определении числа простых чисел, меньших данной величины (1848).
- 4. П. Л. Чебышёв, О простых числах (1850).
- 5. A. Selberg, Ann. Math. 50, 305 (1949).
- G. M. Ziegler, Notices Amer. Math. Soc. 51, 414 (2004).

ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ И АНОМАЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ ХОЛЛА В СИЛЬНОКОРРЕЛИРОВАННЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

В. Ю. Ирхин^{*}, Ю. Н. Скрябин^{**}

Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук 620108, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 29 декабря 2020 г., после переработки 29 января 2021 г. Принята к публикации 29 января 2021 г.

Рассмотрены элементарные возбуждения, спин-жидкостное состояние и аномальный эффект Холла, включая квантовый, в слоистых сильнокоррелированных системах. Проанализированы механизмы формирования топологического состояния, связанные с затравочными плоскими энергетическими зонами, корреляциями и спин-орбитальным взаимодействием, в том числе возникновение коррелированных черновских зон. Предлагается двухзонная картина спектра в металлических решетках кагоме, включающая переход из ферромагнитного состояния, плоскую сильнокоррелированную зону и зону легких дираковских электронов. При этом существенным оказывается эффект разделения спиновых и зарядовых степеней свободы. Обсуждается применение представлений вспомогательных бозонов Котляра – Рукенштайна и допонов Рибейро – Вена к этой проблеме.

DOI: 10.31857/S0044451021070154

СОДЕРЖАНИЕ

1.	Введение	139
2.	Черновские состояния	141
3.	Двухзонная модель для решетки каго-	
	ме	143

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время активно исследуются ряд слоистых соединений с конкуренцией ферро- и антиферромагнитных фаз, в том числе системы с фрустрированными решетками (треугольными, сотовыми и кагоме), проявляющие аномальный квантовый эффект Холла (quantum Hall effect, QHE). Например, этот эффект наблюдается [1] в антиферромагнитном топологическом изоляторе MnBi₂Te₄ с ферромагнитными треугольными слоями [2]. Особый интерес представляют системы с ферромагнитным основным состоянием и плоскими зонами, где возникают состояния дираковских электронов, которые могут привести к топологическим изоляторным фа-

4. Обсуждение	146
Литература	146

зам Черна. Такие состояния наблюдались в ряде слоистых соединений переходных металлах с решеткой кагоме Fe_3Sn_2 , Fe_3GeTe_2 , $Co_3Sn_2S_2$, FeSn и др. (см. обсуждение в работах [3–8]). Недавно в структуре муара трехслойного графена было обнаружено ферромагнитное состояние черновского изолятора с большим аномальным эффектом Холла [9]. В двухслойном графене наблюдается также аномальный QHE [10].

В обсуждаемых системах можно ожидать формирование экзотических квантовых топологических состояний. Необычные возбуждения, возникающие в двумерных сильнокоррелированных системах, могут подчиняться нестандартной статистике, в том числе дробной. История их изучения берет начало с дробного QHE [11], означающего топологическое состоянием вещества. При этом низкоэнергети-

^{*} E-mail: valentin.irkhin@imp.uran.ru

^{**} E-mail: skryabin@imp.uran.ru

ческая физика описывается калибровочной теорией Черна–Саймонса.

Топологические холловские фазы также могут возникать в решеточных системах в отсутствие внешнего магнитного поля (аномальный эффект Холла). Для реализации таких фаз на решетке необходим ряд условий. Во-первых, это наличие плоской (почти бездисперсионной) затравочной энергетической зоны с нетривиальной топологией (ненулевым числом Черна, определяющим число краевых возбуждений), что позволяет реализоваться физике, подобной картине уровней Ландау. Вторым важным условием является сильное межэлектронное взаимодействие, нарушающее картину ферми-жидкости. Сильные корреляции особенно важны для дробного эффекта Холла, когда уровни Ландау обладают большим вырождением.

Поскольку холловская проводимость нечетна относительно обращения времени, топологически нетривиальные состояния могут возникать при нарушении соответствующей T-симметрии. Тем самым, одним из возможных механизмов является ее спонтанное нарушение за счет связи с вихревыми потоками [3, 12].

В ряде работ предпринимались попытки учета сильных взаимодействий в сильнофрустрированной системе с целью получения фазы с топологическим порядком в простых приближениях типа среднего поля. Например, аномальный QHE может динамически генерироваться в обобщенной модели Хаббарда на сотовой решетке и в других решеточных системах с квадратичной точкой пересечения зон, включая решетку кагоме. Однако детальные численные исследования не подтверждают формирования экзотических топологических фаз, предсказываемых теориями среднего поля. Здесь основная трудность состоит в том, что вместо того, чтобы вызывать спонтанное нарушение Т-симметрии, сильные взаимодействия также стремятся стабилизировать конкурирующие дальние порядки, нарушающие трансляционную симметрию (см. обсуждение в работе [12]). Таким образом, при описании решеточных систем с QHE будет правильным сразу стартовать с сильнокоррелированного состояния.

Формирование квантового дробного холловского состояния рассматривалось также в моделях типа Хаббарда, включающих киральность [13, 14].

Наличие спин-орбитального взаимодействия допускает другой топологический класс изолирующих зонных структур, где *T*-симметрия исходно не нарушена [15]. Такой двумерный топологический изолятор носит название квантовый спиновый холловский изолятор. Эта система описывается двойной моделью Халдейна [16] с противоположными знаками холловской проводимости для спинов вверх и вниз. В приложенном электрическом поле спины вверх и вниз дают токи Холла, которые текут в противоположных направлениях. Таким образом, полная холловская проводимость равна нулю, но имеются спиновый ток и квантованная спиновая холловская проводимость. При учете комплексных амплитуд перескока между следующими за ближайшими соседями в дираковских точках открывается щель и Т-симметрия нарушается, что приводит к двум зонам с черновскими числами $C = \pm 1$ и к целочисленному QHE в случае половинного заполнения. Для плоских зон при определенных их заполнениях возникает топологическое состояние квантовой несжимаемой жидкости — дробный QHE [17].

Имеется и третья возможность, которая была рассмотрена в работах [18, 19] применительно к двухслойному графену и представляется наиболее интересной. Для спиновой зоны Черна с поляризацией долин класс экзотических фаз изоляторов Черна описывается через разделение спинов и зарядов: заряды находятся в фазе обычного изолятора Черна с квантованной холловской проводимостью, а спины образуют неупорядоченную спин-жидкостную фазу — квантовую холловскую спиновую жидкость, аналогичную обычной Z_2 -спиновой жидкости с дробными степенями свободы. Конденсация квазичастиц-спинонов в такой холловской спиновой жидкости может привести к квантовому холловскому антиферромагнетику.

Двумерные и трехмерные топологические системы проявляют ряд уникальных свойств. В частности, топологические полуметаллы Дирака и Вейля представляют собой новый класс топологических материалов. Релятивистские фермионы — низкоэнергетические возбуждения вокруг дираковских и вейлевских точек - приводят в таких материалах к экзотическим транспортным характеристикам, включая большие магнитосопротивление и внутренний аномальный эффект Холла [20]. В данной работе мы рассмотрим связь электронных состояний и аномального эффекта Холла в сильнокоррелированных топологических системах. Мы постараемся продемонстрировать, что физическая ситуация в таких системах имеет ряд интересных отличий от более привычных топологических систем (см., например, работы [21, 22]).

В разд. 2 рассмотрены черновские состояния для уровня Ландау и для решеточных моделей в системах с корреляциями. В разд. 3 мы обращаемся к металлическим состояниям с особым упором на решетки кагоме и обсуждаем применение к этим системам эффективной двухзонной модели, включающей узкую черновскую зону и широкую зону носителей тока. В разд. 4 более подробно анализируются экспериментальные данные, в том числе по дираковским и вейлевским металлам и полуметаллам.

2. ЧЕРНОВСКИЕ СОСТОЯНИЯ

В ситуации QHE электроны в магнитном поле совершают круговое движение по циклотронным орбитам, в том числе и вокруг других электронов. При этом номер уровня Ландау определяется числом длин волн на данной окружности. Описание сильнокоррелированных систем включает формирование плоских зон, которые аналогичны уровням Ландау. При этом полный поток Берри по зоне Бриллюэна (сумма интегралов от кривизны Берри по всем занятым зонам [15]) является топологическим инвариантом Черна C. Так формируется состояние черновского изолятора, отличительной чертой которого является наличие краевых бесщелевых состояний.

Фундаментальным свойством топологических систем с щелевой зоной является появление таких бесщелевых проводящих состояний на интерфейсах, где изменяется топологический инвариант (в простейшем случае — на границе с пустым пространством). Их можно понять как следствие отскока циклотронных орбит электронов от края. Важно отметить, что электронные состояния, ответственные за это движение, являются киральными: они распространяются только в одном направлении вдоль края. Такие состояния нечувствительны к беспорядку, поскольку нет состояний, доступных для обратного рассеяния (backscattering). Этот факт и лежит в основе идеально квантованного электронного транспорта в QHE [15]. Топологические поверхностные состояния также устойчивы по отношению к андерсоновской локализации.

При наличии взаимодействия система может быть рассмотрена в рамках модели Хаббарда с пириной зоны W и кулоновским отталкиванием U. В случае зоны Черна из-за запрета (obstruction) состояний Ваннье заряд не может быть локализован, так что режим узких зон не описывается чисто спиновой моделью [19]. Поэтому в топологических сильнокоррелированных системах с черновскими зонами отсутствуют локализованные состояния и не возникает упорядочения локализованных моментов — магнетизм может быть только коллективизированным.

Для малых отношений W/U зарядовая щель должна определяться величиной U и разупорядочение спина не обязательно закрывает зарядовую щель. В топологически тривиальной зоне с ненулевой кривизной Берри ферромагнетизм в пределе W = 0 может быть подавлен антиферромагнитным обменом. Подобное разрушение квантового холловского ферромагнетизма кинетическим членом возможно и при целочисленном заполнении зоны Черна. Для промежуточных значений W/U зарядовая подсистема остается изолятором Черна с квантованной холловской проводимостью, однако спины не находятся в ферромагнитном состоянии. Таким образом, возникают фазы квантовых холловских антиферромагнетиков и квантовых холловских спиновых жидкостей, где антиферромагнитный порядок либо квантовая спиновая жидкость сосуществует с квантованной проводимостью Холла [19]. Тем самым, возможен переход из ферромагнитного состояния с QHE в ферми-жидкость через необычные антиферромагнитную и спин-жидкостную фазы.

Эффективный лагранжиан, который описывает QHE для электронов в магнитном поле и включает член Черна–Саймонса, имеет следующий вид [23,24]:

$$\mathcal{L}_{CS} = -\frac{m}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu\lambda} a_{\mu} \partial_{\nu} a_{\lambda} - \frac{e}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu\lambda} A_{\mu} \partial_{\nu} a_{\lambda}, \quad (1)$$

где a_{μ} — внутреннее калибровочное поле, A_{μ} — вектор-потенциал внешнего электромагнитного поля, ϵ — антисимметричный тензор второго ранга. Заполнение равно $\nu = 1/m$, где m — заряд калибровочного поля, т. е. количество длин волн при обходе одного электрона вокруг другого.

Уравнение (1) описывает только линейный отклик основного состояния на внешние электромагнитные поля. Чтобы иметь более полное описание топологической жидкости, такой как дробная квантовая холловская жидкость, в эффективную теорию необходимо ввести возбуждения. Хотя в основном лафлиновском состоянии электрон является фермиевским, возбужденные состояния системы являются бозевскими. Таким образом, m — четное целое число для бозонных состояний и нечетное число для фермионных. Дробная квантовая холловская жидкость содержит два вида квазичастиц: квазидырку (или вихрь) в исходном электронном конденсате и квазидырку (или вихрь) в новом бозонном конденсате. Вводя калибровочное поле \tilde{a}_{μ} , описывающее бозонный ток, полный лагранжиан можно записать в компактном матричном виде, аналогичном (1):

Здесь $(a_{1\mu}, a_{2\mu}) = (a_{\mu}, \tilde{a}_{\mu})$, матрица K имеет вид

$$K = \begin{pmatrix} p_1 & -1 \\ -1 & p_2 \end{pmatrix}, \tag{3}$$

где p_1 — стартовое число m, описывающее фермиевские состояния электрона, p_2 — четное числе, описывающее бозонное поле, \mathbf{q} — зарядовый вектор, $\mathbf{q}^T = (q_1, q_2) = (1, 0)$. Для чисел заполнения имеем $\nu = = \mathbf{q}^T K^{-1} \mathbf{q}$.

Топологическая теория абелевых фаз квантовой холловской жидкости в общем виде описывается лагранжианом [23,25]

$$\mathcal{L}_{bulk} = \frac{1}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho} a^I_{\mu} K_{IJ} \partial_{\nu} a^J_{\rho} - a^I_{\mu} j^{\mu}_I - \frac{1}{2\pi} t_{AI} \epsilon^{\mu\nu\rho} \mathcal{A}^A_{\mu} \partial_{\nu} a^I_{\rho}.$$
 (4)

Здесь a^{I} (I = 1, 2, ..., N) — набор калибровочных полей, K_{IJ} — симметричная целочисленная матрица размерности $N \times N$, определяющая взаимную статистику возбуждений, j_{I} — квазичастичные токи, t_{AI} — зарядовый вектор, определяющий числа заполнения. Вырождение основного состояния на торе (характеристика топологического порядка) определяется детерминантом матрицы K; этот детерминант также определяет количество независимых типов энионов — частиц с дробным зарядом. Последний член в (4) описывает связь с внешними источниками \mathcal{A}^{A} (A = 1, 2, ..., M) с глобальной $U(1)_{A}$ -симметрией.

Несжимаемые дробные квантовые холловские жидкости имеют конечную запрещенную зону для всех своих объемных возбуждений. Однако такие жидкости в системах конечного размера всегда содержат одномерные бесщелевые краевые возбуждения со сложной структурой, которая отражает богатый объемный топологический порядок (соответствие объем–граница). Таким образом, возникает возможность изучать объемные топологические порядки, исследуя структуру краевых возбуждений. Краевые состояния неабелевых дробных квантовых холловских жидкостей образуют еще более экзотические одномерные коррелированные системы [24].

Эффективная теория поля (4) также хорошо подходит для понимания физики краевых состояний. В отсутствие внешних источников \mathcal{A}^A возникает киральная теория Латтинджера [25, 26]:

$$\mathcal{L}_{edge} = \frac{1}{4\pi} \Big[K_{IJ} \partial_t \phi^I \partial_x \phi^J - V_{IJ} \partial_x \phi^I \partial_x \phi^J \Big].$$
(5)

Здесь ϕ^{I} — N киральных бозонов, V_{IJ} — неуниверсальная положительно определенная вещественная матрица, которая зависит от микроскопических свойств края.

Используя язык аксиоматической топологической теории поля, можно обобщить данное рассмотрение на неабелевы фазы [25,27].

В случае сильнокоррелированной электронной зоны для описания различных классов квантовых холловских спиновых жидкостей используется партонная конструкция — представление многоэлектронных операторов Хаббарда $\tilde{c}_{i\sigma} = X_i(0,\sigma)$ через вспомогательные бозоны и фермионы. Она может иметь альтернативные формы: заряженные фермионные голоны и нейтральные бозевские (швингеровские) спиноны (слейв-фермионное представление) либо нейтральные фермионные (абрикосовские) спиноны и бозонные голоны (слейв-бозонное представление). Кроме того, возникает U(1)-калибровочное поле, обусловленное ограничением заполнения на узле. Партонные конструкции могут быть построены в случае произвольных групп симметрии, соответствующих различным типам энионов [28,29]. Они позволяют согласовать физику уровней Ландау и черновских зон, непрерывных дробных квантовых холловских фаз и спиновых жидкостей для решеточных моделей, а также описать фазовые переходы при половинном заполнении как переходы с изменением числа Черна между изоляторными фазами [30].

Среднеполевой гамильтониан для состояния киральной спиновой жидкости эквивалентен задаче переноса электрона в магнитном поле, так что связь между слейв-фермионами и калибровочным полем идентична связи между электронами и электромагнитным полем [24]. Таким образом, можно ожидать, что в системе слейв-фермионов может возникать явление, аналогичное эффекту Холла. При наличии потоков квантование в калибровочном поле приводит к появлению уровней типа уровней Ландау [24, 31]. При этом нулевой уровень имеет вырождение, равное числу квантов потока. Добавление кванта потока порождает нулевую фермионную моду для каждого типа дираковских фермионов. После включения потенциала кристаллической решетки уровни Ландау превращаются в узкие коррелированные полосы. В этом смысле полосы Хаббарда (которые могут быть описаны в простейшем приближении Хаббард-I, в том числе для вырожденных зон [32, 33], как уширенные атомные уровни) являются зонами спинонов. Можно гипотетически предположить, что хаббардовское уширение уровней (например, за счет процессов рассеяния и резонансного уширения [34], а также взаимодействия носителей с локальными моментами) будет играть роль, аналогичную роли беспорядка, которая существенна для QHE.

Слейв-фермионное представление

$$\tilde{c}_{i\sigma} = b_{i\sigma} f_i \tag{6}$$

позволяет описать Z_2 -спиновую жидкость (синглетное спаривание швингеровских бозонов) со спиновой щелью и топологическим порядком, а в режиме бозонного конденсата — также антиферромагнитную фазу (ср. [35]). При этом сохраняется зарядовый отклик черновского изолятора, что и означает состояние квантовой холловской спиновой жидкости. Конструкция этого состояния обобщается на случай дробного заполнения и дробного QHE, так что квантовая холловская Z_2 -спиновая жидкость дает реализацию восьми различных абелевых топологических порядков с четырьмя энионами. С точки зрения топологического порядка, они эквивалентны восьми абелевым топологическим сверхпроводникам 16-ричного пути [27].

Представление фермионных спинонов

$$\tilde{c}_{i\sigma} = b_i f_{i\sigma} \tag{7}$$

описывает U(1)-спиновую жидкость со спинонной поверхностью Ферми, которая является родительским (parent) состоянием для Z_2 -спиновой жидкости, возникающей при понижении калибровочной симметрии. Для четных значений инварианта Черна C может быть построено так называемое состояние композитной ферми-жидкости, которое аналогично спиновой жидкости с чисто спинонной поверхностью Ферми, но является парамагнитным и металлическим [19]. Оно позволяет частично сохранить электронные степени свободы (ненулевой вычет) и описать фермиевскую зону. Важно подчеркнуть, что формирование этого состояния обусловлено разделением спиновых и зарядовых степеней свободы в сильнокоррелированной системе.

Простейший вариант черновской зоны с четным инвариантом Черна *C* дает фаза бозонного целочисленного QHE (bIQHE) [19]. Эффективное действие для этой фазы равно

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{bIQHE}[b, A+a] + \mathcal{L}_{FS}[f, -a].$$
(8)

Здесь A — внешнее U(1)-калибровочное поле; символически, через дифференциальную форму, имеем

$$\mathcal{L}_{bIQHE} = \frac{C}{4\pi} (A+a)d(A+a), \tag{9}$$

$$\mathcal{L}_{FS} = f_{\sigma}^{\dagger}(\partial_{\tau} - \mu + ia_0)f_{\sigma} - \frac{\hbar^2}{2m^*}f_{\sigma}^{\dagger}(-i\partial_i + a_i)^2 f_{\sigma}, \ (10)$$

где μ — химический потенциал, m^* — эффективная масса, a_0 и a_i — временная и координатная составляющие калибровочного поля [23]. Фермионные спиноны f_{σ} частично заполняют зону без числа Черна и образуют поверхность Ферми (FS).

В случае нечетных C = 1, 3, 5, 7, ... формируются экзотические состояния с холловской проводимостью $\sigma_{xy} = C$ — восемь типов спиновых жидкостей с полуцелым киральным центральным зарядом c = C - 1/2, которые аналогичны восьми неабелевым сверхпроводникам Китаева [27].

3. ДВУХЗОННАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ РЕШЕТКИ КАГОМЕ

Теперь мы обратимся к реалистическим проводящим системам с топологическими мотивами. Двумерный слой решетки кагоме дает плоскую зону и пару зон Дирака, которые защищены симметрией, как и в графене. При учете спин-орбитального взаимодействия в двумерных слоистых металлических соединениях с решеткой кагоме открывается небольшая запрещенная зона, а зона с линейной дисперсией искажается, так что дираковские фермионы приобретают небольшую массу. В отличие от линейных зон с легкими квазичастицами, плоские зоны не имеют дисперсии в широком интервале импульсов и ведут себя подобно уровнями Ландау, что может приводить к необычным квантовым состояниям, включая дробные холловские состояния. В сочетании со спин-орбитальной связью и суммарной намагниченностью реализуется фаза двумерного черновского изолятора с QHE при заполнении 1/3 и 2/3. Когда такие слои накладываются друг на друга вдоль третьего измерения, межслоевое взаимодействие превращает систему в трехмерную фазу полуметалла Вейля с нарушенной симметрией относительно обращения времени. В то же время плоская зона несет конечное число Черна и имитирует уровни Ландау без внешнего магнитного поля, что позволяет реализацию дробного QHE при частичном заполнении плоских зон [36].

Поскольку энергетическая щель, обусловленная спин-орбитальным взаимодействием внеплоскостных орбиталей, много меньше, чем у плоскостных орбиталей, возникает орбитально-селективный характер дираковских фермионов [7]. Таким образом, в металлах с решеткой кагоме сосуществуют полоса легких носителей (фермионов Дирака) и тяжелых электронов (плоская зона). При этом необычная физика возникает, если любая из этих зон подходит близко к уровню Ферми. Детальный расчет спектра в работе [7] был проведен на примере соединения CoSn (со слоями Co₃Sn) с металлической проводимостью.

Здесь возникает определенная аналогия с ситуацией нодально-антинодальной дихотомии в сверхпроводящих купратах, где спектр является бесщелевым (сохраняются электронные степени свободы, и возбуждения описываются как дираковские фермионы) вблизи нодальных точек ($\pm \pi/2, \pm \pi/2$) зоны Бриллюэна и щелевым вблизи антинодальной точки (0, π) [37, 38]. Однако, в отличие от купратов, существенную роль играет спин-орбитальное взаимодействие.

В зависимости от параметров межэлектронного и спин-орбитального взаимодействий, а также переноса между вторыми соседями возникают разные картины расположения широких и плоских зон [39], причем при уменьшении U зоны становятся перемешанными. Таким образом, можно говорить о переходе метал–изолятор типа моттовского, при котором можно ожидать смену статистики и разделение спина и заряда.

Важной особенностью решеток кагоме является металлическое ферромагнитное состояние, которое может переходить в спиновую жидкость по механизму типа Китаева [40]. Согласно расчету ab initio [41], в системе $Co_3In_xSn_{2-x}S_2$ при допировании сохраняется полуметаллический ферромагнетизм с линейно убывающим моментом. В этой системе также имеются ферми-дуги и нодальные кольца, которые играют важную роль для аномального эффекта Холла [41,42]. Экспериментальные данные на монокристаллах по кагоме-системам $Co_3In_xSn_{2-x}S_2$ и Co_{3-и}Fe_иSn₂S₂ [43] показывают, что в них имеются почти двумерный коллективизированный магнетизм и киральное спиновое состояние в окрестности квантового перехода из ферромагнитной в немагнитную фазу, а также формируется сильнокоррелированное состояние с высокой электронной теплоемкостью.

Зоны с орбитально-селективными мотивами были также найдены в парамагнитной решетке кагоме YCr_6Ge_6 [44] и в слоистом соединении FeSn с моментами Fe, ферромагнитно выстроенными внутри плоскостей решетки кагоме, но антиферромагнитно связанными вдоль оси *с* [36].

Микроскопическое описание может быть получено в представлении вспомогательных частиц. Наиболее удобной и общей оказывается вращательно-инвариантная версия [45]:

$$\tilde{c}_{i\sigma}^{\dagger} = \sum_{\sigma'} f_{i\sigma'}^{\dagger} z_{i\sigma'\sigma}^{\dagger}, \ \hat{z}_i = e_i^{\dagger} \hat{L}_i M_i \hat{R}_i \hat{p}_i, \qquad (11)$$

где скалярные и векторные бозоны, p_{i0} и \mathbf{p}_i , описывающие спиновые возбуждения, вводятся как $\hat{p}_i = (p_{i0}\sigma_0 + \mathbf{p}_i \cdot \boldsymbol{\sigma})/2$,

$$\hat{L}_i = [(1 - d_i^{\dagger} d_i)\sigma_0 - 2\hat{p}_i^{\dagger} \hat{p}_i]^{-1/2}, \qquad (12)$$

$$\hat{R}_{i} = [(1 - e_{i}^{\dagger} e_{i})\sigma_{0} - 2\hat{\vec{p}}_{i}^{\dagger}\hat{\vec{p}}_{i}]^{-1/2}, \qquad (13)$$

$$M_{i} = (1 + e_{i}^{\dagger}e_{i} + \sum_{\mu=0}^{3} p_{i\mu}^{\dagger}p_{i\mu} + d_{i}^{\dagger}d_{i})^{1/2} \qquad (14)$$

и \tilde{p}_i — обращенный по времени оператор \hat{p}_i . В случае магнитоупорядоченных фаз и малой концентрации носителей тока (дырок) множители \hat{L}_i , \hat{R}_i сокращают голонные операторы e_i и можно приближенно записать [46]

$$\tilde{c}_{i\sigma} = \sqrt{2} \sum_{\sigma'} \hat{p}_{i\sigma'\sigma} f_{i\sigma'} = = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\sigma'} f_{i\sigma'} (\delta_{\sigma\sigma'} p_{i0} + \mathbf{p}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\sigma'\sigma}). \quad (15)$$

Это представление позволяет построить интерполяцию между стандартным слейв-бозонным представлением, где носителями тока являются бозевские голоны, и спин-волновым представлением в магнитоупорядоченной фазе. Таким образом, возникают различные сценарии переходов из холловской магнитной фазы в фазы спиновой жидкости и затем ферми-жидкости при изменении параметров взаимодействия или допировании (ср. [19]). Итак, приписывая данным связанным состояниям (зарядовым степеням свободы) число Черна С, можно использовать результаты работы [19], чтобы описать влияние числа Черна на топологический порядок вблизи определенных точек зоны Бриллюэна. При этом естественно предположить, что носители тока наследуют числа С для оригинальной черновской зоны (например, в приближении среднего поля для вспомогательных бозонов).

С представлением (15) может быть формально связано допонное представление, где для оператора Хаббарда имеем [47–49]

$$X_{i}(0,-\sigma) = -\frac{\sigma}{2\sqrt{2}} \sum_{\sigma'} d^{\dagger}_{i\sigma'} (1-n_{i,-\sigma'}) (\delta_{\sigma\sigma'} - 2\mathbf{S}_{i} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\sigma'\sigma}).$$
(16)

Здесь $\sigma = \pm$, $n_{i\sigma} = d^{\dagger}_{i\sigma} d_{i\sigma}$, фермиевские операторы допонов $d^{\dagger}_{i\sigma'}$ описывают носители тока, а операторы спинов \mathbf{S}_i — локализованные степени свободы; они
могут быть представлены в терминах фермиевских или бозевских (швингеровских) спинонов [35, 48]. В представлении псевдофермионов имеем

$$\mathbf{S}_{i} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} f_{i\sigma}^{\dagger} \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} f_{i\sigma'}.$$
 (17)

Учет гибридизации между допонами и фермиевскими спинонами $f_{i\sigma}$ дает описание в рамках эффективной двухзонной модели [48]. Подставляя (16) в t–J-гамильтониан, получаем гамильтониан с киральными тенденциями (содержащий векторные произведения) [48, 49]:

$$H = \frac{1}{(2S+1)^2} \times \sum_{ij\sigma\sigma'} t_{ij} \{ (S^2 + \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) \delta_{\sigma\sigma'} - S(\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_j) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} + i\boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} \cdot [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j] \} c_{i\sigma}^{\dagger} (1 - n_{i,-\sigma}) \times (1 - n_{j,-\sigma'}) c_{j\sigma'} + H_d, \quad (18)$$

где H_d — гамильтониан Гейзенберга, S = 1/2. Такое представление гамильтониана в узкозонной *s*-*d*-модели с произвольным спином *S* было получено в работе [47]. Для некомпланарных магнитных структур член с векторным произведением может приводить к аномальному эффекту Холла даже без спинорбитального взаимодействия благодаря возникновению спиновой киральности и кривизны Берри.

Гейзенберговская часть гамильтониана может быть рассмотрена в слейв-бозонном представлении. Для этого выражение (16) может быть переписано через операторы

$$b_{1i} = f_{i\uparrow}d_{i\downarrow} - f_{i\downarrow}d_{i\uparrow}, \quad b_{2i} = f_{i\uparrow}^{\dagger}d_{i\uparrow} + f_{i\downarrow}^{\dagger}d_{i\downarrow}, \quad (19)$$

которые приближенно можно считать бозевскими [48], что возвращает нас к представлению бозонных голонов, в том числе в SU(2)-версии [37,50].

Теория среднего поля [48] включает фермионные спиноны и коррелированные электроны — допоны, причем бозонные голоны являются связанными состояниями спинонов и электронов. Следует отметить, что в подходе работ [47, 49] вместо новых операторов допонов возникают операторы электронов, что несколько меняет физическую интерпретацию (в частности, это может быть важно для описания QHE).

Таким образом, исходная модель принимает форму эффективной двухзонной модели, аналогично проблеме решеток Кондо: плоская зона описывается в представлении абрикосовских фермионов, а зона проводимости — через допоны. Здесь происходит орбитально-селективный (частичный) переход Мотта в одной полосе, который представляет собой квантованное изменение поверхности Ферми, т. е. переход от большой к малой поверхности Ферми, т. е. переход от большой к малой поверхности Ферми [51], связанный с образованием хаббардовских подзон [31, 38, 52]. Этот переход может быть описан в рамках подхода фракционализованной ферми-жидкости, описывающей малую поверхность Ферми в состоянии Z₂-спиновой жидкости [53].

В приближении среднего поля лагранжиан для фазы спиновой жидкости может быть записан в виде (ср. [48])

$$\mathcal{L} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[(\partial_0 + \alpha_{\mathbf{k}}) f^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} f_{\mathbf{k}\sigma} + \beta_{\mathbf{k}} (f^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} d_{\mathbf{k}\sigma} + \text{H.c.}) + (\partial_0 + \gamma_{\mathbf{k}}) d^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} d_{\mathbf{k}\sigma} + \text{const} \right], \qquad (20)$$

причем $\gamma_{\mathbf{k}}$ определяется затравочным спектром (вообще говоря, перенормированным [48]), величина $\alpha_{\mathbf{k}}$ кроме этого пропорциональна концентрации носителей тока (допонов), $\beta_{\mathbf{k}}$ содержит бозонные перенормировки $\langle f_{i\sigma}^{\dagger} d_{j\sigma} \rangle$. Таким образом, после диагонализации спектра мы получаем узкую зону *f*-типа и широкую зону, происходящую от допонов. Далее, может быть проведен учет флуктуаций через введение временной и координатной компонент калибровочного поля, так что $\partial_0 \rightarrow \partial_0 + ia_0$ и соответственно для координатной части (ср. [28]).

Аналогичный подход для муаровой решетки графена при учете долин позволяет описать формирование состояния спиновой жидкости с дробным зарядом энионов [28]. В целом, в нашей задаче имеются два источника топологического порядка. Первый — это квантовый эффект Холла, он может быть описан в рамках партонного представления для электронного оператора [29]. Второй — формирование спиновой жидкости, где существенно разделение заряда и спина в режиме сильных корреляций. Оба эти фактора в принципе описываются в рамках партонной среднеполевой теории [30]. Следует ожидать, что в эффективном лагранжиане сильнокоррелированной системы будут присутствовать члены, описывающие интерференцию этих эффектов, что позволит приписать систему к определенному топологическому типу. Он может быть определен согласно классификации абелевых и неабелевых топологических сверхпроводников по Китаеву [27].

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Для соединений 3*d*-металов с решеткой кагоме характерны как топологические электронные зоны, так и многообразие магнитных структур. Сочетание этих двух факторов может приводить к большой величине аномальной холловской проводимости посредством различных механизмов. В частности, в магнитных вейлевских полуметаллах с нарушенной *T*-симметрией относительно обращения времени возникает сильный внутренний аномальный эффект Холла из-за большой кривизны Берри.

В решетке кагоме Т-симметрия может быть нарушена благодаря магнитным потокам, обусловленным ферромагнитным упорядочением, и внутреннему спин-орбитальному взаимодействию, что приводит к возникновению нескольких нетривиальных разделенных по энергии зон Черна и внутреннему аномальному QHE. Этот механизм был рассмотрен в работе [54] в применении к соединению Cs₂LiMn₃F₁₂. Использованная модель сильной связи аналогична модели Халдейна и включает две верхние зоны с дисперсией и нижнюю плоскую зону, которые разделены по энергии и несут числа Черна -1,0,+1. Первые две зоны линейно касаются в точках \bar{K} и \bar{K}' , образуя два конуса Дирака, а средняя и нижняя плоские зоны касаются квадратично в точке Г.

Соответствующий блоховский гамильтониан сильной связи с учетом спин-орбитального взаимодействия для решетки кагоме, который позволяет построить состояния с различными черновскими числами, был получен в работе [55]. Это позволяет построить приближение среднего поля в представлении допонов аналогично работе [48].

Магнитные вейлевские полуметаллы и металлы потенциально могут реализовать аномальный QHE в двумерном пределе. Можно ожидать, что структура решетки кагоме в сочетании с межплоскостным ферромагнитным порядком в слоистой магнитной системе $Co_3Sn_2S_2$ позволит наблюдение квантового аномального холловского состояния в двумерном пределе [3,56,57]. Поскольку магнитные вейлевские полуметаллы представляют собой топологические системы, состояние аномального QHE может быть получено в них за счет конфайнмента вейлевского полуметалла вдоль одного из направлений. Эта идея была разработана [56] на примере $Co_3Sn_2S_2$. В двумерном пределе были получены два состояния аномального QHE в зависимости от стехиометрии слоя. Одно из них — полуметалл с числом Черна, равным 6, а другой — изолятор с числом Черна 3.

Отметим, что соединение $Co_3Sn_2S_2$ является представителем полуметаллических ферромагнетиков, для которых характерны сильные корреляционные эффекты и важную роль играют некогерентные (неквазичастичные) состояния [58], которые могут быть связаны с топологией [46]. Возможность возникновения аномального QHE обсуждается также для трехмерного полуметаллического ферромагнетика HgCr₂Se₄, в котором согласно зонному расчету [59] электронный спектр включает вейлевские фермионы.

Подход работы [19] позволяет предложить новый класс топологических фаз — квантовых холловских спиновых жидкостей, которые представляют собой комбинацию квантового состояния Холла и спиновой жидкости, а также родительское (parent) состояние для квантовых холловских ферро- и антиферромагнетиков, причем в случае решетки кагоме возможен прямой переход от ферромагнетика к спиновой жидкости. Следует отметить, что небипартитная решетка кагоме является благоприятной для формирования спиновой жидкости, в то время как идентификация типа решетки двуслойного графена по распределениям зарядовой и спиновой плотностей (бипартитной сотовой или небипартитной треугольной) не является однозначной [60].

Таким образом, мы видим, что экзотические явления в узких топологических зонах обусловлены корреляционными эффектами, в том числе разделением спиновых и зарядовых степеней свободы. В то же время спин-орбитальное взаимодействие и ферромагнетизм играют важную роль в формировании плоских зон и для аномального QHE.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема «Поток» № АААА-А18-118020190112-8). Исследование эффектов спин-орбитального взаимодействия в решетках кагоме поддержано Российским научным фондом (программа РНФ 20-62-46047).

ЛИТЕРАТУРА

- Yu. Deng, Y. Yu, M. Zh. Shi, Zh. Guo, Z. Xu, J. Wang, X. H. Chen, and Yu. Zhang, Science 367, 895 (2020).
- B. Li, J.-Q. Yan, D.M. Pajerowski, E. Gordon, A.-M. Nedic, Y. Sizyuk, L. Ke, P. P. Orth, D. Vaknin, and R. J. McQueeney, Phys. Rev. Lett. **124**, 167204 (2020).

- E. Liu, Y. Sun, N. Kumar, L. Muechler, A. Sun, L. Jiao, Sh.-Y. Yang, D. Liu, A. Liang, Q. Xu, J. Kroder, V. Seuss, H. Borrmann, Ch. Shekhar, Zh. Wang, Ch. Xi, W. Wang, W. Schnelle, S. Wirth, Y. Chen, S. T. B. Goennenwein, and C. Felser, Nature Phys. 14, 1125 (2018).
- L. Ye, M. Kang, J. Liu, F. von Cube, C. R. Wicker, T. Suzuki, C. Jozwiak, A. Bostwick, E. Rotenberg, D. C. Bell, L. Fu, R. Comin, and J. G. Checkelsky, Nature 555, 638 (2018).
- Zh. Lin, J.-H. Choi, Q. Zhang, W. Qin, S. Yi, P. Wang, L. Li, Y. Wang, H. Zhang, Zh. Sun, L. Wei, Sh. Zhang, T. Guo, Q. Lu, J.-H. Cho, Ch. Zeng, and Zh. Zhang, Phys. Rev. Lett. **121**, 096401 (2018).
- D. Boldrin, B. Fak, M. Enderle, S. Bieri, J. Ollivier, S. Rols, P. Manuel, and A. S. Wills, Phys. Rev. B 91, 220408(R) (2015).
- 7. Zh. Liu, M. Li, Q. Wang, G. Wang, Ch. Wen, K. Jiang, X. Lu, Sh. Yan, Y. Huang, D. Shen, J.-X. Yin, Z. Wang, Zh. Yin, H. Lei, and Sh. Wang, Nature Comm. 11, 4002 (2020).
- D. Guterding, H. O. Jeschke, and R. Valenti, Sci. Rep. 6, 25988 (2016).
- G. Chen, A. L. Sharpe, E. J. Fox, Y.-H. Zhang, S. Wang, L. Jiang, B. Lyu, H. Li, K. Watanabe, T. Taniguchi, Zh. Shi, T. Senthil, D. Goldhaber-Gordon, Y. Zhang, and F. Wang, Nature 579, 56 (2020).
- M. Serlin, C. L. Tschirhart, H. Polshyn, Y. Zhang, J. Zhu, K. Watanabe, T. Taniguchi, L. Balents, and A. F. Young, Science 367, 900 (2020).
- D. C. Tsui, H. L. Stormer, and A. C. Gossard, Phys. Rev. Lett, 48, 1559, (1982).
- W. Zhu, S. S. Gong, and D. N. Sheng, Phys. Rev. B 94, 035129 (2016).
- A. E. B. Nielsen, G. Sierra, and J. I. Cirac, Nature Comm. 4, 2864 (2013).
- 14. Sh.-Sh. Gong, W. Zhu, and D. N. Sheng, Sci. Rep. 4, 6317 (2014).
- M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. 82, 3045 (2010).
- 16. F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. 61, 2015 (1988).
- T. Neupert, L. Santos, C. Chamon, and C. Mudry, Phys. Rev. Lett. 106, 236804 (2011).
- Y.-H. Zhang and T. Senthil, Phys. Rev. B 99, 205150 (2019).

- 19. Y.-H. Zhang and T. Senthil, Phys. Rev. B 102, 115127 (2020).
- 20. J. Hu, S.-Y. Xu, N. Ni, and Zh. Mao, Ann. Rev. Mater. Res. 49, 207 (2019).
- 21. Y. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. 82, 102001 (2013).
- 22. В. Н. Меньшов, И. А. Швец, Е. В. Чулков, Письма в ЖЭТФ 110, 777 (2019) [V. N. Men'shov, I. A. Shvets, and E. V. Chulkov, JETP Lett. 110, 771 (2019)].
- 23. X.-G. Wen, Adv. Phys. 44, 405 (1995).
- 24. X.-G. Wen, Quantum Field Theory of Many-Body Systems, Oxford Univ. Press, Oxford (2004).
- 25. S. Moroz, A. Prem, V. Gurarie, and L. Radzihovsky, Phys. Rev. B 95, 014508 (2017).
- 26. X.-G. Wen, Int. J. Mod. Phys. B 6, 1711 (1992).
- 27. A. Kitaev, Ann. Phys. (N. Y.) 321, 2 (2006).
- 28. Y.-H. Zhang and D. Mao, Phys. Rev. B 101, 035122 (2020).
- 29. R. Ma and Y.-Ch. He, Phys. Rev. Res. 2, 033348 (2020).
- 30. S. A. Parameswaran, R. Roy, and Sh. L. Sondhi, C. R. Physique 14, 816 (2013).
- V. Yu. Irkhin and Yu. N. Skryabin, Phys. Lett. A 383, 2974 (2019).
- 32. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London A 276, 238 (1963).
- 33. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London A 277, 237 (1963).
- 34. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London A 281, 401 (1964).
- 35. M. Punk and S. Sachdev, Phys. Rev. B 85, 195123 (2012).
- 36. M. Kang, L. Ye, Sh. Fang, J.-Sh. You, A. Levitan, M. Han, J. I. Facio, C. Jozwiak, A. Bostwick, E. Rotenberg, M. K. Chan, R. D. McDonald, D. Graf, K. Kaznatcheev, E. Vescovo, D. C. Bell, E. Kaxiras, J. van den Brink, M. Richter, M. P. Ghimire, J. G. Checkelsky, and R. Comin, Nature Mater. 19, 163 (2020).
- 37. P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, Rev. Mod. Phys. 78, 17 (2006).
- 38. В. Ю. Ирхин, Ю. Н. Скрябин, ФММ 120, 563 (2019) [V. Yu. Irkhin and Yu. N. Skryabin, Physics of Metals and Metallography 120, 513 (2019)].
- 39. E. Tang, J.-W. Mei, and X.-G. Wen, Phys. Rev. Lett. 106, 236802 (2011).

- 40. Y.-Ch. Wang, X.-F. Zhang, F. Pollmann, M. Cheng, and Z. Y. Meng, Phys. Rev. Lett. **121**, 057202 (2018).
- Y. Yanagi, J. Ikeda, K. Fujiwara, K. Nomura, A. Tsukazaki, and M.-T. Suzuki, arXiv:2011.14567.
- 42. H. Zhou, G. Chang, G. Wang, X. Gui, X. Xu, J.-X. Yin, Z. Guguchia, S. S. Zhang, T.-R. Chang, H. Lin, W. Xie, M. Z. Hasan, and Sh. Jia, Phys. Rev. B 101, 125121 (2020).
- 43. M. A. Kassem, Novel Magnetic and Electronic Properties of Kagome-Lattice Cobalt-Shandites, PhD dissertation, Kyoto University (2016).
- 44. T. Y. Yang, Q. Wan, Y. H. Wang, M. Song, J. Tang, Z. W. Wang, H. Z. Lv, N. C. Plumb, M. Radovic, G. W. Wang, G. Y. Wang, Z. Sun, R. Yu, M. Shi, Y. M. Xiong, and N. Xu, arXiv:1906.07140.
- 45. R. Fresard and P. Wölfle, Int. J. Mod. Phys. B 6, 685 (1992).
- 46. V. Yu. Irkhin, Phys. Lett. A 383, 1506 (2019).
- 47. V. Yu. Irkhin and Yu. P. Irkhin, Phys. Stat. Sol. (b) 183, 9 (1994).
- 48. T. C. Ribeiro and X.-G. Wen, Phys. Rev. B 74, 155113 (2006).
- В. Ю. Ирхин, Ю. Н. Скрябин, Письма ЖЭТФ 106, 161 (2017) [V. Yu. Irkhin and Yu. N. Skryabin, JETP Lett. 106, 167 (2017)].

- 50. X.-Y. Song, A. Vishwanath, and Y.-H. Zhang, arXiv: 2011.10044.
- 51. M. Vojta, Rep. Progr. Phys. 81, 064501 (2018).
- 52. В. Ю. Ирхин, Ю. Н. Скрябин, ФММ 121, 115 (2020) [V. Yu. Irkhin and Yu. N. Skryabin, Physics of Metals and Metallography 121, 103 (2020)].
- 53. T. Senthil, M. Vojta, and S. Sachdev, Phys. Rev. B 69, 035111 (2004).
- 54. G. Xu, B. Lian, and S.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. 115, 186802 (2015).
- 55. E. J. Bergholtz and Zh. Liu, Int. J. Mod. Phys. B 27, 1330017 (2013).
- 56. L. Muechler, E. Liu, J. Gayles, Q. Xu, C. Felser, and Y. Sun, Phys. Rev. B 101, 115106 (2020).
- 57. M. Tanaka, Y. Fujishiro, M. Mogi, Y. Kaneko, T. Yokosawa, N. Kanazawa, S. Minami, T. Koretsune, R. Arita, S. Tarucha, M. Yamamoto, and Y. Tokura, Nano Lett. 20, 7476 (2020).
- 58. M. I. Katsnelson, V. Yu. Irkhin, L. Chioncel, A. I. Lichtenstein, and R. A. de Groot, Rev. Mod. Phys. 80, 315 (2008).
- 59. G. Xu, H. Weng, Zh. Wang, X. Dai, and Zh. Fang, Phys. Rev. Lett. 107, 186806 (2011).
- 60. V. Yu. Irkhin and Yu. N. Skryabin, Письма в ЖЭТФ
 111, 242 (2020) [JETP Lett. 111, 230 (2020)].

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:

a) 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 IATEX 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 $P_{\text{орt}}$, а не $P_{\text{опт}}$. Все сколько-нибудь громоздкие формулы должны выноситься на отдельные строки. Векторные величины должны быть выделены прямым полужирным шрифтом.

Все страницы рукописи должны быть пронумерованы. Таблицы, аннотация, литература, подписи к рисункам должны быть напечатаны на отдельных страницах.

6. Подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье. Цитируемая литература должна даваться не в виде подстрочных примечаний, а общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой в прямых скобках (например, [1]). Литература дается в порядке упоминания в статье. Указываются инициалы и фамилии авторов (всех авторов, если число авторов меньше четырех, и троих и др., если число авторов больше четырех). Порядок оформления литературы виден из следующих примеров:

- В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифпиц, Л. П. Питаевский, Квантовая электродинамика, Наука, Москва (1984), с. 1.
- А. М. Сергеев, Р. И. Чернова, А. Я. Сергиенко, ФТТ **30**, 835 (1988).
- R. Brewer, J. M. Faber, C. N. Malleson et al., Phys. Rev. A 18, 1632 (1978).
- 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.
- К. Д. Громов, М. Э. Ландсберг, в сб. Тез. докл. X Всесоюзн. конф. по физике низких темпеpamyp (Ташкент, 1986), Наука, Москва (1987), с. 434.
- 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).
- Н. В. Васильев, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, МГУ, Москва (1985).
- A. Fang and C. Howald, E-print archives, condmat/0404452.

7. Все рисунки и чертежи должны быть выполнены четко, в формате, обеспечивающем ясность понимания всех деталей; это особенно относится к фотокопиям. Надписи на рисунках следует по возможности заменять цифрами и буквенными обозначениями, разъясняемыми в подписи к рисунку или в тексте. В рукописи рисунки должны быть представлены на отдельных страницах в конце статьи.

8. Редакция посылает автору одну корректуру по электронной почте в виде *.ps-файла. Постраничный список исправлений должен быть отправлен автором на электронный адрес журнала в течение недели.

9. К рукописи необходимо приложить электронный адрес (e-mail), почтовый адрес места работы с индексом, фамилию, полное имя и отчество автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номер телефона, служебного или домашнего. Главный редактор А. Ф. АНДРЕЕВ

Редколлегия:

д-р физ.-мат. наук И. Г. ЗУБАРЕВ,

д-р физ.-мат. наук Е. И. КАЦ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции),
д-р физ.-мат. наук В. П. КРАЙНОВ, акад. М. В. САДОВСКИЙ, канд. физ.-мат. наук С. С. СОСИН,
канд. физ.-мат. наук Ю. С. БАРАШ, член-корр. РАН С. В. ТРОИЦКИЙ (зам. гл. редактора),
член-корр. РАН И. А. ФОМИН (зам. гл. редактора),
д-р физ.-мат. наук Д. Е. ХМЕЛЬНИЦКИЙ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ
в Великобритании), акад. А. М. ЧЕРЕПАЩУК

Редакционный совет:

д-р физ.-мат. наук В. Т. ДОЛГОПОЛОВ, член-корр. РАН В. В. ЛЕБЕДЕВ, д-р физ.-мат. наук В. С. ПОПОВ

Зав. редакцией Н. Г. Церевитинова Редакторы: Л. Б. Кульчицкая, Т. Г. Орехова, Т. Н. Смирнова