

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
**ЖУРНАЛ**  
**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ**  
**И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ**

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА

ТОМ 160, ВЫПУСК 4 (10)

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД

ОКТАБРЬ 2021

МОСКВА

РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

**СОДЕРЖАНИЕ**

**АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА**

Компоненты нового типа в сечении рассеяния рентгеновского излучения веществом .....	Орешко А. П.	459
Деполяризующие столкновения атомов иттербия с атомами инертных газов .....	Рубцова Н. Н., Кочубей С. А., Хворостов Е. Б., Решетов В. А.	466
Экспериментальное и теоретическое исследование распространения пучков протонов под действием лазерного излучения с учетом пересоединения магнитных силовых линий .....	Беляев В. С., Загреев Б. В., Кедров А. Ю., Кольчугин А. Г., Крайнов В. П., Матафонов А. П.	474
Субдоплеровская спектроскопия атомарных паров Cs в наночастице толщиной 400 нм при комнатной температуре .....	Саргсян А., Момье Р., Папоян А., Саркисян Д.	483
Non-trivial dynamic regimes of small (nano-scale) quantum systems . .	Benderskii V. A., Kats E. I.	491
Процессы второго порядка в излучении ансамбля квантовых осцилляторов .....	Башаров А. М., Трубилко А. И.	498

**ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА**

Динамическая устойчивость гравитонов для случая ЧД АВГ .....	Шариф М., Джавед Ф.	508
--	---------------------	-----

© Российская академия наук, 2021

© Редакция журнала ЖЭТФ (составитель), 2021

### ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

К теории двумерного гомогенного зарождения зародышей на плотноупакованных гранях кристаллов, растущих из паровой фазы .....	Вещунов М. С.	520
Самодиффузия в жидких и твердых сплавах системы Ti–Al: молекулярно-динамическое моделирование .....	Полетаев Г. М.	527
Дисперсия изгибных мод в графене .....	Ипатов А. Н., Паршин Д. А., Конюх Д. А.	534

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

Электронная структура и оптические свойства сплава Гейслера $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ .....	Шредер Е. И., Лукоянов А. В., Махнев А. А., Кузьмин Ю. И., Даш Шубра, Патра Аджит К., Васундхара М.	546
Потенциальное протекание сверхтекучего $^3He$ через нематический аэрогель сферической формы .....	Суровцев Е. В.	553

### ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Транспорт заряда в аморфном нитриде кремния .....	Новиков Ю. Н., Гриценко В. А.	565
Фазовая диаграмма электронно-дырочной жидкости в монослойных гетероструктурах на основе дихалькогенидов переходных металлов .....	Пех П. Л., Ратников П. В., Силин А. П.	572

### СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ

О механизме турбулентных течений со сдвигом. Турбулентный пограничный слой .....	Воротилин В. П.	587
Асимметрия распространения левополяризованных нейтрино в неоднородном магнитном поле .....	Лобанов А. Е., Чухнова А. В.	595

# КОМПОНЕНТЫ НОВОГО ТИПА В СЕЧЕНИИ РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ВЕЩЕСТВОМ

*А. П. Орешко\**

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

Поступила в редакцию 22 декабря 2020 г.,  
после переработки 15 марта 2021 г.  
Принята к публикации 15 апреля 2021 г.

Найдены новые спин-зависимые компоненты сечений нерезонансного и резонансного рассеяния рентгеновского излучения атомами вещества. Для их нахождения использовалось квазирелятивистское разложение гамильтониана Дирака в представлении Фолди–Ваутхайзена. Спин-зависимые компоненты резонансного рассеяния имеют максимальную величину на  $K$ -крае поглощения в магнитных материалах и содержат информацию о спиновой плотности  $p$ -состояний непрерывного спектра атомов вещества.

DOI: 10.31857/S0044451021100011

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время происходит чрезвычайно бурное развитие рентгеновских резонансных методов исследования конденсированных сред [1]. Эти методы основаны на изучении прохождения или рассеяния рентгеновского излучения (РИ) вблизи краев поглощения какого-либо атома исследуемого вещества, когда энергия падающего РИ близка к величине, необходимой для перехода электрона с внутренней электронной оболочки атома в незанятые состояния внешних оболочек или в состояния непрерывного спектра. Практическая реализация резонансных рентгеновских методов неразрывно связана с использованием источников рентгеновского синхротронного излучения [1, 2].

Повышенный интерес к подобным методам обусловлен тем, что именно вблизи краев поглощения (в области XANES — X-ray absorption near edge structure) наиболее ярко проявляется анизотропия резонансного взаимодействия РИ с веществом [3]. В свою очередь, это приводит к возникновению таких явлений, как линейный и круговой дихроизм, двулучепреломление, гиротропия и др. [4]. В настоящее время рентгеновские резонансные методы исследования известны как в геометрии пропускания [2, 5], так и в геометрии рассеяния [6–9].

Количественное описание различных резонансных явлений основывается на сечениях резонансного поглощения и рассеяния РИ атомами вещества, при вычислении которых успешно используется квазирелятивистское разложение гамильтониана Дирака, предложенное в работах [10, 11]. Однако, как было показано в работе [12], в такой записи разложения гамильтониана [10, 11] отсутствует ряд спин-орбитальных членов, а их учет при вычислении сечения поглощения приводит к появлению новой спин-поляризационной компоненты [13]. Эта компонента сечения поглощения существует только в магнитных материалах и может обуславливать до 1/3 величины сигнала XMCD (X-ray magnetic circular dichroism) на  $K$ -крае поглощения  $3d$ -металлов.

В настоящей работе показано, что использование полного квазирелятивистского разложения гамильтониана Дирака для вычисления сечений нерезонансного и резонансного рассеяния РИ атомами вещества, приводит к возникновению новых, ранее не известных спин-зависимых компонент сечения рассеяния.

## 2. ОПЕРАТОР ПЕРЕХОДА

Как известно [14], полный гамильтониан  $H$  связанной системы «излучение + вещество» представляет собой сумму гамильтониана свободного электромагнитного поля,  $H^{rad}$ , гамильтониана материальной системы при отсутствии электромагнитно-

\* E-mail: ap.oreshko@physics.msu.ru

го поля,  $H^{mat}$ , описывающего электронную и ядерную подсистемы, а также взаимодействие между ними, и гамильтониана, описывающего взаимодействие материальной системы с электромагнитным полем,  $H^{int}$ :

$$H = H^{rad} + H^{mat} + H^{int}. \quad (1)$$

В том случае, когда энергия фотонов электромагнитного поля не соответствует энергии возбуждения атомных ядер, что реализуется в рентгеновском диапазоне длин волн  $0.1 \text{ \AA} \leq \lambda \leq 100 \text{ \AA}$ , ядро можно рассматривать как точечный бесструктурный заряд, т. е. пренебречь гамильтонианом ядерной подсистемы и нуклон-нуклонным взаимодействием в ядрах.

Таким образом, система «излучение + вещество» становится системой «излучение + электроны атома вещества», а гамильтониан этой системы представляет собой гамильтониан Дирака с добавкой векторного потенциала РИ  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  [14], для которого будем использовать кулоновскую калибровку.

Сделаем несколько важных замечаний. Во-первых, из выражения для скорости электрона  $u_n$  на  $n$ -ой боровской орбите атома [15],

$$\frac{u_n}{c} = \alpha \frac{Z_{eff}}{n},$$

где  $\alpha$  — постоянная тонкой структуры, а  $Z_{eff}$  — эффективный заряд ядра атома, следует, что только для  $1s$ -электронов актиноидов и более тяжелых атомов скорость электронов будет релятивистской. Во всех остальных случаях  $u_n \ll c$  и можно использовать нерелятивистский предел гамильтониана Дирака. Во-вторых, непосредственно из соотношений неопределенности Гейзенберга следует, что область локализации атомных электронов существенно меньше характерных размеров атома и длины волны РИ. Таким образом, в процессах на атомном уровне электрон хотя бы приближенно можно считать точечной частицей. В-третьих, напряженность электрического поля как рентгеновского, так и рентгеновского синхротронного излучения на несколько порядков меньше величины напряженности электрического внутриатомного поля. Это означает, что поглощение и рассеяние РИ можно описывать методами теории возмущений. Иная ситуация реализуется на рентгеновских лазерах на свободных электронах, где один импульс продолжительностью 10 фс может содержать  $10^{21}$  фотонов [16], а напряженность электрического поля импульса достигать величины  $10^{10}$  В/см, т. е. быть сопоставимой или

превышать величину напряженности электрического внутриатомного поля. В-четвертых, для описания резонансного поглощения и рассеяния РИ достаточно использовать одноэлектронное приближение [1,2], т. е. считать, что РИ взаимодействует только с одним электроном резонансного атома.

В соответствии со сделанными замечаниями, при рассмотрении взаимодействия рентгеновского синхротронного излучения с атомами вещества полный гамильтониан (1) представляет собой квазирелятивистское приближение гамильтониана Дирака и в рамках представления Фолди – Ваутхайзена имеет вид [17–19]

$$\begin{aligned} H = & \left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + (eV + e\Phi) - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} + \right. \\ & \left. + \frac{e\hbar}{2m^2c^2} \mathbf{s} \cdot [\nabla\Phi \times \mathbf{p}] + \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \mathbf{s} \cdot \Delta\Phi \right\} + \\ & + \left\{ -\frac{e}{mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \frac{e^2}{mc^2} \mathbf{A}^2 - \frac{e\hbar}{mc} \mathbf{s} \cdot [\nabla \times \mathbf{A}] + \right. \\ & \left. + \frac{e\hbar}{2m^2c^3} \mathbf{s} \cdot \left( \left[ \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \times \mathbf{p} \right] - \frac{e}{c} \left[ \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \times \mathbf{A} \right] \right) \right\} + \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left( a^\dagger(\mathbf{k}, \lambda) a(\mathbf{k}, \lambda) + \frac{1}{2} \right) = \\ & = H^{mat} + H^{int} + H^{rad}, \quad (2) \end{aligned}$$

где  $e, m, \mathbf{p}$  и  $\mathbf{s}$  — заряд, масса, импульс и оператор спина электрона,  $V$  — потенциальная энергия электрона вещества, взаимодействующего со всеми другими электронами и набором неподвижных ядер в определенных положениях,  $\Phi$  и  $\mathbf{A}$  — скалярный и векторный потенциалы РИ,  $a(\mathbf{k}, \lambda)$  и  $a^\dagger(\mathbf{k}, \lambda)$  — операторы уничтожения и рождения фотонов с волновым вектором  $\mathbf{k}$  и состоянием поляризации  $\lambda$ . Ниже будем опускать знак «точка» в обозначении скалярного произведения.

Под действием возмущения  $H^{int}$ , вызванного падающим РИ, система переходит из начального состояния  $|i\rangle \equiv |a_i; \mathbf{k}_i, \mathbf{e}_{\mathbf{k}_i}\rangle$ , содержащего атом вещества в состоянии  $|a_i\rangle$  и фотон  $|\mathbf{k}_i, \mathbf{e}_{\mathbf{k}_i}\rangle$  (с волновым вектором  $\mathbf{k}_i$  и поляризацией  $\mathbf{e}_{\mathbf{k}_i}$ ), в конечное состояние  $|f\rangle \equiv |a_f; \mathbf{k}_f, \mathbf{e}_{\mathbf{k}_f}\rangle$ , содержащее атом вещества в состоянии  $|a_f\rangle$  и фотон  $|\mathbf{k}_f, \mathbf{e}_{\mathbf{k}_f}\rangle$  (с волновым вектором  $\mathbf{k}_f$  и поляризацией  $\mathbf{e}_{\mathbf{k}_f}$ ).

В рамках нестационарной теории возмущений, вероятность такого перехода за единицу времени задается выражением [20]

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | T_{i \rightarrow f} | i \rangle|^2 \rho_f, \quad (3)$$

где  $\rho_f$  — плотность конечных состояний, а  $T_{i \rightarrow f}$  — оператор перехода.

Плотность конечных состояний, т.е. плотность электронов атомов вещества в конечном состоянии, зависит от условий нормировки волновых функций  $|a_f\rangle$  [21, 22]. Связанные состояния нормированы на единицу, состояния непрерывного спектра — на  $\delta$ -функцию Дирака (от кинетической энергии фотона), а возбужденные состояния при резонансных переходах — на фактор Брейта–Вигнера

$$\rho(\varepsilon_f = \varepsilon_i + \hbar\omega_{\mathbf{k}}) = \frac{\Gamma/2}{(\varepsilon_i - \varepsilon_f + \hbar\omega_{\mathbf{k}})^2 + (\Gamma/2)^2},$$

где  $\Gamma$  — ширина возбужденного состояния [14].

Процессы поглощения, излучения и рассеяния могут быть учтены во втором порядке теории возмущений:

$$T_{i \rightarrow f} = H^{int} + H^{int}G(E_i)H^{int}, \quad (4)$$

где  $G(E_i)$  — резольвента полного гамильтониана системы  $H$  при энергии начального состояния системы  $E_i$ , а  $G_0(E_i)$  — резольвента невозмущенного гамильтониана системы [23].

При этом поглощение описывают те члены оператора перехода, в которых фотон уничтожается, излучение — члены, в которых фотон рождается, а рассеяние — члены, в которых один фотон уничтожается, а один рождается. Таким образом, рассеяние описывается оператором перехода

$$\begin{aligned} T_{i \rightarrow f}^{scatt} &= \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \left\{ \frac{m}{2} \mathbf{A} \mathbf{A} - \frac{\hbar}{2c^2} \mathbf{s} \left[ \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \times \mathbf{A} \right] + \right. \\ &+ \left( \mathbf{A} \mathbf{p} + \hbar \mathbf{s} [\nabla \times \mathbf{A}] - \frac{\hbar}{2mc^2} \mathbf{s} \left[ \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \times \mathbf{p} \right] \right) G_0(E_i) \times \\ &\times \left( \mathbf{A} \mathbf{p} + \hbar \mathbf{s} [\nabla \times \mathbf{A}] - \frac{\hbar}{2mc^2} \mathbf{s} \left[ \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \times \mathbf{p} \right] \right) \Big\} = \\ &= T_{i \rightarrow f}^{scatt,1} + T_{i \rightarrow f}^{scatt,2} + T_{i \rightarrow f}^{scatt,3}. \quad (5) \end{aligned}$$

Отличительной особенностью полученного оператора перехода (5) является наличие спин-орбитального слагаемого

$$-\frac{\hbar}{2mc^2} \mathbf{s} \left[ \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \times \mathbf{p} \right], \quad (6)$$

обусловленного учетом спин-орбитального члена

$$-\frac{e\hbar}{2m^2c^3} \mathbf{s} \left[ \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \times \mathbf{p} \right]$$

гамильтониана (2).

### 3. СЕЧЕНИЕ РАССЕЯНИЯ

Первое  $T_{i \rightarrow f}^{scatt,1}$  и второе  $T_{i \rightarrow f}^{scatt,2}$  слагаемые в выражении (5) описывают, соответственно, хорошо из-

вестные томсоновское и истинное магнитное рассеяние [24]. При этом величина истинной магнитной компоненты рассеяния меньше томсоновской компоненты рассеяния, и в случае упругого нерезонансного рассеяния РИ, т.е. при

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}i} = \hbar\omega_{\mathbf{k}f} \equiv \hbar\omega_{\mathbf{k}} \gg E(a_n) - E(a_i),$$

где  $|a_n\rangle$  — промежуточное состояние атома, имеющее конечное время жизни  $\tau_n = 2\pi\hbar/\Gamma_n$ , получаем

$$\left| \frac{\langle f | T_{i \rightarrow f}^{scatt,2} | i \rangle}{\langle f | T_{i \rightarrow f}^{scatt,1} | i \rangle} \right| = \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} < 0.02.$$

В дальнейшем ограничимся рассмотрением только упругого рассеяния РИ и в нерезонансном случае для третьего слагаемого в выражении (5) получим

$$\begin{aligned} \langle f | T_{i \rightarrow f}^{scatt,3} | i \rangle &= \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \frac{2\pi\hbar c^2}{V} \frac{1}{\omega_{\mathbf{k}}} \frac{1}{\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \times \\ &\times \langle a_i | [C^-(\mathbf{k}_f), C^+(\mathbf{k}_f)] | a_i \rangle, \quad (7) \end{aligned}$$

где введено обозначение

$$\begin{aligned} C^\pm(\mathbf{k}) &= \{(\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^\pm \mathbf{r}) - i\hbar \mathbf{s} [\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{\mathbf{k}}^\pm] + \\ &+ i \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2mc^2} \mathbf{s} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^\pm \times \mathbf{p}]\} e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (8) \end{aligned}$$

$\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^+ \equiv \mathbf{e}_{\mathbf{k}}$  и  $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^- \equiv \mathbf{e}_{\mathbf{k}}^*$ , а знак «звездочка» означает комплексное сопряжение.

Полученное выражение (8) отличается от аналогичных в работах [10, 11, 24, 25] наличием дополнительного слагаемого

$$i \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2mc^2} \mathbf{s} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}}^\pm \times \mathbf{p}],$$

вызванного наличием спин-орбитального члена (6) в операторе перехода (5).

Окончательно, с учетом всех нерезонансных компонент, сечение упругого рассеяния РИ примет вид

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_0^2 |D_1 + D_2 + D_3 + D_4|^2, \quad (9)$$

где

$$D_1 = \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | a_i \rangle (\mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^* \mathbf{e}_{\mathbf{k}i}),$$

$$\begin{aligned} D_2 &= -i \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} \times \\ &\times \left\{ \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{i[\mathbf{q} \times \mathbf{p}]}{\hbar k^2} | a_i \rangle \mathbf{P}_L + \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | a_i \rangle \mathbf{P}_s \right\}, \end{aligned}$$

$$D_3 = -\frac{1}{2} \left( i \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} \right)^2 \times \left\{ \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{i[\mathbf{p} \times \mathbf{s}]}{\hbar k^2} | a_i \rangle \mathbf{P}_1 + \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{i(\mathbf{p}\mathbf{s})}{\hbar k^2} | a_i \rangle P_2 - \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{(\mathbf{e}_{\mathbf{k}i}\mathbf{p})[\mathbf{s} \times \mathbf{k}_i] - (\mathbf{s}\mathbf{e}_{\mathbf{k}i})[\mathbf{p} \times \mathbf{k}_f]}{\hbar k^2} | a_i \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^* - \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{(\mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^*\mathbf{p})[\mathbf{s} \times \mathbf{k}_f] - (\mathbf{s}\mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^*)[\mathbf{p} \times \mathbf{k}_i]}{\hbar k^2} | a_i \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}i} + \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{(\mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^*\mathbf{s}_i)(\mathbf{e}_{\mathbf{k}i}\mathbf{s}_i) - (\mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^*\mathbf{s}_f)(\mathbf{e}_{\mathbf{k}i}\mathbf{s}_f)}{k^2} | a_i \rangle \right\},$$

$$D_4 = -\frac{1}{4} \left( i \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{mc^2} \right)^3 \times \left\{ \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{i[\mathbf{p} \times \mathbf{s}]\{(\mathbf{e}_{\mathbf{k}i}\mathbf{s}_f)\mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^* + (\mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^*\mathbf{s}_i)\mathbf{e}_{\mathbf{k}i}\}}{\hbar k^2} | a_i \rangle - \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{[\mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^* \times \mathbf{p}]\{-\mathbf{e}_{\mathbf{k}i}(\mathbf{p}\mathbf{s}) + \mathbf{p}(\mathbf{s}\mathbf{e}_{\mathbf{k}i})\}}{\hbar k^2} | a_i \rangle \right\}$$

и введены поляризационные факторы

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_f &= [\mathbf{k}_f \times \mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^*], \quad \mathbf{P}_i = [\mathbf{k}_i \times \mathbf{e}_{\mathbf{k}i}], \\ \mathbf{P}'_s &= \mathbf{P}_f (\mathbf{e}_{\mathbf{k}i}\mathbf{k}_f) - \mathbf{P}_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^*\mathbf{k}_i) - [\mathbf{P}_f \times \mathbf{P}_i], \\ \mathbf{P}_L &= [\mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^* \times \mathbf{e}_{\mathbf{k}i}], \quad \mathbf{P}_s = \mathbf{P}_L + \frac{\mathbf{P}'_s}{k^2}, \\ \mathbf{P}_1 &= \mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^* (\mathbf{e}_{\mathbf{k}i}\mathbf{k}_f) + \mathbf{e}_{\mathbf{k}i} (\mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^*\mathbf{k}_i), \\ P_2 &= -(\mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^*\mathbf{P}_i + \mathbf{e}_{\mathbf{k}i}\mathbf{P}_f), \end{aligned}$$

а  $r_0 \equiv e^2/mc^2$  – классический радиус электрона и  $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$  – вектор рассеяния.

Первое  $D_1$  и второе  $D_2$  слагаемые в (9) описывают сечения томсоновского и магнитного нерезонансного рассеяния [11, 24, 25]. Третье  $D_3$  и четвертое  $D_4$  слагаемые в (9) представляют собой ранее не известные спин-зависимые компоненты сечения рассеяния.

Каждое следующее слагаемое в (9) отличается от предыдущего множителем  $i\hbar\omega_{\mathbf{k}}/mc^2$ , содержащим

мнимую единицу  $i$ . Это означает, что для действительных векторов поляризации (линейная поляризация) падающего излучения интерферируют следующие члены (9):  $D_1$  и  $D_3$ ,  $D_2$  и  $D_4$ . В свою очередь, для комплексных векторов поляризации (эллиптическая или круговая поляризация) падающего излучения и/или нецентросимметричных структур интерферируют все члены выражения (9). При этом величина каждого следующего члена много меньше величины предыдущего (в  $(\hbar\omega_{\mathbf{k}}/mc^2)^{-1} \sim 50$  раз), т. е. слагаемыми  $D_3$  и  $D_4$  при вычислении сечения нерезонансного рассеяния РИ атомами вещества можно пренебречь.

В случае резонансного упругого рассеяния РИ, т. е. когда соотношение  $\hbar\omega_{\mathbf{k}} \approx \hbar\omega_{in} \equiv E(a_n) - E(a_i)$  выполняется хотя бы для одного промежуточного состояния  $|a_n\rangle$ , матричный элемент, описывающий рассеяние РИ, имеет вид

$$\begin{aligned} \langle f | T_{i \rightarrow f}^{scatt,3,res} | i \rangle &\approx \frac{r_0}{m} \frac{2\pi\hbar c^2}{V} \frac{1}{\omega_{\mathbf{k}}} \times \\ &\times \sum_{|a_n\rangle} -\frac{E(a_n) - E(a_i)}{\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \times \\ &\times \frac{\langle a_i | C^-(\mathbf{k}_f) | a_n \rangle \langle a_n | C^+(\mathbf{k}_f) | a_i \rangle}{E(a_i) - E(a_n) + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\Gamma_n/2}. \end{aligned} \quad (10)$$

Так как в рентгеновском диапазоне длин волн для большинства внутренних уровней атома выполняется условие  $\mathbf{k}\mathbf{r} \ll 1$  ( $\mathbf{k}$  – волновой вектор РИ,  $r$  – характерный размер квантовой системы) [26], то экспоненциальный множитель  $\exp(\pm i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ , входящий в выражение (8) для  $C^\pm(\mathbf{k})$ , можно разложить в ряд,

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = 1 + i\mathbf{k}\mathbf{r} + \frac{(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})^2}{2} + \dots,$$

и, ограничившись двумя первыми членами разложения, для сечения резонансного рассеяния получим

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{res} = |A_{res}^{e1e1} + A_{res}^{e1e2} + A_{res}^{e2e2} + A_{res}^{e1m1} + A_{res}^{e2m1} + A_{res}^{m1m1} + A_{res}^{e1sp1} + A_{res}^{e2sp1} + A_{res}^{m1sp1} + A_{res}^{sp1sp1}|^2, \quad (11)$$

где для компонент сечения резонансного рассеяния введены обозначения

$$\begin{aligned} A_{res}^{e1e1} &= \frac{m}{\omega_{\mathbf{k}}} \sum_{|a_n\rangle} \frac{-\omega_{in}^3 \mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^* \langle a_i | \mathbf{r} | a_n \rangle \langle a_n | \mathbf{r} | a_i \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}i}}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\Gamma_n/2}, \\ A_{res}^{e1e2} &= \frac{im}{2\omega_{\mathbf{k}}} \sum_{|a_n\rangle} \frac{-\omega_{in}^3 \{ \mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^* \langle a_i | \mathbf{r} | a_n \rangle \langle a_n | (\mathbf{k}_i\mathbf{r}) | a_i \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}i} - \mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^* \langle a_i | (\mathbf{k}_f\mathbf{r}) | a_n \rangle \langle a_n | \mathbf{r} | a_i \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}i} \}}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\Gamma_n/2}, \\ A_{res}^{e2e2} &= \frac{m}{4\omega_{\mathbf{k}}} \sum_{|a_n\rangle} \frac{-\omega_{in}^3 \mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^* \langle a_i | (\mathbf{k}_f\mathbf{r}) | a_n \rangle \langle a_n | (\mathbf{k}_i\mathbf{r}) | a_i \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}i}}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\Gamma_n/2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_{res}^{e1m1} &= \frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}} \sum_{|a_n\rangle} \frac{\omega_{in}^2 \{ \mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^* \langle a_i | \mathbf{r} | a_n \rangle \langle a_n | (\mathbf{L} + 2\mathbf{s}) \mathbf{P}_i | a_i \rangle + \langle a_i | (\mathbf{L} + 2\mathbf{s}) \mathbf{P}_f | a_n \rangle \langle a_n | \mathbf{r} | a_i \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}i} \}}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\Gamma_n/2}, \\
A_{res}^{e2m1} &= \frac{i\hbar}{4\omega_{\mathbf{k}}} \sum_{|a_n\rangle} \frac{-\omega_{in}^2 \{ \mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^* \langle a_i | (\mathbf{k}_f \mathbf{r}) | a_n \rangle \langle a_n | (\mathbf{L} + 2\mathbf{s}) \mathbf{P}_i | a_i \rangle - \langle a_i | (\mathbf{L} + 2\mathbf{s}) \mathbf{P}_f | a_n \rangle \langle a_n | (\mathbf{k}_i \mathbf{r}) | a_i \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}i} \}}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\Gamma_n/2}, \\
A_{res}^{m1m1} &= \frac{\hbar^2}{4m\omega_{\mathbf{k}}} \sum_{|a_n\rangle} \frac{-\omega_{in} \langle a_i | (\mathbf{L} + 2\mathbf{s}) \mathbf{P}_f | a_n \rangle \langle a_n | (\mathbf{L} + 2\mathbf{s}) \mathbf{P}_i | a_i \rangle}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\Gamma_n/2}, \\
A_{res}^{e1sp1} &= \frac{i\hbar}{2c^2} \sum_{|a_n\rangle} \frac{-\omega_{in}^3 \{ \mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^* \langle a_i | \mathbf{r} | a_n \rangle \langle a_n | \mathbf{s} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}i} \times \mathbf{r}] | a_i \rangle + \langle a_i | \mathbf{s} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^* \times \mathbf{r}] | a_n \rangle \langle a_n | \mathbf{r} | a_i \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}i} \}}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\Gamma_n/2}, \\
A_{res}^{e2sp1} &= \frac{\hbar}{4c^2} \sum_{|a_n\rangle} \frac{-\omega_{in}^3 \{ \mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^* \langle a_i | (\mathbf{k}_f \mathbf{r}) | a_n \rangle \langle a_n | \mathbf{s} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}i} \times \mathbf{r}] | a_i \rangle - \langle a_i | \mathbf{s} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^* \times \mathbf{r}] | a_n \rangle \langle a_n | (\mathbf{k}_i \mathbf{r}) | a_i \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}i} \}}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\Gamma_n/2}, \\
A_{res}^{m1sp1} &= \frac{i\hbar^2}{4mc^2} \sum_{|a_n\rangle} \frac{\omega_{in}^2 \{ \langle a_i | (\mathbf{L} + 2\mathbf{s}) \mathbf{P}_f | a_n \rangle \langle a_n | \mathbf{s} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}i} \times \mathbf{r}] | a_i \rangle + \langle a_i | \mathbf{s} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^* \times \mathbf{r}] | a_n \rangle \langle a_n | (\mathbf{L} + 2\mathbf{s}) \mathbf{P}_i | a_i \rangle \}}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\Gamma_n/2}, \\
A_{res}^{sp1sp1} &= \frac{\hbar^2 \omega_{\mathbf{k}}}{4mc^2} \sum_{|a_n\rangle} \frac{\omega_{in}^3 \langle a_i | \mathbf{s} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}f}^* \times \mathbf{r}] | a_n \rangle \langle a_n | \mathbf{s} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}i} \times \mathbf{r}] | a_i \rangle}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\Gamma_n/2},
\end{aligned}$$

а  $\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]/\hbar$  — орбитальный момент импульса.

Компоненты сечения резонансного рассеяния  $A_{res}^{e1e1}$  (электрическая диполь-дипольная),  $A_{res}^{e1e2}$  (электрическая диполь-квадрупольная),  $A_{res}^{e2e2}$  (электрическая квадруполь-квадрупольная),  $A_{res}^{e1m1}$  (электрическая дипольная-магнитная дипольная),  $A_{res}^{e2m1}$  (электрическая квадрупольная-магнитная дипольная) и  $A_{res}^{m1m1}$  (магнитная диполь-дипольная) хорошо известны [11, 24, 25].

В то же самое время  $A_{res}^{e1sp1}$ ,  $A_{res}^{e2sp1}$ ,  $A_{res}^{m1sp1}$  и  $A_{res}^{sp1sp1}$  — ранее не известные спин-зависимые компоненты сечения резонансного рассеяния, порождаемые спин-орбитальным членом (6) оператора перехода (5), возникающим из-за взаимодействия малых волновых функций Дирака электрона [27].

Для понимания физической природы новых спин-зависимых компонент рассмотрим атом, спины электронов которого параллельны оси  $z$  и не зависят друг от друга, т. е. спиновая часть  $|\psi_s\rangle$  атомной волновой функции  $|a\rangle = |\psi\psi_s\rangle$  представляет собой спинор вверх или вниз, и

$$\langle a_n | \mathbf{s} [\mathbf{e} \times \mathbf{r}] | a_i \rangle = \langle \psi_n | [\mathbf{e} \times \mathbf{r}] | \psi_i \rangle \langle \psi_s | \mathbf{s} | \psi_s \rangle.$$

Поскольку  $\mathbf{s} = \{0, 0, s_z\}$ , спин-зависимый дипольный оператор имеет вид

$$\begin{aligned}
\mathbf{s} [\mathbf{e} \times \mathbf{r}] &= is_z \frac{4\pi}{3} r \left\{ Y_1^{-1}(\mathbf{e}) Y_1^{+1} \left( \frac{\mathbf{r}}{r} \right) - \right. \\
&\quad \left. - Y_1^{+1}(\mathbf{e}) Y_1^{-1} \left( \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \right\}, \quad (12)
\end{aligned}$$

где  $Y_l^m(\mathbf{a})$  — сферические функции для вектора  $\mathbf{a}$  [28]. Как видно из выражения (12), такой оператор действует и на спиновую, и на координатную части волновой функции, поэтому назовем его спин-позиционным дипольным оператором [13]. Правила отбора для оператора (12) хорошо известны:  $\Delta l = \pm 1$ ,  $\Delta m = \pm 1$ . Это позволяет предположить, что спин-позиционные компоненты сечения будут присутствовать при резонансном рассеянии РИ в магнитных материалах и при энергии падающего излучения, соответствующей  $K$ -краю поглощения дадут информацию о спиновой плотности  $p$ -состояний непрерывного спектра.

В таблице на примере ОЦК-Fe ( $E_K(\text{Fe}) = 7.11$  кэВ,  $E_{L2}(\text{Fe}) = 0.72$  кэВ) проводится сопоставление относительных величин компонент сечения резонансного рассеяния РИ веществом (см. выражение (11)).

Так как внутренние состояния атома локализованы, компоненты сечения рассеяния вычислялись для внутренних орбиталей, радиус которых определяется соотношением [29, 30]

$$r_c = \frac{3}{2} \frac{a_0}{Z_{eff}},$$

где  $a_0 = \hbar^2/me^2 = 5.2917 \cdot 10^{-9}$  см — радиус первой боровской орбиты.

Как видно из представленных результатов, спин-позиционные компоненты сечения резонансного рассеяния РИ веществом являются величиной такого

Таблица. Относительные величины компонент сечения резонансного рассеяния РИ

Компонента	Порядок величины	Значения для ОЦК-Fe	
		K-край поглощения Fe	L <sub>2</sub> -край поглощения Fe
$A_{res}^{ele2}/A_{res}^{ele1}$	$kr_c/2$	$5.7 \cdot 10^{-2}$	$6.6 \cdot 10^{-3}$
$A_{res}^{e2e2}/A_{res}^{ele1}$	$(kr_c/2)^2$	$3.2 \cdot 10^{-3}$	$4.3 \cdot 10^{-5}$
$A_{res}^{elm1}/A_{res}^{ele1}$	$\hbar k^2/2m\omega_{in}$	$7.0 \cdot 10^{-3}$	$7.0 \cdot 10^{-4}$
$A_{res}^{e2m1}/A_{res}^{ele1}$	$(\hbar k^2/2m\omega_{in})(kr_c/2)$	$4.0 \cdot 10^{-4}$	$4.6 \cdot 10^{-6}$
$A_{res}^{m1m1}/A_{res}^{ele1}$	$(\hbar k^2/2m\omega_{in})^2$	$4.9 \cdot 10^{-5}$	$4.9 \cdot 10^{-7}$
$A_{res}^{el1sp1}/A_{res}^{ele1}$	$\hbar\omega_k/2mc^2$	$7.0 \cdot 10^{-3}$	$7.0 \cdot 10^{-4}$
$A_{res}^{e2sp1}/A_{res}^{ele1}$	$(\hbar\omega_k/2mc^2)(kr_c/2)$	$4.0 \cdot 10^{-4}$	$4.6 \cdot 10^{-6}$
$A_{res}^{m1sp1}/A_{res}^{ele1}$	$(\hbar\omega_k/2mc^2)(\hbar k^2/2m\omega_{in})$	$4.9 \cdot 10^{-5}$	$4.9 \cdot 10^{-7}$
$A_{res}^{sp1sp1}/A_{res}^{ele1}$	$(\hbar\omega_k/2mc^2)^2$	$4.9 \cdot 10^{-5}$	$4.9 \cdot 10^{-7}$

же порядка малости, как и соответствующие магнитные компоненты. Вместе с этим поляризационные зависимости спин-позиционных и магнитных компонент различны, что позволит разделить их вклад в сечение рассеяния.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе получены выражения для сечений нерезонансного и резонансного рассеяния РИ атомами вещества. Эти выражения содержат новые спин-зависимые члены, обусловленные спин-орбитальным взаимодействием.

Так как величины новых спин-зависимых компонент сечения нерезонансного рассеяния РИ много меньше сечений как томсоновского, так и магнитного нерезонансного рассеяния, спин-зависимыми компонентами можно пренебречь.

Новые спин-зависимые компонент сечения резонансного рассеяния РИ атомами вещества являются результатом совместного действия спин-позиционного дипольного (12) и электрического дипольного  $A_{res}^{el1sp1}$ , электрического квадрупольного  $A_{res}^{e2sp1}$ , магнитного дипольного  $A_{res}^{m1sp1}$  и спин-позиционного операторов  $A_{res}^{sp1sp1}$ , на основании чего они получили название спин-позиционных компонент.

Экспериментальное обнаружение спин-позиционных компонент возможно на K-крае поглощения в магнитных материалах, а их величина сопоставима с величинами магнитных дипольных и электрической квадруполь-квадрупольной компонент сечения резонансного рассеяния РИ.

**Финансирование.** Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-52-12029).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Magnetism and Accelerator-Based Light Sources*, ed. by H. Bulou, L. Joly, J.-M. Mariot et al., Springer, Berlin (2021).
2. *X-Ray Absorption and X-Ray Emission Spectroscopy: Theory and Applications*, ed. by J.A. van Bokhoven and C. Lamberti, John Wiley and Sons, United States (2016).
3. C. Brouder, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 701 (1990).
4. V. E. Dmitrienko, K. Ishida, A. Kirfel et al., *Acta Cryst. A* **61**, 481 (2005).
5. *Magnetism and Synchrotron Radiation: New Trends*, ed. by E. Beaurepaire, H. Bulou, F. Scheurer et al., Springer, Berlin (2010).
6. C. Vettier, *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **208**, 3 (2012).
7. L. J. P. Ament, M. van Veenendaal, T. P. Devereaux et al., *Rev. Mod. Phys.* **83**, 705 (2011).
8. J.-L. Hodeau, V. Favre-Nicolin, S. Bos et al., *Chem. Rev.* **101**, 1843 (2001).
9. М. М. Борисов, В. Е. Дмитриенко, К. А. Козловская и др., *Поверхность* **10**, 42 (2019).
10. M. Blume, *J. App. Phys.* **57**, 3615 (1985).
11. M. Blume, in *Resonant Anomalous X-Ray Scattering*, ed. by G. Materlik, C. J. Sparks, and K. Fischer, North-Holland, Amsterdam (1994), p. 495.

12. N. Boulidi and C. Brouder, *Eur. Phys. J.* **90**, 246 (2017).
13. N. Boulidi, N. J. Vollmers, C. G. Delpy-Laplanche et al., *Phys. Rev. B* **96**, 085123 (2017).
14. В. Гайтлер, *Квантовая теория излучения*, Изд-во иностр. лит-ры, Москва (1956).
15. А. М. Попов, О. В. Тихонова, *Лекции по атомной физике*, Москва (2007).
16. T. Ishikawa, H. Aoyagi, T. Asaka et al., *Nature Photon.* **6**, 540 (2012).
17. К. Ициксон, Ж.-Б. Зюбер, *Квантовая теория поля*, т. 1, Мир, Москва (1984).
18. L. L. Foldy, *Phys. Rev.* **87**, 688 (1952).
19. A. J. Silenko, *Phys. Rev. A* **93**, 022108 (2016).
20. Л. Шифф, *Квантовая механика*, Изд-во иностр. лит-ры, Москва (1959).
21. H. Friedrich, *Theoretical Atomic Physics*, Springer, Berlin (2006).
22. A. L. Ankoudinov, *Relativistic Spin-Dependent X-Ray Absorption Theory*, University of Washington (1996).
23. С. Сунакава, *Квантовая теория рассеяния*, Мир, Москва (1979).
24. M. Altarelli, in *Magnetism: a Synchrotron Radiation Approach*, ed. by E. Beaurepaire, H. Bulou, F. Scheurer et al., Springer, Berlin (2006), p. 201.
25. M. Altarelli, in *Magnetism and Synchrotron Radiation: Towards the Fourth Generation Light Sources*, ed. by E. Beaurepaire, H. Bulou, F. Scheurer et al., Springer, Berlin (2013), p. 95.
26. F. de Groot, *Coord. Chem. Rev.* **249**, 31 (2005).
27. В. К. Херсонский, Е. В. Орленко, Д. А. Варшалович, *Квантовая теория углового момента и ее приложения*, т. 2, Физматлит, Москва (2019).
28. Д. А. Варшалович, В. К. Херсонский, Е. В. Орленко, А. Н. Москалев, *Квантовая теория углового момента и ее приложения*, т. 1, Физматлит, Москва (2017).
29. E. Clementi and D. L. Raimondi, *J. Chem. Phys.* **38**, 2686 (1963).
30. E. Clementi, D. L. Raimondi, and W. P. Reinhardt, *J. Chem. Phys.* **47**, 1300 (1967).

# ДЕПОЛЯРИЗУЮЩИЕ СТОЛКНОВЕНИЯ АТОМОВ ИТТЕРБИЯ С АТОМАМИ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

*Н. Н. Рубцова*<sup>a\*</sup>, *С. А. Кочубей*<sup>a</sup>, *Е. Б. Хворостов*<sup>a</sup>, *В. А. Решетов*<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова  
Сибирского отделения Российской академии наук  
630090, Новосибирск, Россия

<sup>b</sup> Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
«Тольяттинский государственный университет»  
445020, Тольятти, Россия

Поступила в редакцию 19 февраля 2021 г.,  
после переработки 3 июля 2021 г.  
Принята к публикации 4 июля 2021 г.

Получены экспериментальные данные для скоростей релаксации населенности, ориентации и выстраивания уровня  $^{174}\text{Yb}(6s6p)^3P_1$  за счет столкновений атомов  $^{174}\text{Yb}$  с атомами благородных газов.

DOI: 10.31857/S0044451021100023

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Явление фотонного эха часто рассматривается как аналог спинового эха. Спиновое эхо известно с 1950 г. [1] и в наши дни стало инструментом исследования различных веществ. Большинство исследований методом спинового эха выполняются для твердотельных или жидких образцов, в микроволновой области спектра — для ядерных спинов, в СВЧ-диапазоне — для электронных спинов. Переход в оптический диапазон спектра означал не просто смену научного оборудования, но и смену теоретических представлений. Для спинового эха, как правило, размер образца меньше длины волны импульсов излучения, резонансного перехода между спиновыми состояниями излучения, формирующих отклик в виде эха. В оптической области длина волны возбуждающего излучения существенно меньше размеров образца, и для формирования когерентного отклика необходим пространственный синхронизм. Термин «световое эхо», предложенный в 1963 г. в работе [2] с предсказанием этого явления в оптике, и ставший более распространенным термин «фотонное эхо», предложенный в публикации 1964 г. [3] с первым экспериментальным наблюдением явления в

твердотельном образце, отражают особенность этого когерентного оптического явления.

Наблюдение фотонного эха в газах считалось невозможным из-за хаотического теплового движения атомов или молекул газа. Ситуация изменилась после публикаций [4, 5] с теоретическим обоснованием явления фотонного эха в газах. Первая экспериментальная работа была выполнена в молекулярном газе  $\text{SF}_6$  под действием излучения  $\text{CO}_2$ -лазера в области длин волн  $\sim 10$  мкм [6].

Стимулированное фотонное эхо (СФЭ) отличается от первичного фотонного эха, формируемого парой импульсов резонансного излучения, наличием третьего возбуждающего импульса. В рамках двухуровневой модели атомов картина формирования СФЭ следующая. Первый из формирующих СФЭ импульсов создает отличную от нуля неравновесную поляризацию среды, которая порождает импульс неравновесного излучения, быстро затухающий из-за неоднородного уширения спектральной линии (расфазировка излучателей). Вторым импульсом излучения, воздействующий на среду через время задержки  $\tau_{12}$ , преобразует неравновесную поляризацию среды в неравновесные населенности уровней перехода. На протяжении времени задержки  $\tau_{23}$  между вторым и третьим импульсами неравновесная разность населенностей уровней может сохраняться; при этом информация о фазах поляризации отдельных атомов хранится в указанных населен-

\* E-mail: rubtsova@isp.nsc.ru

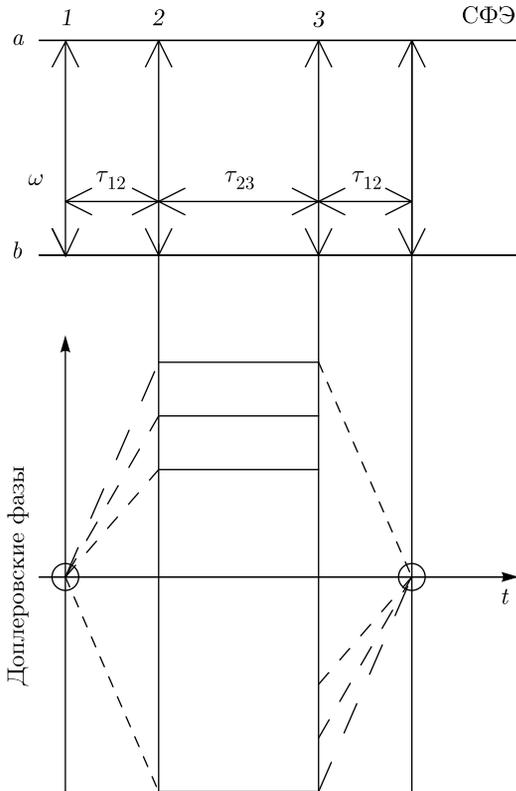


Рис. 1. Последовательность импульсов резонансного излучения, формирующих СФЭ и эволюция доплеровских фаз

ностях уровней и поляризация среды не испытывает дополнительной расфазировки. Третий импульс излучения преобразует эту неравновесную населенность вновь в поляризацию среды и одновременно создает условия для восстановления фазы атомных излучателей. Таким образом, через время задержки  $\tau_{12}$  после окончания третьего импульса возбуждающего излучения формируется сигнал СФЭ. Последовательность импульсов резонансного излучения и эволюция доплеровских фаз представлена на рис. 1.

В рамках этой упрощенной модели релаксация поляризации среды (на протяжении времени задержки  $\tau_{12}$ ) и населенностей уровней (на протяжении времени задержки  $\tau_{23}$ ) учитывается введением двух параметров релаксации — для разности населенностей рабочих уровней (в теоретическом рассмотрении соответствует разности диагональных элементов матрицы плотности) и для поляризации среды (определяется недиагональными элементами матрицы плотности).

В более реалистичном подходе необходим учет вырождения уровней. В этом рассмотрении сигнал СФЭ зависит не только от задержек между возбуждающими импульсами, от их амплитуд и длительно-

стей (т. е. от площади каждого  $i$ -го импульса  $\theta_i$  — интеграла от частоты Раби по времени), но и от поляризации каждого импульса, а также от скоростей релаксации каждого магнитного подуровня. При расчете СФЭ [7] оказалось удобным перейти от населенностей магнитных подуровней к моментам атомных уровней — населенности  $\gamma^{(0)}$ , ориентации  $\gamma^{(1)}$ , выстраиванию  $\gamma^{(2)}$  и более высоким моментам. Было показано, что для всех типов переходов основной вклад в сигнал СФЭ вносят именно эти три низших момента поляризации верхнего и нижнего уровней [7, 8]. Для перехода 0–1 скорости релаксации населенности  $\gamma^{(0)}$ , ориентации  $\gamma^{(1)}$ , выстраивания  $\gamma^{(2)}$  представляют полный набор скоростей релаксации верхнего уровня за счет деполаризующих столкновений.

В настоящее время явление стимулированного фотонного эха представляет собой надежный метод исследования деполаризующих столкновений активных атомов с буферными атомами, разрушающих моменты поляризации уровня. Несмотря на высокий уровень теоретического рассмотрения проблемы, экспериментальная программа исследований до сих пор не была выполнена. Целью данной работы является экспериментальное исследование деполаризующих столкновений по кинетике стимулированного фотонного эха, сформированного тремя импульсами излучения на переходе 0–1.

## 2. ОБОСНОВАНИЕ МЕТОДА

Скорости разрушения населенности  $\gamma^{(0)}$ , ориентации  $\gamma^{(1)}$ , выстраивания  $\gamma^{(2)}$  за счет деполаризующих столкновений можно определить по зависимости от времени задержки  $\tau_{23}$  сигнала СФЭ, сформированного тремя импульсами резонансного излучения со специально выбранными углами  $\psi_1$  и  $\psi_2$  между векторами поляризации соответственно первого и второго импульсов относительно вектора поляризации третьего импульса.

Напряженность электрического поля сигнала фотонного эха определяется из уравнений Максвелла [8]:

$$\mathbf{e}^e(t') \propto \int_{-\infty}^{\infty} dv f(v) e^{-ikv(t'-\tau_{12})} \mathbf{F}, \quad (1)$$

$$\mathbf{F} = C_1 S_1 S_2 S_3 \sum_{\kappa=0}^2 \mathbf{f}^{(\kappa)} e^{-\gamma^{(\kappa)} \tau_{23}}, \quad (2)$$

где

$$k = \frac{\omega}{c}, \quad t' = t - \frac{z}{c} - T_1 - \tau_{12} - T_2 - \tau_{23} - T_3,$$

$f(v)$  — функция распределения по проекциям  $v$  скорости атомов на ось  $Z$ ,

$$S_n = \frac{\theta_n}{\Omega_n} \sin \frac{\Omega_n}{2}, \quad D_n = e^{ikvT_n/2}, \quad (3)$$

$$C_n = \cos \frac{\Omega_n}{2} + i \frac{kvT_n}{\Omega_n} \sin \frac{\Omega_n}{2}, \quad (4)$$

$$\Omega_n = \sqrt{\theta_n^2 + (kvT_n)^2}, \quad (5)$$

$T_n$  и  $\theta_n$  — соответственно длительность и площадь  $n$ -го импульса. Величины  $\mathbf{f}^{(\kappa)}$  сложным образом зависят от площадей и поляризаций возбуждающих импульсов. В частном случае  $\psi_1 = \psi_2 = \psi$  имеем

$$f_x^{(0)} = \frac{4}{3}C_2C_3^*, \quad f_x^{(2)} = \frac{1}{6}C_2C_3^*(1 + 3\cos 2\psi), \quad (6)$$

$$f_y^{(2)} = \frac{1}{2}C_2D_3^* \sin 2\psi, \quad f_x^{(1)} = f_y^{(1)} = f_y^{(0)} = 0, \quad (7)$$

а в случае  $\psi_2 = -\psi_1 = \psi$  —

$$f_x^{(0)} = 0, \quad f_y^{(1)} = \frac{1}{2}D_2D_3^* \sin 2\psi, \quad (8)$$

$$f_y^{(2)} = \frac{1}{2}(C_2 - D_2)D_3^* \sin 2\psi \cos 2\psi. \quad (9)$$

Таким образом, при  $\psi_1 = \psi_2 = \psi$  ( $\psi \neq 0$  и  $\psi \neq \pi/2$ ) затухание компоненты  $e_y^{(e)}$  сигнала эха, ортогональной вектору поляризации третьего возбуждающего импульса, с ростом промежутка времени  $\tau_{23}$  будет определяться только скоростью релаксации выстраивания  $\gamma^{(2)}$ . При этом зависимость амплитуды эха от площадей возбуждающих импульсов при формировании эха на узкой спектральной линии ( $kuT_n \ll 1$ , где  $u = \sqrt{(2kT/m)}$  — средняя тепловая скорость,  $m$  — масса атома иттербия) имеет вид

$$e_y^e \propto \sin \theta_1 \sin \theta_2 \sin \frac{\theta_3}{2}. \quad (10)$$

При  $\psi_2 = -\psi_1 = \pi/4$  затухание компоненты  $e_y^{(e)}$  сигнала эха будет определяться только скоростью релаксации ориентации  $\gamma^{(1)}$ , при этом зависимость амплитуды эха от площадей на узкой спектральной линии имеет вид

$$e_y^e \propto \sin \theta_1 \sin \frac{\theta_2}{2} \sin \frac{\theta_3}{2}. \quad (11)$$

Наконец, при  $\psi_1 = \psi_2 = (1/2) \arccos(-1/3)$  затухание компоненты  $e_x^{(e)}$  сигнала эха, параллельной вектору поляризации третьего возбуждающего импульса, будет определяться только скоростью релаксации населенности  $\gamma^{(0)}$ , при этом зависимость амплитуды эха от площадей на узкой спектральной линии имеет вид

$$e_x^e \propto \sin \theta_1 \sin \theta_2 \sin \theta_3. \quad (12)$$

Такие существенно различные зависимости (10)–(12) обусловлены тем, что формирование сигналов эха на переходе 0–1 происходит в системе трех невырожденных уровней V-конфигурации. В такой системе три возбуждающих импульса могут формировать различные типы эха (стимулированное, трехуровневое, столкновительное) [9] с разными зависимостями от площадей этих импульсов вида (10)–(12), и вклад каждого типа эха в общий сигнал зависит от поляризаций возбуждающих импульсов. При экспериментальном определении каждой из скоростей релаксации (населенности, ориентации или выстраивания) оптимальные площади возбуждающих импульсов, соответствующие максимальным интенсивностям сигналов эха, должны подбираться индивидуально с учетом зависимостей (10)–(12).

### 3. ТЕХНИКА РЕГИСТРАЦИИ КИНЕТИКИ СТИМУЛИРОВАННОГО ФОТОННОГО ЭХА

Три световых импульса, резонансных переходу  $^{174}\text{Yb}$  ( $6s^2$ )  $^1S_0 \leftrightarrow (6s6p)^3P_1$ , формировались в двух лазерах на красителе, с применением оптической накачки третьей гармоникой двухканального  $\text{Nd}^{3+}:\text{YAG}$ -лазера LOTIS (модель LS-2145D-C3/2, Минск, Беларусь). Задержка между двумя каналами лазера накачки могла перестраиваться в широком диапазоне с шагом 10 нс посредством запуска каналов от внешнего генератора. Световой импульс от первого лазера на красителе делился полупрозрачным зеркалом на две части, одна из которых проходила зеркальную пространственную линию задержки. Таким образом, первый лазер на красителе формировал два световых импульса с фиксированной задержкой 33 нс между ними. Оба эти импульса излучения имели высокую степень взаимной когерентности. Третий световой импульс формировался во втором лазере на красителе. Его задержка относительно двух первых импульсов менялась в эксперименте в диапазоне от 50 до 550 нс и обеспечивалась внешним генератором, управляющим запуском импульсов лазера накачки. Задержка про-

верялась по сигналу ФЭУ от остаточной засветки всеми тремя импульсами, и это значение задержки использовалось для построения кинетических кривых. Для уменьшения засветки ФЭУ возбуждающими импульсами использовалась схема углового СФЭ, при которой волновые векторы всех пучков излучения, формирующих сигнал СФЭ, расположены по ребрам трехгранной пирамиды, а углы между ними не превышают  $2 \cdot 10^{-3}$  рад.

Длительности всех импульсов возбуждающего излучения были равны 10 нс. Площадь каждого импульса возбуждающего излучения оценивается как  $10\pi$ . Оценка получена на основании измерения энергии импульса, его длительности и поперечного распределения пучков излучения. Для получения оценки предполагалось равномерное распределение световой энергии по сечению пучка излучения. В действительности это распределение неравномерно и может различаться для каждого из трех импульсов и от вспышки к вспышке. В программе регистрации для АЦП можно наблюдать сигнал СФЭ от каждой вспышки без усреднения — в так называемом режиме осциллографа. При этом видно, что есть вспышки, где сигнал эха велик, а есть такие, где он очень мал. Таким образом, величина площадей  $10\pi$  — среднее эффективное значение площади возбуждающих импульсов, которое оказалось оптимальным для усреднения по большому числу (100–300) измерений. Стабильность этой величины обеспечивалась в процессе усреднения выбраковкой измерений, соответствовавших отклонению амплитуд возбуждающих импульсов более чем на 10 %.

Длина волны обоих лазеров на красителе контролировалась с точностью до 0.0001 нм с помощью специального измерителя, собранного на основе пяти интерферометров Фабри–Перо. При отклонении несущих частот излучения лазеров на красителе более чем на 150 МГц друг от друга соответствующие измерения выбраковывались. Каждая экспериментальная точка на графиках получена в результате усреднения по 300 измерениям или более. Длина волны излучения лазеров поддерживалась равной 555.802 нм, спектральная ширина световых импульсов составляла величину 150 МГц. Для получения такой спектральной ширины линии излучения в резонатор (включающий диэлектрическое зеркало, стеклянную призму и дифракционную решетку 1200 штр./мм, работающую в режиме скользящего падения) каждого из двух задающих лазеров на красителе вносился интерферометр Фабри–Перо. Дополнительные дифракционные решетки 1200 штр./мм были установлены между каж-

дым задающим генератором и первым усилительным каскадом.

Температура в кювете с иттербием контролировалась с помощью платино-родиевой термопары и поддерживалась на уровне  $600^\circ\text{C}$  с точностью до  $1^\circ\text{C}$ . Давление насыщенных паров иттербия при этой температуре составляет приблизительно 30 мТорр. Давление буферных инертных газов (He, Ne, Ar, Kr, Xe) в кювете поддерживалось на уровне 50–400 мТорр, что гарантировало преимущественные столкновения активных атомов иттербия с атомами буферного газа.

Для выбора углов поляризации возбуждающих импульсов излучение каждого возбуждающего пучка с исходной линейной поляризацией пропусклось через четвертьволновую пластинку для преобразования в круговую поляризацию, а затем через призму Глана–Тейлора для выбора необходимого вектора поляризации каждого возбуждающего импульса. Для регистрации необходимой компоненты СФЭ перед детектором сигнала (ФЭУ) располагался анализатор. Степень поляризации излучения после призмы Глана–Тейлора и после анализатора была линейной с точностью не хуже  $10^{-3}$  по мощности излучения.

Для измерения скорости распада ориентации использовались углы  $\pm 45$  град.; измерялась мощность компоненты поляризации эха, ортогональной вектору поляризации третьего импульса. Для измерения скорости распада населенности и выстраивания в эксперименте использовались одинаковые углы  $\psi_1$  и  $\psi_2$ , примерно равные 55 град., и измерялись мощности как параллельной, так и ортогональной компоненты поляризации СФЭ по отношению к направлению вектора поляризации третьего возбуждающего импульса. В этом случае параллельная компонента эха распадается как населенность, ортогональная — как выстраивание. Представленный выше выбор углов  $\psi_1$  и  $\psi_2$  сохранял условия юстировки для измерений скоростей распада населенности и выстраивания, что дало возможность прямого сравнения величины сигналов и двух скоростей затухания. При измерении скорости распада ориентации приходилось подправлять юстировку, так как угловая схема возбуждения очень чувствительна к любым поворотам оптических элементов (для того чтобы изменить угол направления вектора поляризации первого и второго импульсов, поворачивались два проходных оптических элемента — фазовая пластинка и призма Глана–Тейлора). Для каждого газа проводилось несколько независимых измерений, результаты изо дня в день воспроизводились.

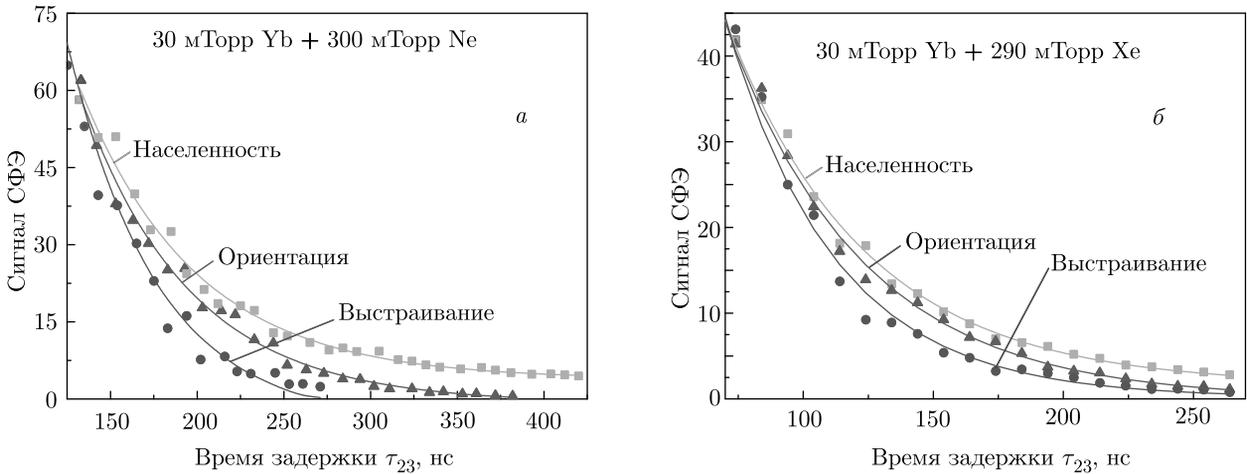


Рис. 2. Сигналы СФЭ, отражающие затухание населенности, ориентации и выстраивания в смесях иттербия с неоном (а) и с ксеноном (б)

#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗМЕРЕНИЙ

Кривые, представляющие зависимость от времени задержки компоненты СФЭ, параллельной или ортогональной вектору поляризации третьего возбуждающего импульса, довольно точно укладывались на затухающую экспоненту для всех использованных углов  $\psi_1$  и  $\psi_2$ , а также для всех партнеров по столкновениям атомов  $^{174}\text{Yb}$  с буферными газами. Пример кинетических кривых показан на рис. 2.

Измеренные скорости столкновительной релаксации  $\gamma^{(i)}$  населенности, ориентации и выстраивания уровня  $^3P_1$  атомов  $^{174}\text{Yb}$  линейно возрастали с увеличением давления буферного газа. Эти зависимости представлены на рис. 3.

Для легких буферных газов He, Ne, Ar скорость столкновительного распада ориентации почти совпадает со скоростью распада населенности; отличие зачастую не превосходит ошибки измерений. Для более тяжелых буферных газов Kr, Xe различие между тремя константами релаксации  $\gamma^{(0)}$ ,  $\gamma^{(1)}$  и  $\gamma^{(2)}$  становится заметнее.

В сериях измерений  $\gamma^{(i)}(p)$  для всех буферных газов давление паров иттербия было одинаковым, примерно 30 мТорр, поэтому все графики  $\gamma^{(i)}(p)$  в нулях давления сходятся к значениям, измеренным в чистых парах иттербия, без примеси буферных газов. Эти измеренные значения показаны на всех графиках рис. 3 и равны  $\gamma^{(0)}(0) = 0.24$ ,  $\gamma^{(1)}(0) = 0.26$  и  $\gamma^{(2)}(0) = 0.34$  в единицах  $10^6 \text{ с}^{-1}$ . Точки пересечения с осью ординат прямых, аппроксимирующих зависимости  $\gamma^{(i)}(p)$  несколько различны для разных буферных газов. Эти результаты аппроксимации в

Таблица 1. Константы измеренных скоростей релаксации (в единицах  $10^7 \text{ с}^{-1} \cdot \text{Торр}^{-1}$ )

Буферный газ	$d\gamma^{(0)}/dp$	$d\gamma^{(1)}/dp$	$d\gamma^{(2)}/dp$
He	$2.72 \pm 0.12$	$2.75 \pm 0.12$	$3.04 \pm 0.18$
Ne	$2.52 \pm 0.13$	$2.71 \pm 0.13$	$3.05 \pm 0.15$
Ar	$2.49 \pm 0.11$	$2.62 \pm 0.11$	$3.17 \pm 0.13$
Kr	$2.54 \pm 0.14$	$2.73 \pm 0.14$	$3.48 \pm 0.18$
Xe	$2.98 \pm 0.13$	$3.30 \pm 0.11$	$3.95 \pm 0.11$

тех же единицах измерения дают следующие величины: для He 0.27, 0.27, 0.30, для Ne 0.25, 0.27, 0.31, для Ar 0.25, 0.26, 0.32, для Kr 0.25, 0.27, 0.35 и для Xe 0.30, 0.33, 0.39. Учитывая точность измерений каждого значения  $\gamma^{(i)}(p)$ , показанного на графиках рис. 3, расхождение между величинами аппроксимации и измерений без буферных газов можно считать удовлетворительным.

По зависимостям скоростей релаксации  $\gamma^{(i)}$  от давления буферного газа определены константы релаксации  $d\gamma^{(i)}/dp$  (здесь  $i = 0, 1, 2$ , а  $p$  — давление буферного газа) для каждого буферного газа. Эти результаты приведены в табл. 1.

По значениям из табл. 1 заметно, что для легких буферных газов He, Ne, Ar значения  $d\gamma^{(0)}/dp$  и  $d\gamma^{(1)}/dp$  почти совпадают, а для более тяжелых буферных газов Kr, Xe различие между тремя константами релаксации  $d\gamma^{(0)}/dp$ ,  $d\gamma^{(1)}/dp$  и  $d\gamma^{(2)}/dp$

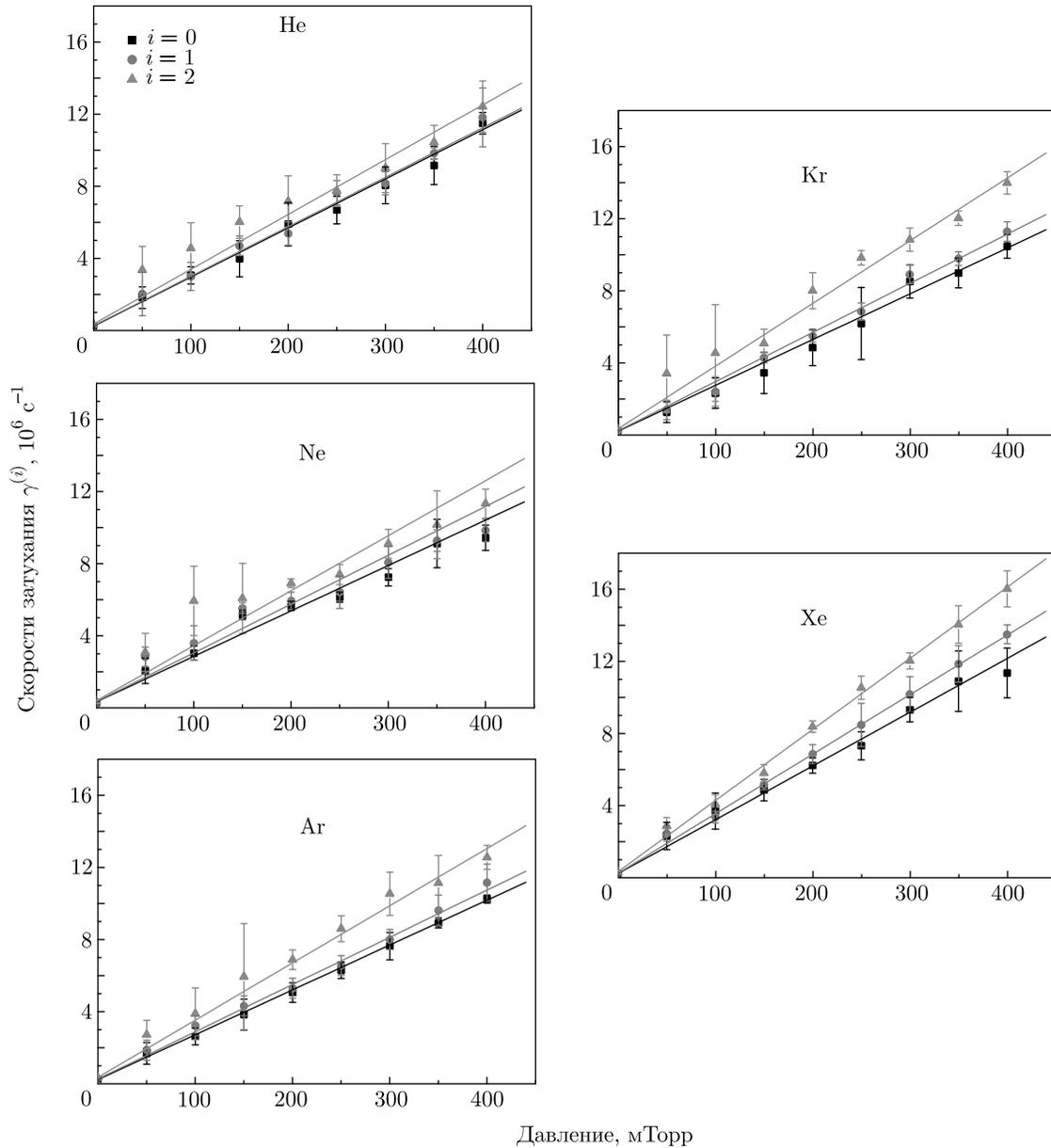


Рис. 3. Скорости релаксации сигналов  $\gamma^{(i)}$ , отражающие затухание населенности, ориентации и выстраивания в смесях иттербия с He, Ne, Ar, Kr, Xe

больше. Также хорошо видна тенденция к росту всех трех констант скоростей распада уровня  $^3P_1$  атомов  $^{174}\text{Yb}$  с увеличением массы буферного газа.

## 5. ОБСУЖДЕНИЕ

Развитие методов поляризационной спектроскопии на основе фотонного эха [7–12] стимулирует экспериментальные исследования деполаризующих столкновений атомов в разреженных газах. В по-

следнее время наблюдается также возрастание интереса к деполаризующим столкновениям атомов в космической среде [13, 14]. В данном случае относительная простота объекта исследования (оптический переход типа 0–1) позволяет проверить экспериментально предсказания теории стимулированного фотонного эха с учетом деполаризующих столкновений. Метод стимулированного фотонного эха со специальными поляризациями возбуждающих импульсов вполне универсален и может применяться к любым спектральным переходам.

Данные, полученные в этой работе, согласуются с результатами, полученными в работе [15] для разности констант релаксации выстраивания и ориентации уровня  $^3P_1$  атомов  $^{174}\text{Yb}$  при столкновениях с атомами Кг. По результатам этой работы имеем

$$\frac{d\gamma^{(2)}}{dp} - \frac{d\gamma^{(1)}}{dp} = (7.5 \pm 0.2) \cdot 10^6 \text{ с}^{-1} \cdot \text{Торр}^{-1},$$

что не противоречит значению  $(6.8 \pm 0.6) \times 10^6 \text{ с}^{-1} \cdot \text{Торр}^{-1}$  из [15].

Скорости  $\gamma^{(i)}$  должны включать все процессы релаксации. Скорость релаксации населенности  $\gamma^{(0)}$  должна определяться радиационным распадом уровня и неупругими столкновениями возбужденных атомов иттербия как с атомами буферных газов, так и друг с другом. Время жизни  $\tau_{rad}$  рабочего уровня  $^3P_1$  атомов  $^{174}\text{Yb}$  относительно радиационного распада приблизительно равно 800 нс, что дает вклад в скорость  $\gamma^{(0)}$   $1/(2\pi\tau_{rad}) \approx 0.2 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$ , что меньше значения  $\gamma^{(0)}(0)$ , измеренного в чистом иттербии. Трудно предполагать, что вклад неупругих столкновений в скорости релаксации  $\gamma^{(0)}$  в чистом иттербии будет заметным, так как уровень  $^3P_1$  атомов  $^{174}\text{Yb}$  достаточно изолирован. Значит, мы должны иметь  $\gamma^{(0)}$  как малую, на уровне  $\approx 0.2 \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$ , и не зависящую от давления буферных газов величину. Для скоростей релаксации ориентации и выстраивания должны выполняться соотношения

$$\gamma^{(1)} = \gamma^{(0)} + \Gamma^{(1)}, \quad \gamma^{(2)} = \gamma^{(0)} + \Gamma^{(2)}$$

соответственно, т. е. к скорости релаксации населенности  $\gamma^{(0)}$  прибавляются скорости релаксации ориентации  $\Gamma^{(1)}$  или выстраивания  $\Gamma^{(2)}$ , за счет упругих деполяризующих столкновений, т. е. столкновений, которые не меняют населенность уровня, но меняют распределение атомов по зеемановским подуровням.

Поскольку в эксперименте наблюдается явная зависимость  $\gamma^{(0)}(p)$  для всех буферных газов, мы обязаны предположить наличие упругого процесса, уменьшающего амплитуду стимулированного фотонного эха независимо от поляризаций световых импульсов, формирующих его. И такой процесс существует, это упругое рассеяние с изменением скорости (velocity changing collisions), и его скорость, очевидно, должна возрастать с увеличением давления буферного газа. В теории деполяризующих столкновений обычно предполагается, что скорость не изменяется. Однако наличие упругих столкновений с изменением скорости наблюдалось в экспериментах по двухимпульсному фотонному эху в виде отклонения от экспоненциального затухания сигнала

**Таблица 2.** Константы скоростей релаксации за счет столкновений с изменением скорости  $d\gamma_{vcc}/dp$ , ориентации  $d\Gamma^{(1)}/dp$  и выстраивания  $d\Gamma^{(2)}/dp$  (в единицах  $10^7 \text{ с}^{-1} \cdot \text{Торр}^{-1}$ )

Буферный газ	$d\gamma_{vcc}(p)/dp$	$d\Gamma^{(1)}/dp$	$d\Gamma^{(2)}/dp$
He	$2.72 \pm 0.12$	$0.03 \pm 0.12$	$0.32 \pm 0.18$
Ne	$2.52 \pm 0.13$	$0.19 \pm 0.13$	$0.53 \pm 0.15$
Ar	$2.49 \pm 0.11$	$0.13 \pm 0.11$	$0.68 \pm 0.13$
Kr	$2.54 \pm 0.14$	$0.19 \pm 0.14$	$0.94 \pm 0.18$
Xe	$2.98 \pm 0.13$	$0.32 \pm 0.11$	$0.97 \pm 0.11$

ла эха как функции времени задержки между возбуждающими импульсами [16] и исследовалось методом стимулированного фотонного эха [17]. Для СФЭ, сформированного импульсами резонансного излучения с неколлинеарными векторами, предсказано влияние на зависимость СФЭ ( $\tau_{23}$ ) упругого рассеяния с изменением скорости [18, 19]. В нашем эксперименте использована как раз угловая схема формирования СФЭ. И хотя угол между векторами трех световых импульсов, формирующих СФЭ, мал, зато давление буферных газов варьируется в широких пределах, и вклад упругого рассеяния с изменением скорости может проявиться. В наших экспериментах не наблюдалось отклонения кинетики СФЭ от экспоненциальной, которое, согласно [18, 19], должно проявляться в области малых задержек  $\tau_{23}$ . В наших экспериментах, как видно на рис. 2, минимальная задержка равна 80 нс. Тем не менее можно предположить, что измеренные зависимости  $\gamma^{(0)}(p)$  обусловлены, вероятнее всего, именно столкновениями с изменением скорости —  $\gamma^{(0)}(p) = \gamma_{vcc}(p)$ . Следуя этой логике, для выделения вклада чисто деполяризующих столкновений (релаксации ориентации  $\Gamma^{(1)}$  или выстраивания  $\Gamma^{(2)}$ ) необходимо вычесть из измеренных зависимостей  $\gamma^{(1)}(p)$  и  $\gamma^{(2)}(p)$  зависимости  $\gamma_{vcc}(p)$ . В табл. 2 представлены константы скоростей релаксации за счет упругих столкновений с изменением скорости  $d\gamma_{vcc}(p)/dp$  и константы скоростей релаксации ориентации  $d\Gamma^{(1)}/dp$  и выстраивания  $d\Gamma^{(2)}/dp$ .

Из табл. 2 видно, что точность измерений невелика в случае легких буферных газов. Тем не менее значения констант релаксации ориентации  $d\Gamma^{(1)}/dp$  показывают возрастающую зависимость от массы буферных газов; для констант релаксации выстраивания

вания  $d\Gamma^{(2)}/dp$  эта зависимость выражена сильнее. Зависимость  $d\gamma_{vcc}(p)/dp$  носит тот же характер — возрастание с ростом массы буферного газа.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе впервые методом стимулированного фотонного эха определены скорости релаксации всех моментов поляризации верхнего рабочего уровня  $^3P_1$  оптического перехода типа 0–1: населенности  $\gamma^{(0)}$ , ориентации  $\gamma^{(1)}$  и выстраивания  $\gamma^{(2)}$ . Эксперименты выполнены для перехода  $^{174}\text{Yb}$  ( $6s^2$ ) $^1S_0 \leftrightarrow (6s6p)^3P_1$  (тип 0  $\leftrightarrow$  1) в условиях разбавления атомов иттербия инертными газами с использованием схемы углового стимулированного эха с малыми углами между векторами трех импульсов резонансного излучения, формирующими сигнал СФЭ. Измерения проведены в широком диапазоне давления буферных газов; скорости релаксации  $\gamma^{(0)}$ , ориентации  $\gamma^{(1)}$  и выстраивания  $\gamma^{(2)}$  линейно возрастали с увеличением давления буферного газа. Наличие зависимости  $\gamma^{(0)}(p)$  от давления буферных газов, очевидно, связано с влиянием упругих столкновений с изменением скорости.

Для тяжелых буферных газов различие между тремя измеренными константами скоростей релаксации  $d\gamma^{(0)}/dp$ ,  $d\gamma^{(1)}/dp$  и  $d\gamma^{(2)}/dp$  заметнее, чем для легких буферных газов. Константы релаксации моментов поляризации уровня  $^3P_1$  атомов  $^{174}\text{Yb}$  возрастают с ростом массы буферного газа, что согласуется с теоретическими представлениями о деполаризующих столкновениях атомов.

Получить теоретическое представление об относительном вкладе упругих столкновений с изменением скорости по сравнению с деполаризующими столкновениями сложно. В работах [18, 19] не учитывается вырождение уровней, а в теории деполаризующих столкновений предполагается отсутствие изменения скорости при столкновениях. Результаты, полученные в данной работе, очевидно, показывают важность таких особенностей эксперимента, как применение схемы углового эха даже при малых углах между волновыми векторами возбуждающих импульсов.

## ЛИТЕРАТУРА

1. E. L. Hahn, Phys. Rev. **80**, 580 (1950).
2. У. Х. Копвиллем, В. Р. Нагибаров, Физика металлов и металловедение **15**, 313 (1963).
3. N. A. Kurnit, I. D. Abella, and S. R. Hartmann, Phys. Rev. Lett. **13**, 567 (1964).
4. M. Scully, M. J. Stephen, and D. C. Burnham, Phys. Rev. **171**, 213 (1968).
5. В. В. Самарцев, Укр. физ. ж. **14**, 1045 (1969).
6. C. K. N. Patel and R. E. Slusher, Phys. Rev. Lett. **20**, 1087 (1968).
7. И. В. Евсеев, Дисс. ... докт. физ.-матем. наук, МИФИ, Москва (1987).
8. И. В. Евсеев, В. М. Ермаченко, В. В. Самарцев, *Деполаризующие столкновения в нелинейной электродинамике*, Наука, Москва (1992).
9. V. Reshetov and E. Popov, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **45**, 225502 (2012).
10. И. В. Евсеев, Н. Н. Рубцова, В. В. Самарцев, *Когерентные переходные процессы в оптике*, Физматлит, Москва (2009).
11. J. C. Keller and J. L. Le Gouët, Phys. Rev. Lett. **52**, 2034 (1984).
12. M. Saïdi, J. C. Keller, and J. L. Le Gouët, J. Phys. France **49**, 1513 (1988).
13. B. Kerkeni, A. Spielfiedel, and N. Feautrier, Astron. Astrophys. Sec. Astrophys. Processes **402**, 5 (2003).
14. R. M. Sainz, O. Roncero, C. Sanz-Sanz et al., Astrophys. J. **788**, 118 (2014).
15. I. V. Yevseyev, V. N. Ishchenko, E. B. Khvorostov et al., Laser Phys. Lett. **4**, 524 (2007).
16. B. Comaskey, R. E. Scotti, and R. L. Shoemaker, Opt. Lett. **6**, 45 (1981).
17. R. Kachru, T. W. Mossberg, and S. R. Hartmann, Opt. Commun. **30**, 57 (1979).
18. E. N. Akhmedshina, L. A. Nefediev, and G. I. Garnaeva, J. Appl. Spectrosc. **82**, 669 (2015).
19. E. N. Ahmedshina, L. A. Nefediev, Y. A. Nefediev, G. I. Garnaeva, and N. E. Zamaliev, J. Appl. Spectrosc. **85**, 1017 (2019).

# ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПУЧКОВ ПРОТОНОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С УЧЕТОМ ПЕРЕСОЕДИНЕНИЯ МАГНИТНЫХ СИЛОВЫХ ЛИНИЙ

*В. С. Беляев*<sup>a\*</sup>, *Б. В. Загреев*<sup>a</sup>, *А. Ю. Кедров*<sup>a</sup>,  
*А. Г. Кольчугин*<sup>a</sup>, *В. П. Крайнов*<sup>b\*\*</sup>, *А. П. Матафонов*<sup>a</sup>

<sup>a</sup> АО «Центральный научно-исследовательский институт машиностроения»  
141070, Королев, Московская обл., Россия

<sup>b</sup> Московский физико-технический институт (государственный университет)  
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 24 апреля 2021 г.,  
после переработки 21 мая 2021 г.  
Принята к публикации 21 мая 2021 г.

Представлены экспериментальные и теоретические результаты моделирования распространения пучков протонов на лазерной установке «Неодим». Исследовалась пространственная структура, расходимость и энергия пучков протонов, возникающих с тыльной стороны тонкой мишени из меди, облучаемой лазерными импульсами с пиковой интенсивностью порядка  $5 \cdot 10^{18}$  Вт/см<sup>2</sup>. При энергии протонов 2.9 МэВ зарегистрирована предельно узкая расходимость протонного пучка, равная  $0.05^\circ$ . Для теоретического объяснения полученных экспериментальных данных использована модель Свита–Паркера пересоединения магнитных силовых линий.

DOI: 10.31857/S0044451021100035

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование пучков протонов в магнитоактивной плазме является одной из ключевых проблем в физике плазмы [1–5], при интерпретации струй из аккреционных дисков в окрестности черных дыр [6–9], торнадо в солнечной атмосфере [10, 11], а также в лабораторной плазме [12, 13]. Генерация магнитных полей является характерным процессом в плазме на разных ее пространственных и временных масштабах — во Вселенной на галактических масштабах, на крупномасштабных лабораторных плазменных установках, в лазерной релятивистской плазме на масштабах скин-слоя порядка длины волны лазерного излучения. В лазерной плазме генерируются сверхсильные магнитные поля с напряженностью до одного гигагаусса, недостижимой на Земле на других физических установках.

Существование магнитных полей в условиях плазменных потоков неизбежно приводит к процессу магнитного пересоединения (см. подробнее ниже). Пересоединение является наиболее важным, ключевым процессом, определяющим эффективное преобразование магнитной энергии в кинетическую энергию легких и тяжелых заряженных частиц.

Исследованиям аномально узкой расходимости протонных пучков высокой энергии, возникающих как с фронтальной, так и с тыльной поверхности плоской мишени, облучаемой высокоинтенсивными лазерными импульсами, посвящено много экспериментальных и теоретических работ [14–18].

Коллимация протонных пучков происходит вследствие действия магнитного поля на заряженные частицы. Магнитное поле генерируется в лазерной плазме мишени, или с тыльной стороны поверхности мишени. Авторы работы [16] объясняют наличие кольцевых структур пучков протонов влиянием мощного тороидального магнитного поля в несколько десятков мегагауссов, которое генерируется с тыльной стороны мишени, где

\* E-mail: belyaev@tsniimash.ru

\*\* E-mail: vpkrainov@mail.ru

быстрые электроны образуют виртуальный катод. Кольцевая структура эмиссии протонов приводит авторов работы [16] к выводу, что тороидальное магнитное поле, созданное горячими электронами, воздействует на быстрые протоны и отклоняет их. При этом обнаружена зависимость диаметра кольцевых структур от энергии протонов.

В работе [19] приводятся результаты исследования трехмерной пространственной структуры магнитных полей, спонтанно генерируемых на передней и тыльной поверхностях мишени, облучаемой высокоинтенсивным лазерным излучением, причем на задней поверхности магнитное поле сильнее, чем на передней. Имеет место тороидальная структура таких полей и ориентация ее по нормали к поверхности мишени. Наличие такой структуры определяет характер действия ее магнитного поля на протоны. Протоны под действием такого магнитного поля формируются в замкнутые структуры, а тороидальный характер магнитного поля препятствует их ускорению. Поперечный профиль таких тороидальных структур обуславливает резкое увеличение силы, действующей на протоны в направлении от центра до края узкой центральной области, где она быстро исчезает. Протоны с большей энергией концентрируются в области, близкой к центру тороидальной структуры. Это отражает представленная в работе [19] расчетная зависимость ларморовских радиусов электронов и протонов от интенсивности лазерного излучения.

Важным явлением, сопровождающим рассмотренный процесс формирования тонкого токового слоя, является пересоединение силовых линий [20, 21]. Геометрия магнитного поля с параллельными противоположно направленными силовыми линиями неустойчива. Возможно относительно быстрое пересоединение силовых линий, уменьшение магнитного поля с выделением большой энергии, идущей на ускорение заряженных частиц.

Пересоединение магнитных силовых линий в плазме в общем случае — изменение топологии магнитного поля, связанное с нарушением его в замороженности в плазму, обычно сопровождается высвобождением свободной магнитной энергии плазменной структуры и ее преобразованием в кинетическую энергию частиц, которые могут ускоряться вплоть до релятивистских скоростей [22].

Одна из моделей пересоединения магнитных силовых линий основана на аннигиляции противоположно направленных магнитных полей, приводящей к перестройке структуры магнитного поля. Аннигиляция магнитных полей ведет к уменьшению

общей длины силовых линий и, как следствие этого, к уменьшению энергии поля с ее преобразованием в кинетическую энергию заряженных частиц [23, 24]. Силовые линии выносятся из области пересоединения вместе с плазмой, ускоряемой до скоростей порядка альфвеновской [25] (см. ниже).

Магнитное пересоединение широко используется для объяснения плазменных процессов на самых разных пространственных и временных масштабах — солнечных вспышек [26], генерации высокоэнергетических частиц [27], энергетики эмиссии фотонов [28]. В работе [24] магнитное пересоединение наблюдалось в лабораторной плазме, образованной мощным пикосекундным лазерным импульсом. При этом реализованы условия пересоединения в магнитном поле порядка  $10^7$  Гс, которое сравнимо с магнитным полем в аккреционном диске черной дыры. В этих условиях в вытекающих потоках наблюдалась степенная зависимость распределения как электронов, так и протонов по энергиям.

## 2. ЛАБОРАТОРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПУЧКОВ ПРОТОНОВ

В рамках работ по физическому моделированию в лабораторных условиях космических струй заряженных частиц проведены эксперименты по исследованию пространственного распределения пучков ускоренных протонов с использованием трековых детекторов CR-39. Эксперименты проводились на лазерной установке «Неодим» [29] с уровнем мощности 10 ТВт. Лазерная установка имеет следующие параметры лазерного импульса: энергия до 15 Дж, длина волны 1.055 мкм, длительность 1.0 пс, контраст лазерного излучения порядка  $10^8$ . Система фокусировки на основе внеосевого параболического зеркала с фокусным расстоянием 20 см обеспечивает концентрацию не менее 40% энергии лазерного пучка в пятно диаметром 10 мкм и пиковую интенсивность излучения порядка  $5 \cdot 10^{18}$  Вт/см<sup>2</sup>.

Схема проведения экспериментов по исследованию пространственного распределения пучков ускоренных протонов представлена на рис. 1. Трековые детекторы CR-39 размером  $20 \times 25$  мм<sup>2</sup> располагались на расстоянии 20 мм от мишени по нормали за мишенью.

В серии измерений с мишенью из меди толщиной 100 мкм на детекторе CR-39 наблюдалась кольцевая структура протонных треков в центральной области из 100 частиц на площади диаметром около 30 мкм (рис. 2). Размер кадра составлял  $120 \times 90$  мкм<sup>2</sup>.

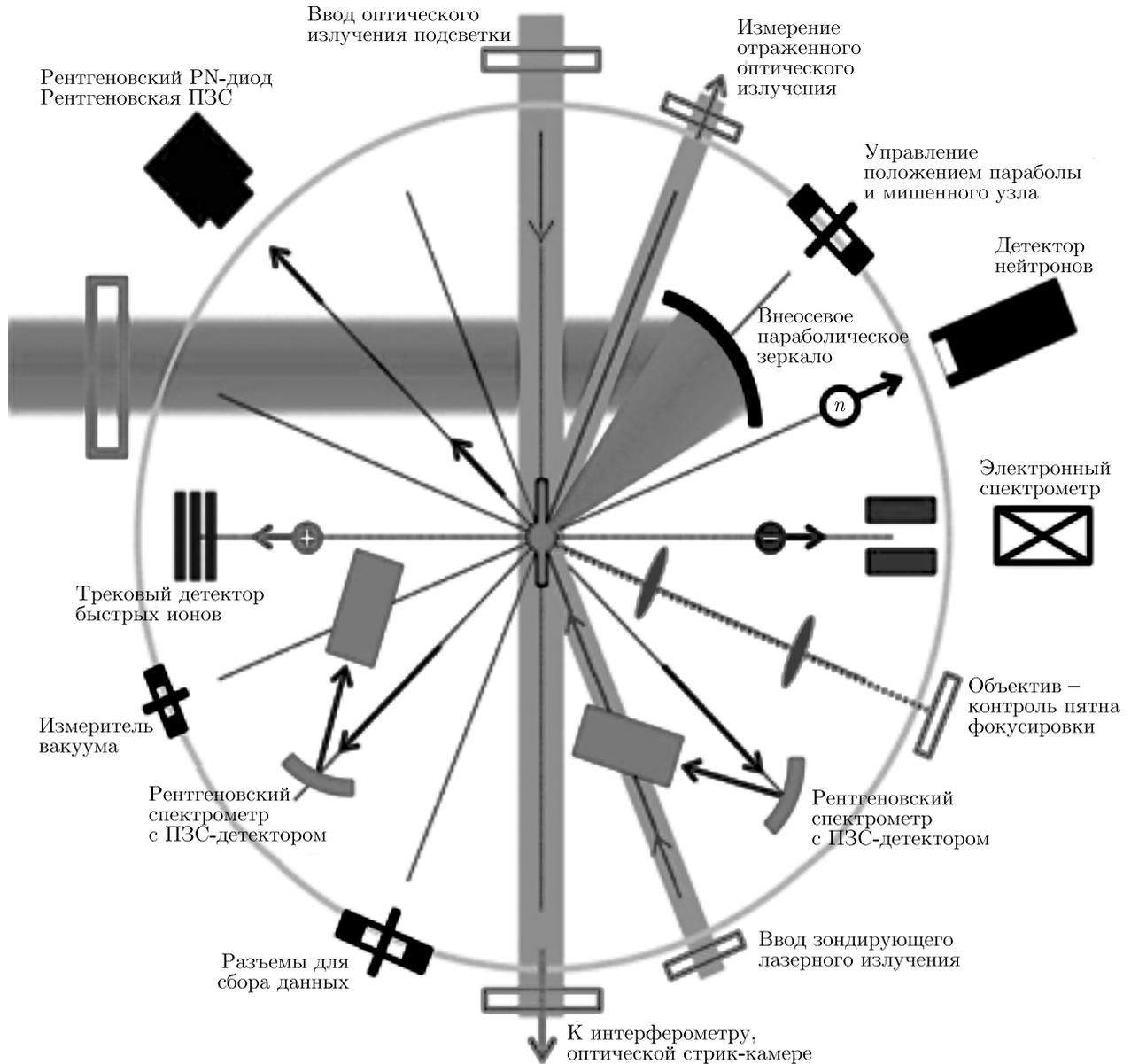


Рис. 1. Схема измерительной аппаратуры и лазерного пучка

Оценка энергии протонов в этом случае составляет  $E > 1.3$  МэВ.

В другой серии измерений с такой же медной мишенью на детекторе CR-39 с покрытием 77 мкм Al также наблюдалась кольцевая структура протонных треков в центральной области (рис. 3). Наблюдается около 100 частиц на площади диаметром около 20 мкм. Оценка энергии протонов:  $E > 2.9$  МэВ. Угол расходимости протонного пучка в этом случае составляет около  $0.05^\circ$ ; он минимален в наших экспериментах, также минимален среди известных результатов, достигнутых в мире на лазерных уста-

новках в аналогичных экспериментах. Результаты проведенных экспериментов сведены в таблицу, где дана связь ларморовского радиуса  $R_L$  с соответствующей энергией протонов  $E$ .

Величина напряженности магнитного поля  $B$  связана с интенсивностью  $J$  лазерного излучения соотношением [30]

$$J [\text{Вт/см}^2] = 100B^2 [\text{Гс}]. \quad (1)$$

При  $J = 5.7 \cdot 10^{18}$  Вт/см<sup>2</sup> отсюда получим  $B = 240$  МГс. Результаты работы [19] по зависимости напряженности генерируемого магнитного поля от

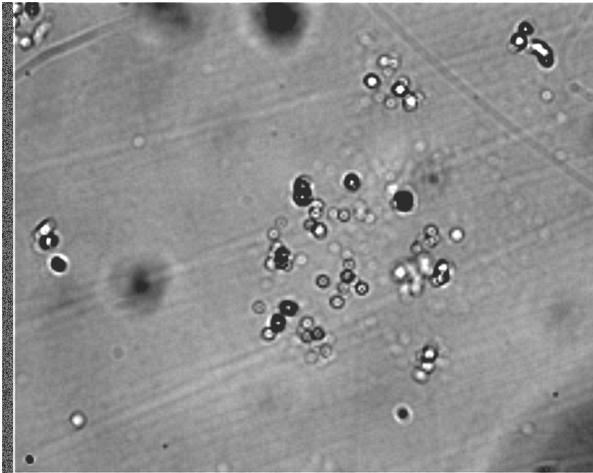


Рис. 2. Микрофотография кольцевой структуры протонных треков на поверхности детектора. Al-фильтр перед детектором имеет толщину 22 мкм. Размер кадра равен  $120 \times 90 \text{ мкм}^2$

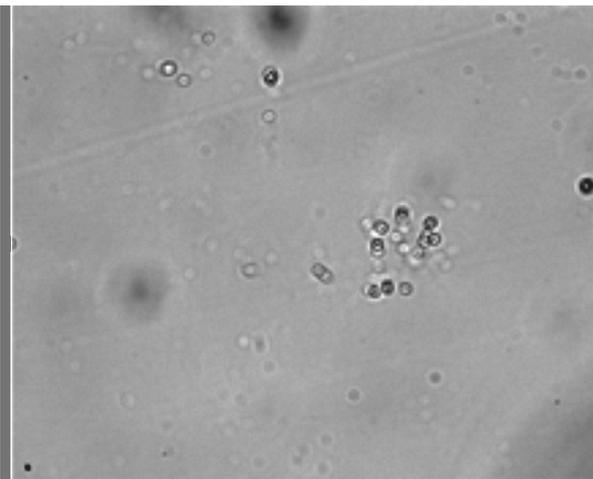


Рис. 3. Микрофотография кольцевой структуры протонных треков на поверхности детектора. Al-фильтр перед детектором имеет толщину 77 мкм. Размер кадра равен  $120 \times 90 \text{ мкм}^2$

Таблица. Связь ларморовского радиуса  $R_L$  и соответствующей энергии протонов  $E$

Номер измерения	1	2	3
$R_L$ , мкм	10	15	10.5
$E$ , МэВ	2.9	1.3	2.6

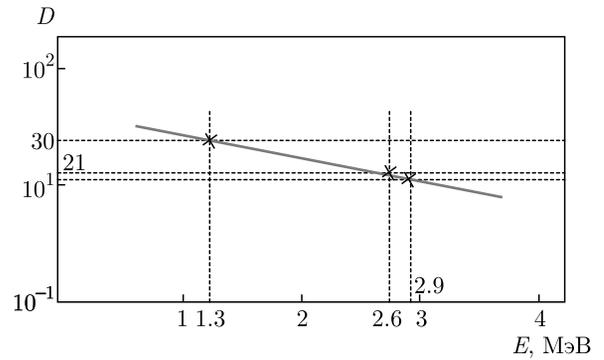


Рис. 4. Зависимость ларморовского диаметра  $D = 2R_L$  протонного кольцевого пучка от энергии протонов  $E$

интенсивности лазерного излучения согласуются с формулой (1). Экспериментальная зависимость ларморовских радиусов электронов и протонов от интенсивности лазерного излучения [19] дается соотношением

$$R_L = \frac{\text{const}}{\sqrt{J}}. \tag{2}$$

Как показано в работе [25], интенсивность лазерного излучения  $J$  пропорциональна энергии протонов  $E$ , движущихся в направлении распространения лазерного излучения. Тогда соотношение (2) можно представить как зависимость от энергии:

$$R_L = \frac{\text{const}}{\sqrt{E}}. \tag{3}$$

Объяснение экспериментальной зависимости (3) дается в следующем разделе.

На рис. 4 показаны результаты обработки проведенных на установке «Неодим» и представленных выше экспериментов по исследованию кольцевых протонных структур, возникающих с тыльной стороны мишени, облучаемой лазерными импульсами с пиковой интенсивностью порядка  $5 \cdot 10^{18} \text{ Вт/см}^2$ .

Полученная прямая отражает степенную зависимость радиуса кольцевого протонного пучка от энергии протонов. Рисунок 4 позволяет определить характер зависимости ларморовских радиусов протонов  $R_L$  от энергии протонов  $E$ , движущихся в направлении распространения лазерного излучения. Эта зависимость имеет вид, хорошо согласующийся с выражением (3) и с результатами экспериментов, представленных в работах [16, 19].

### 3. МОДЕЛЬ ТОКОВОГО СЛОЯ

Рассмотрим, следуя работе [21], формирование токового слоя в случае сильного магнитного поля,

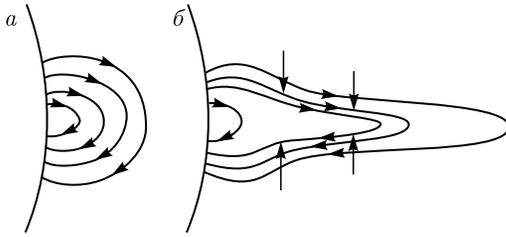


Рис. 5. Формирование плазменного слоя со стороны тыльной поверхности лазерной мишени [21]

когда его давление  $B^2/8\pi$  намного превышает плазменное давление  $p$ , т. е.

$$\beta = 8\pi p/B^2 \ll 1. \quad (4)$$

В качестве начального поля возьмем поле на тыльной поверхности лазерной мишени, силовые линии которого показаны на рис. 5а.

Силы давления магнитного поля растягивают это поле, как показано на рис. 5б. В области, разделяющей противоположно направленные поля, суммарное магнитное поле мало, а на горизонтальной оси оно обращается в нуль. В окрестности оси электромагнитные силы  $[\mathbf{j}, \mathbf{B}]$  (показаны стрелками) стремятся сжать конфигурацию поля. Сжатие конфигурации поля происходит при условии сохранения потока индукции магнитного поля  $\mathbf{B}$  через площадь, ограниченную окружностью радиуса  $r$ :

$$Br^2 = \text{const}. \quad (5)$$

В общем случае магнитное поле в поперечном направлении оказывает давление, а в продольном — создает натяжение. Равновесие может установиться, когда магнитное давление будет уравновешено плазменным давлением. Однако в случае, когда в начальный момент  $\beta \ll 1$ , плазменное давление мало. Равновесие может установиться, когда произойдет достаточное скопление плазмы вблизи оси и, как следствие этого, повышение плазменного давления. Рассмотренный механизм качественно описывает формирование токового плазменного слоя, толщина которого тем меньше, чем меньше начальное значение  $\beta$ .

Рассмотрим механизм ускорения протонов аналогично, как это сделано для электронов в работе [30] при рассмотрении механизма образования электронов высокой энергии в лазерной плазме. Для этого используем закон сохранения обобщенного импульса заряженной частицы (с зарядом  $e$ ) в электромагнитном поле [31]:

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}, \quad (6)$$

где  $\mathbf{p} = M_p\mathbf{V}$  — обычный импульс нерелятивистского протона,  $\mathbf{A}$  — вектор-потенциал поля.

Зададим ось  $z$  в направлении магнитного поля. В этом случае компоненты

$$B_x = B_y = 0, \quad B_z = B.$$

С учетом цилиндрической симметрии будем считать, что

$$A = Br.$$

При этом из соотношения (6), принимая во внимание сохранение обобщенного импульса и полагая равным нулю его первоначальное значение, находим

$$M_pV = \frac{e}{c}r. \quad (7)$$

Совместное решение уравнений (5) и (7) дает зависимость радиуса сжатия, в данном случае ларморовского радиуса, наблюдаемого в описанных выше экспериментах, обратно пропорциональную квадратному корню из энергии протона (см. (3)):

$$r = \frac{\text{const}}{\sqrt{E}}. \quad (8)$$

В логарифмическом масштабе прямая линия соответствует прямой на рис. 5, полученной экспериментально (см. также [19]).

Таким образом, в основе механизма эффективной трансформации энергии магнитного поля плазменного потока в кинетическую энергию заряженной частицы (протона) в процессе пересоединения с аннигиляцией магнитного поля лежит закон сохранения обобщенного импульса (7). По образному выражению Р. Фейнмана [32] "... если вы действуете на заряд векторным потенциалом, включив его внезапно, то этот заряд немедленно схватит импульс  $\mathbf{p}$ , равный  $-e\mathbf{A}/c$ . Сумма

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} + e\mathbf{A}/c$$

есть то, что не меняется, если вы подвергаете вектор-потенциал внезапному изменению. Именно эта величина (обобщенный импульс) играет важную роль в классической динамике, она же оказывается существенной и в квантовой механике".

Генерация заряженных частиц является одним из главных следствий эффекта пересоединения в космосе [20]. Естественно рассмотреть процесс пересоединения при моделировании ускорения заряженных частиц в лабораторных условиях в лазерной плазме. Имеется много различных типов пересоединения и множество параметрических режимов, ответственных за генерацию и ускорение заряженных частиц [20].

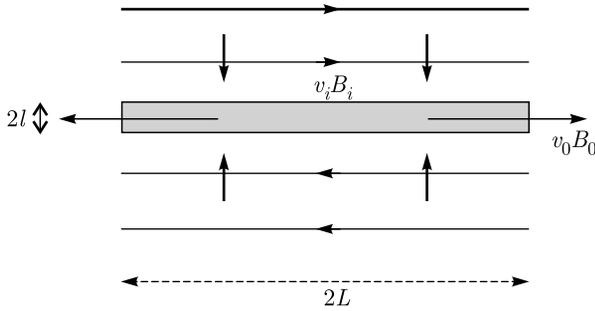


Рис. 6. Модель Свита–Паркера

Возникновение полоидального магнитного поля как с фронтальной, так и с задней стороны лазерной мишени может быть обусловлено тороидальным током, возникающим в скин-слое в результате развития неустойчивости Вайбеля [29, 33].

Воспользуемся наиболее простой моделью магнитного пересоединения Свита–Паркера [20, 34], в которой слой магнитной диффузии (область с большим магнитным градиентом, где силовые линии могут диффундировать, разрываться и пересоединяться) существует вдоль всей границы между магнитными полями противоположного знака.

В рамках модели Свита–Паркера используется область диффузии длиной  $L$  и шириной  $l$ , расположенная между противоположно направленными магнитными полями. Эта область с прилегающими к ней магнитными полями показана на рис. 6.

Модель позволяет оценить по порядку величины скорость  $v_i$  вхождения магнитного поля  $B_i$  в диффузионный слой (рис. 6):

$$v_i = \frac{\eta}{l}. \tag{9}$$

Здесь  $\eta$  [см<sup>2</sup>/с] — коэффициент магнитной диффузии. Соотношение (9) следует, как показано в [20], непосредственно из закона Ома в предположении, что в стационарном состоянии плазма должна вносить поле внутрь слоя с той же скоростью, с какой магнитное поле стремится диффундировать наружу.

Соотношение (9) получено с помощью известного метода оценки решений дифференциальных уравнений заменой дифференцирования по координатам умножением на величины, обратные характерным длинам. Этим качественным методом широко пользовался Альфвен [34], отмечая, что он является весьма полезным и часто используется на практике. В соответствии с этим соотношение (9) есть следствие магнитной диффузии.

Следуя [33], опишем основные принципы модели Свита–Паркера. Основные уравнения модели включают уравнение для магнитной индукции:

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \text{rot} [\mathbf{V}, \mathbf{B}] + \eta \Delta \mathbf{B}, \tag{10}$$

и закон Ома для стационарного случая ( $\sigma$  — проводимость плазмы) движущейся плазмы:

$$\frac{\mathbf{j}}{\sigma} = \mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{V}, \mathbf{B}]. \tag{11}$$

Магнитное поле, согласно уравнению (10), может меняться во времени по двум причинам — за счет переноса плазмой вмороженного в него поля (первый член в правой части уравнения) и за счет диффузии магнитного поля в плазме (второй член). В большинстве случаев как во Вселенной, так и в лабораторной плазме второй член много меньше первого и роль магнитной диффузии мала (вследствие большого значения магнитного числа Рейнольдса течение является идеальным).

Однако в процессе магнитного пересоединения роль диффузии магнитного поля определяет весь процесс динамического равновесия проникновения магнитного поля вместе с плазмой в диффузионный (токовый) слой и диффузии магнитного поля поперек магнитных силовых линий наружу. Эта диффузия в процессе пересоединения носит характер аномальной диффузии Бома, доминирующей в сильных магнитных полях, возникающих в условиях развития пинч-эффекта при пересоединении. Аномальная диффузия Бома [35] определяется большим коэффициентом диффузии (более 1 м<sup>2</sup>/с), который, как показано в работе [36], является адиабатическим инвариантом в сильном магнитном поле: он определяет характер кинетических процессов в плазме.

В соответствии с законом сохранения массы (рис. 6) поток поступления массы внутрь слоя должен быть равен потоку истечения на обоих концах:  $Lv_i = lv_0$ . Тогда согласно (9) получаем

$$v_i^2 = \frac{\eta v_0}{L}. \tag{12}$$

Напряженность выходящего магнитного поля  $B_0$  определяется из условия сохранения магнитного потока:

$$v_i B_i = v_0 B_0. \tag{13}$$

Под действием силы Лоренца плазма ускоряется от состояния покоя до скорости  $v_0$ . Отсюда получаем (с учетом соотношения  $Lv_i = lv_0$  и (13))

$$\rho \frac{v_0^2}{L} = \frac{B_i B_0}{l} = \frac{B_i^2}{L}. \tag{14}$$

Таким образом, альфвеновская скорость вытекания определяется соотношением

$$v_0 = \frac{B_i}{\sqrt{4\pi\rho}}. \quad (15)$$

Следовательно, магнитное поле пересоединяется со скоростью

$$v_i = \frac{v_0}{\sqrt{R_m}}, \quad R_m = \frac{Lv_0}{\eta}. \quad (16)$$

Величина  $R_m$ ,  $R_m \gg 1$ , — это магнитное число Рейнольдса.

Итак, модель Свита–Паркера состоит в том (рис. 6), что из тонкого слоя шириной

$$l = L/\sqrt{R_m} \ll L$$

плазма выбрасывается с альфвеновской скоростью  $v_0$  и напряженностью магнитного поля

$$B_i = B_0/\sqrt{R_m} \ll B_0.$$

Появление альфвеновской скорости течения плазмы в случае сжимаемой плазмы требует пояснения. Альфвеновские волны, как известно, распространяются в несжимаемой плазме. Их существование и свойства описываются уравнениями магнитной гидродинамики. Условие несжимаемости  $\text{div } \mathbf{V} = 0$ , при котором рассмотрение сильно упрощается, оказывается справедливым для многих возмущений в плазме. Суть дела не в том, что плазма несжимаема, а в том, что существуют изменения, которые не меняют плотности плазмы [35]. Добавим, что в случае пересоединения плотность плазмы меняется, но соотношение параметров, куда входит и плотность, остается неизменным, оставляя без изменений основной параметр процесса — скорость истечения плазмы из тонкого токового (диффузионного) слоя.

Проведем, согласно изложенному рассмотрению модели магнитного пересоединения, оценку ее применимости к объяснению проведенных и представленных выше экспериментов.

Прежде всего оценим величину магнитного пологоидального поля на задней поверхности лазерной мишени. В экспериментах использовалась мишень из меди толщиной 100 мкм. Как отмечалось выше, магнитное поле, генерируемое в скин-слое облучаемой мишени при интенсивности  $5.7 \cdot 10^{18}$  Вт/см<sup>2</sup>, достигает согласно (3) значений 240 МГс. В качестве механизма генерации магнитного поля в скин-слое лазерной мишени при воздействии на нее лазерного излучения примем неустойчивость Вайбеля [21],

в результате развития которой в скин-слое образуется вихревая электронная структура с диаметром  $2R_0$ , равным диаметру фокального пятна при фокусировке лазерного излучения. Если значение магнитного поля в центре такого витка с током равно  $B$ , то поле на расстоянии  $d$  от центра витка по прямой, перпендикулярной плоскости витка, равно

$$B_i = B \frac{R_0^3}{d^3}. \quad (17)$$

Для наших экспериментов на тыльной стороне мишени толщиной  $d = 100$  мкм при  $R_0 = 10$  мкм и  $B = 2.4 \cdot 10^8$  Гс магнитное поле (17) будет равно  $B_i = 2.4 \cdot 10^5$  Гс.

Согласно (16), скорость истечения плазмы при магнитном пересоединении равна альфвеновской скорости вытекания. Она определяется параметрами области втекания магнитного поля в диффузионный слой — величиной магнитного поля  $B_i$  и плотностью среды  $\rho$ .

Для наших условий экспериментов с тыльной стороны мишени в вакуумной камере плотность плазмы  $\rho = 10^{-9}$  г/см<sup>3</sup>. С учетом этого из (16) получаем нерелятивистскую скорость  $v_0 = 2.2 \cdot 10^9$  см/с  $\ll c$ . Полученное значение скорости истечения хорошо согласуется с экспериментальным значением скорости протонов с энергией 2.9 МэВ. Для этого значения скорость протона равна  $2.3 \cdot 10^9$  см/с.

Оценим важный параметр — время пересоединения для случая несжимаемой плазмы. Это время равно

$$\tau = \frac{L}{v_i}. \quad (18)$$

Здесь  $v_i$  — скорость втекания плазмы в диффузионный слой, определяемая выражением (16), в котором коэффициент магнитной диффузии, согласно сделанному выше замечанию, надо заменить на коэффициент диффузии Бома — диффузии плазмы поперек магнитных силовых линий. Получаем

$$\tau = \frac{L}{v_0} \sqrt{R_m}. \quad (19)$$

Коэффициент диффузии Бома найдем из выражения [35]

$$\eta = \frac{kT}{16eB_i}, \quad (20)$$

где  $k$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура плазмы,  $e$  — заряд электрона.

Адиабатическая инвариантность коэффициента диффузии Бома, как отмечалось в работе [36], обусловлена пропорциональностью тепловой энергии частиц  $kT$  напряженности магнитного поля  $B_i$ .

Принимая кинетическую энергию протона равной 2.9 МэВ, напряженность магнитного поля в области втекания равной  $B_i = 2.4 \cdot 10^5$  Гс, получим, что  $\eta = 10^5$  см<sup>2</sup>/с. С учетом этого значения, принимая  $l = 10$  мкм, получим  $L = 200$  мкм,  $R_m = 400$ . Подставляя эти значения в (20), получим время пересоединения  $\tau = 2 \cdot 10^{-10}$  с. Малая величина времени пересоединения обусловлена большим значением коэффициента диффузии Бома. Отметим, что время пересоединения силовых линий велико по сравнению с длительностью лазерного импульса, так что все эффекты протекают уже после его завершения.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приведены результаты моделирования космических струй на лазерной установке «Неодим». Исследовались пространственная структура, расходимость и энергия пучка протонов, возникающих с тыльной стороны мишени из медной пластинки, облучаемой лазерным излучением с интенсивностью порядка  $5 \cdot 10^{18}$  Вт/см<sup>2</sup>. Зарегистрирована предельно узкая расходимость протонного пучка  $0.05^\circ$  при энергии протонов 2.9 МэВ. Показано, что в основе механизма эффективной трансформации энергии магнитного поля плазменного потока в кинетическую энергию протона лежит процесс пересоединения магнитных силовых линий с аннигиляцией магнитного поля. С учетом этого процесса и условия сохранения магнитного потока получена зависимость радиуса сжатия (ларморовского радиуса) при пересоединении: она обратно пропорциональна квадратному корню из энергии протона. Полученная зависимость хорошо соответствует результатам экспериментов, проведенных как на нашей установке «Неодим», так и в лаборатории LULI (Франция).

Для теоретического объяснения полученных экспериментальных данных использована модель Свита–Паркера пересоединения магнитных силовых линий. Полученные результаты хорошо согласуются с результатами проведенных экспериментов. Отмечается ключевая роль в магнитном пересоединении процесса аномальной диффузии Бома — диффузии плазмы поперек магнитных силовых линий. Малая величина времени пересоединения обусловлена большим значением коэффициента диффузии Бома. С учетом этого процесс пересоединения Свита–Паркера уже нельзя считать медленным. Основной полученный результат — скорость истечения плазмы одинакова как в случае несжимаемой, так и в случае сжимаемой жидкости. Она равна альфве-

новской скорости втекания плазмы в узкий токовый (диффузионный) слой, в котором и происходит процесс пересоединения магнитных линий. Полученное значение скорости истечения хорошо согласуется с экспериментальным значением скорости протонов с энергией 2.9 МэВ.

**Финансирование.** Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 18-29-21021 МК).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. S. Chandrasekhar, Proc. Natl. Acad. Sci. **42**, 273 (1956).
2. S. Chandrasekhar, Astrophys. J. **124**, 232 (1956).
3. O. I. Bogoyavlenskij, Phys. Lett. A **276**, 257 (2000).
4. P. M. Bellan, Phys. Plasmas **25**, 055601 (2018).
5. O. G. Onishchenko et al., Phys. Plasmas **25**, 054503 (2018).
6. R. V. E. Lovelace et al., Astroph. J. Suppl. Ser. **62**, 1 (1986).
7. A. Ferrari, Ann. Rev. Astron. Astrophys. **36**, 539 (1998).
8. В. С. Бескин, УФН **180**, 1241 (2010).
9. S. G. Moiseenko et al., Month. Not. Roy. Astron. Soc. **370**, 501 (2006).
10. V. Fedun et al., Astrophys. J. Lett. **740**, L46 (2011).
11. S. Wedemeyer-Böhm et al., Nature **486**, 505 (2012).
12. В. С. Беляев и др., Астроном. ж. **95**, 171 (2018).
13. V. S. Belyaev, A. P. Matafonov, and B. V. Zagreev, Int. J. Mod. Phys. D **27**, 1844002 (2018).
14. K. Krushelnick et al., Phys. Plasmas **7**, 2055 (2001).
15. M. Zepf et al., Phys. Plasmas **8**, 2323 (2001).
16. Y. Murakami et al., Phys. Plasmas **8**, 4138 (2001).
17. M. Zepf et al., Phys. Rev. Lett. **90**, 064801 (2003).
18. А. А. Андреев и др., Письма в ЖЭТФ **79**, 400 (2004).
19. M. Nakatsutsumi et al., Nature Comm. **9**, 280 (2018).
20. Э. Прист, Т. Форбс, *Магнитное пересоединение: магнитогидродинамическая теория и приложения*, Физматлит, Москва (2005).

21. С. И. Вайнштейн, *Магнитная гидродинамика космической плазмы и токовые слои*, Наука, Москва (1985).
22. Л. М. Зелёный, *Динамика плазмы и магнитных полей в хвосте магнитосферы Земли*, в сб. *Итоги науки и техники. Сер. Исследования космического пространства*, т. 24, Москва (1986).
23. M. Yamada, R. Kulsrud, and H. Ji, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 603 (2010).
24. K. F. F. Law et al., *Phys. Rev. E* **102**, 033202 (2020).
25. В. С. Беляев, В. П. Крайнов, В. С. Лисица, А. П. Матафонов, *УФН* **178**, 823 (2008).
26. P. A. Sweet, in *Symposium of International Astronomical Union*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1958), Vol. 6, p. 123.
27. W. J. Hughes, *Introduction to Space Physics*, ed. by M. G. Kivelson and C. T. Russell, Cambridge Univ. Press, New York (1995).
28. T. Di Matteo, *Month. Not. Roy. Astron. Soc.* **299**, L15 (1998).
29. В. С. Беляев и др., *ЯФ* **76**, 441 (2013).
30. В. С. Беляев, *КЭ* **34**, 41 (2004).
31. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*, Наука, Москва (1988).
32. Р. Фейнман, Р. Лейтон, Р. Сэндс, *Фейнмановские лекции по физике*, вып. 9, Мир, Москва (1978).
33. A. I. Arefyev, V. S. Belyaev et al., *Laser Phys.* **10**, 594 (2000).
34. Г. Альвен, К.-Г. Фельтхаммер, *Космическая электродинамика*, Мир, Москва (1967).
35. Н. Кролл, А. Трайвелпис, *Основы физики плазмы*, Мир, Москва (1975).
36. V. S. Belyaev and V. N. Michailov, *Laser Phys.* **11**, 12 (2001).

# СУБДОПЛЕРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ АТОМАРНЫХ ПАРОВ Cs В НАНОЯЧЕЙКЕ ТОЛЩИНОЙ 400 нм ПРИ КОМНАТНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ

А. Саргсян<sup>a\*</sup>, Р. Момье<sup>a,b</sup>, А. Папоян<sup>a</sup>, Д. Саркисян<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Институт физических исследований Национальной академии наук Армении  
0203, Аштарак, Армения

<sup>b</sup> Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne,  
UMR CNRS 6303, Université Bourgogne — Franche-Comté  
21000, Dijon, France

Поступила в редакцию 28 апреля 2021 г.,  
после переработки 10 июня 2021 г.  
Принята к публикации 10 июня 2021 г.

Экспериментально исследованы субдоплеровские спектры поглощения и флуоресценции на частотах атомных переходов  $D_1$ - и  $D_2$ -линий в парах Cs, заключенных в наноячейку (NC) толщиной  $L \sim 400$  нм, при температуре близкой к комнатной. Показано, что с уменьшением температуры NC до  $35^\circ\text{C}$  происходит сужение линий поглощения до величин, в 6 раз меньших доплеровской ширины. Это позволило измерить сильное уширение спектра, вызванное лазерным полем. Высокий порог по интенсивности для процесса оптической накачки (ограничивающего интенсивность флуоресценции в ячейках сантиметровой длины) при использовании мощности лазера в несколько мВт позволило зарегистрировать спектры флуоресценции при температуре  $20^\circ\text{C}$ , что делает возможным создание маркера частот переходов в области  $D_{1,2}$ -линий на основе NC при комнатной температуре. Проведено сравнение с широко используемым маркером на основе техники насыщенного поглощения.

DOI: 10.31857/S0044451021100047

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Для практических применений ячеек с парами атомов щелочного металла важна их миниатюризация и, следовательно, актуально исследование оптических процессов в тонких ячейках [1, 2]. В работе [3] была использована ячейка с парами атомов Rb с объемом в несколько  $\text{мм}^3$ , что позволило поместить ячейку в середину отверстия внутри постоянного сильного магнита, что, в свою очередь, позволило сформировать магнитные поля  $\approx 6$  кГс и разработать эффективный оптический изолятор на длине волны 780 нм. В последние годы активно применяются оптические ячейки микронной и субмикронной толщины (последние называются также наноячейками — папоселл, NC). В работах [4–8] было показано, что при толщине NC  $L = \lambda/2$ , где  $\lambda$  — длина вол-

ны лазерного излучения, частота которого резонансна с частотой атомного перехода в спектре пропускания (поглощения) NC, происходит сужение спектра. Формирование внутридоплеровского резонанса в спектре пропускания происходит из-за того, что время взаимодействия излучения с атомами, пролетающими со скоростью  $v$  перпендикулярно лазерному пучку (для этих атомов доплеровский сдвиг отсутствует), равно  $\tau_1 = d/v$ , где  $d$  — диаметр лазерного пучка, в то время как время взаимодействия для атомов, пролетающих параллельно лазерному пучку, равно  $\tau_2 = L/v$ . В случае наноячеек  $d/L \sim 1000$ , поэтому  $\tau_1 \gg \tau_2$ . Важным обстоятельством является также влияние на спектр поглощения эффекта отражения излучения от плоскопараллельных окон NC, которая ведет себя как низкодобротный эталон Фабри–Перо [5]. Если на толщине NC укладывается целое число  $\lambda$ , то ширина атомной линии определяется доплеровским уширением. Если же на толщине NC укладывается полуцелое число  $\lambda$ , то формируется субдоплеровский резонанс [8]. Поведение

\* E-mail: sarmeno@mail.ru

резонансной флуоресценции сильно отличается от осцилляционного поведения поглощения в зависимости от  $L$ : при толщине  $NC\ L = \lambda/2$  спектральная ширина флуоресценции в 1.5 раза уже спектральной ширины поглощения, и с увеличением  $L$  спектральная ширина флуоресценции монотонно возрастает до доплеровской ширины при  $L \approx 5\lambda$ , при этом амплитуда возрастает почти линейно с ростом  $L$  [9]. В работе [7] было продемонстрировано, что на основе  $NC$  с толщиной столба паров атомов Rb, Cs или K порядка 400 нм возможно создание удобных маркеров для частот (МЧ) атомных переходов; однако при этом необходимо, чтобы Т-образная  $NC$  находилась в специальной печи с независимым нагревом отрезка-резервуара, заполненного соответствующим металлом, до температуры 110–140 °С (в зависимости от металла) и с независимым нагревом окон  $NC$  с температурой на 20 °С выше, чем на отрезке (буферный газ не добавлялся).

В настоящей работе использованы чувствительные фотоприемники. 1. Сигнал пропускания через  $NC$  измерялся с использованием самодельного чувствительного фотоприемника на основе PIN-фотодиода BPW34 с площадью сенсора 7.5 мм<sup>2</sup>. Использовался фотогальванический режим работы фотодиода, линейное преобразование фототока в напряжение осуществлялось с помощью однокаскадного трансимпедансного усилителя на основе микросхемы операционного усилителя. 2. Сигнал флуоресценции от  $NC$  регистрировался с помощью фотоприемника ФД-24 К с площадью сенсора 75 мм<sup>2</sup> с использованием операционного усилителя тока, интегральная токовая фоточувствительность составляла 0.2–0.3 мкА/(нВт/см<sup>2</sup>). Это позволило зарегистрировать спектры поглощения паров атомов Cs при температуре  $NC$  вблизи 30 °С, а спектры флуоресценции — при комнатной температуре ~ 20 °С. Уменьшение температуры приводит к уменьшению ширины остаточного доплеровского уширения, что позволяет формировать более узкий резонанс в спектре, таким образом давая возможность измерения уширения спектра, вызванного сильным лазерным полем. Показано, что спектры флуоресценции, формируемые при комнатной температуре, удобно использовать в качестве МЧ атомных переходов  $D_{1,2}$ -линий атома Cs. Проведено сравнение с характеристиками широко используемого МЧ атомных переходов на основе метода «насыщенного поглощения» (saturation absorption, SA) [10, 11]. Отсутствие печки для нагрева  $NC$  существенно уменьшает габариты устройства и упрощает его работу, что также важно для практических применений.

## 2. ЭКСПЕРИМЕНТ

### 2.1. Экспериментальная установка

Схема экспериментальной установки достаточно проста. Для регистрации спектров поглощения и флуоресценции атомных переходов используется  $NC$  с окнами из технического сапфира, фотография которой показана в верхнем левом углу рис. 1. Толщина столба паров Cs в направлении лазерного излучения составляла  $L = \lambda_1/2 = 426$  нм или  $L = \lambda_2/2 = 448$  нм, где  $\lambda_1 = 852$  нм и  $\lambda_2 = 895$  нм — резонансные длины волн  $D_{2-}$  и  $D_{1-}$  линий атома Cs. Эта область отмечена овалом на фотографии  $NC$  (область выбрана на краю  $NC$ , чтобы при регистрации флуоресценции приемник помещался максимально близко к зоне взаимодействия). Методика определения толщины  $NC$  приведена в работе [6]. Излучение 852 нм формировалось лазером «MOGLabs Cateye» и имело спектральную ширину ~ 100 кГц, частота сканировалась по переходам  $F_g = 3, 4 \rightarrow F_e = 2, 3, 4, 5$  линии  $D_2$ . Излучение 895 нм имело спектральную ширину ~ 1 МГц (лазер ECDL [12]), частота сканировалась по переходам  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 3, 4$  линии  $D_1$ . Часть излучения направлялась на узел 5 для формирования реперного спектра SA.

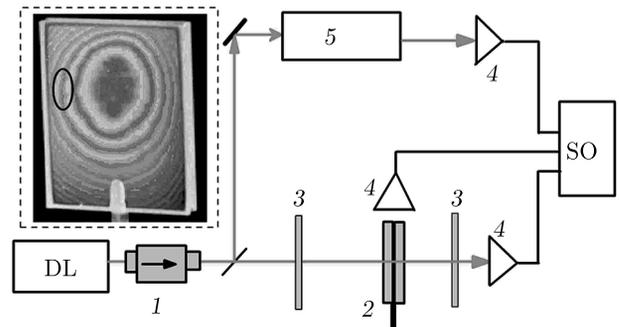


Рис. 1. Схема экспериментальной установки. DL — диодный лазер  $\lambda_1 = 852$  нм или  $\lambda_2 = 895$  нм (см. текст), 1 — фарадеевский изолятор, 2 —  $NC$ , заполненная Cs, 3 — нейтральные фильтры, 4 — фотоприемники, 5 — узел для формирования реперного спектра SA, SO — осциллограф Tektronix TDS2014B. На вставке — фотография  $NC$ , интерференционные полосы образуются при отражении света от внутренних поверхностей окон, изготовленных из технического сапфира; овалом отмечена область с толщинами  $L = \lambda_1/2 = 426$  нм и  $L = \lambda_2/2 = 448$  нм

2.2. Экспериментальные результаты

2.2.1. Исследование переходов  $D_1$ -линии

На рис. 2а приведены спектры пропускания NC толщиной  $L = \lambda_2/2 = 448$  нм на переходах  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 3,4$  линии  $D_1$  при разных температурах (в ряде случаев NC нагревалась, на рис. 1 печь не показана). Диаметр лазерного пучка 1 мм,  $P_L = 4$  мкВт. Красные кривые — результаты эксперимента, синие кривые — расчетные спектры (детали расчетных спектров приведены в разд. 3). С уменьшением температуры происходит уменьшение остаточного доплеровского уширения и сужение спектров пропускания, что позволяет, в частности, регистрировать полевое уширение, обусловленное лазерной интенсивностью. На вставке рис. 2а показаны спектры пропускания на переходе  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 3$  при температуре 65 °C в случаях мощности лазера 3 мВт и 8 мВт; полная ширина на полувысоте (ПШПВ) составляет 70 МГц и 130 МГц соответственно. Отметим важную особенность применения NC. Как показано в работе [13], лазерная интенсивность, необходимая для протекания эффектов насыщения (например, для эффекта оптической накачки (ОР — optical pumping) [11]), на три порядка выше, чем в обычной ячейке сантиметровой длины. Поэтому, несмотря на большую интенсивность  $\approx 800$  мВт/см<sup>2</sup>, пиковые пропускания (поглощения) при 3 мВт и 8 мВт практически одинаковы (в ячейке сантиметровой длины поглощение при 8 мВт было бы значительно меньше из-за эффекта ОР, что не позволило бы зарегистрировать столь заметное спектральное уширение).

Поскольку пиковое поглощение в NC при  $L \approx \approx 400$  нм мало, формула Бугера – Бера для пикового поглощения записывается просто [11]:

$$\alpha_P = \sigma N_{Cs} L, \tag{1}$$

где  $\sigma \sim 10^{-11}$  см<sup>2</sup> — поперечное сечение резонансного поглощения для атома Cs на переходе  $6S \rightarrow 6P$ ,  $N_{Cs}$  — плотность паров Cs (при 85 °C  $N_{Cs} = 5 \cdot 10^{12}$  см<sup>-3</sup> и  $\alpha_P \approx 2 \cdot 10^{-3}$ ). Снижение температуры приводит к уменьшению плотности паров, и при 50 °C  $N_{Cs} = 4 \cdot 10^{11}$  см<sup>-3</sup>, что соответствует  $\alpha_P \approx 1.6 \cdot 10^{-4}$ . На рис. 2б приведена зависимость ПШПВ спектров пропускания от плотности паров Cs при  $P_L = 4$  мкВт; видно, что уменьшение плотности приводит к уменьшению ПШПВ. Диаграмма уровней и переходов  $D_1$ -линии Cs с учетом сверхтонкого расщепления нижних и верхних уровней приведена на верхней вставке рис. 3 (отношение вероятностей переходов  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 3$  и

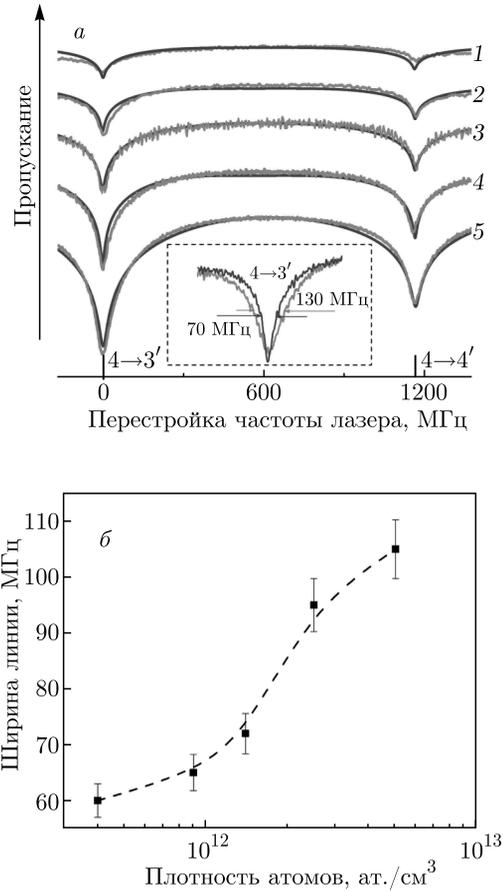
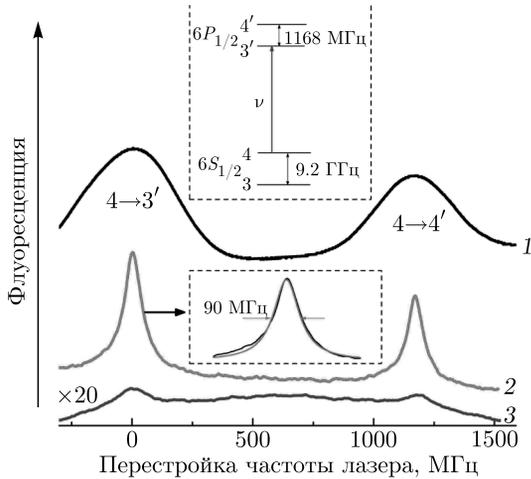


Рис. 2. (В цвете онлайн) а) Спектры пропускания NC  $L = 448$  нм на переходах  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 3,4$  линии  $D_1$  при температурах 50 °C (1), 58 °C (2), 65 °C (3), 75 °C (4), 85 °C (5) и  $P_L = 4$  мкВт; красные кривые — результаты эксперимента, синие кривые — расчетные спектры. На вставке — спектры пропускания на переходе  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 3$  при 65 °C в случае  $P_L = 3$  мВт (синяя кривая) и  $P_L = 8$  мВт (красная кривая). б) Зависимость ПШПВ переходов в спектре пропускания от плотности паров Cs  $N_{Cs}$  при  $P_L = 4$  мкВт; уменьшение  $N_{Cs}$  приводит к уменьшению ширины. При температуре 50 °C на отрезке NC температура на окнах 70 °C, доплеровская ширина 380 МГц, сужение спектра пропускания в 6.3 раза

$F_g = 4 \rightarrow F_e = 4$  составляет приблизительно 1.3). Кривая 1 на рис. 3 показывает спектр флуоресценции ячейки Cs длиной  $L = 3$  см с шириной линии 350 МГц. Кривая 2 — спектр флуоресценции NC на переходах  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 3,4$  при температуре 70 °C и  $P_L = 3$  мВт. Отношение амплитуд флуоресценции на переходах  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 3$  и  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 4$ , измеренных в эксперименте,  $A_{4 \rightarrow 3'}/A_{4 \rightarrow 4'} \approx 1.3$ , что указывает на отсутствие процесса ОР [11]. На нижней вставке приведен спектр флуоресценции на переходе  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 3$ , аппроксимированный ло-



**Рис. 3.** (В цвете онлайн) Кривая 1 — спектр флуоресценции Cs ячейки  $L = 3$  см, кривая 2 — спектр флуоресценции NC на переходах  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 3, 4$  при  $T = 70^\circ\text{C}$  и  $P_L = 3$  мВт, кривая 3 — спектр флуоресценции при  $T = 22^\circ\text{C}$ . Верхняя вставка — диаграмма переходов  $D_1$ -линии, нижняя вставка — спектр флуоресценции на переходе  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 3$ , аппроксимированный лоренцевским контуром с ПШПВ 90 МГц

ренцевским контуром (ПШПВ 90 МГц), который, как правило, описывает форму линии флуоресценции в NC. Кривая 3 — спектр флуоресценции при температуре  $20^\circ\text{C}$ . Отношение амплитуд при  $T = 70^\circ\text{C}$  и  $20^\circ\text{C}$

$$A_{4 \rightarrow 3', 70^\circ\text{C}} / A_{4 \rightarrow 3', 20^\circ\text{C}} \approx 60$$

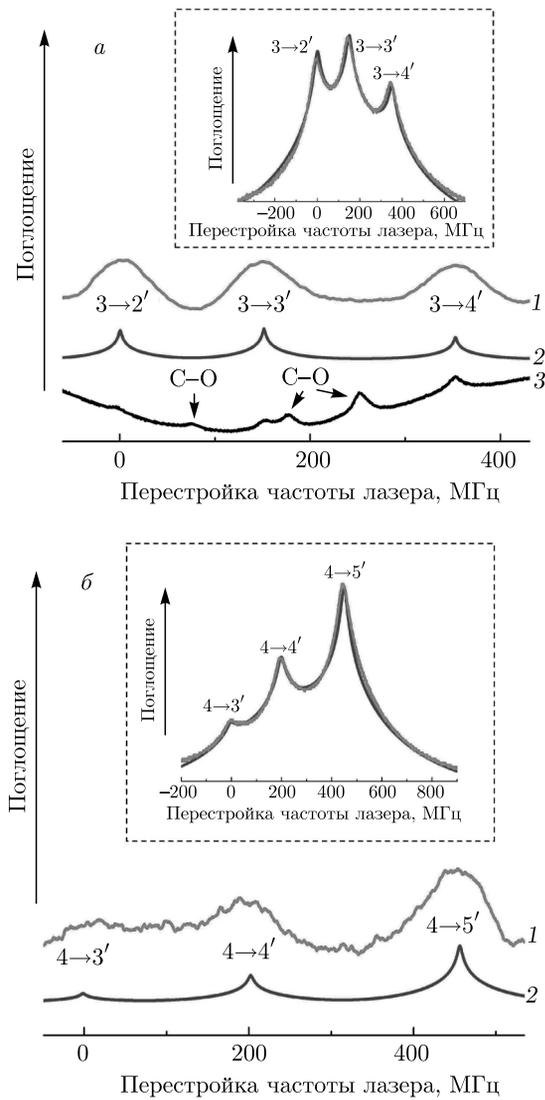
и определяется соотношением плотности паров  $N_{\text{Cs}}$  при этих температурах, указывая на то, что процесс ОР не протекает.

Важно отметить, что в работе [14] исследовалось низкочастотное крыло флуоресценции на переходе  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 3$   $D_1$ -линии Cs с «красным» смещением на  $-1.5$  ГГц с использованием NC с  $L = 150$  нм, нагретой до  $140^\circ\text{C}$ . Такое сильное смещение частоты обусловлено ван-дер-ваальсовым (ВВ) взаимодействием атомов Cs, находящихся на расстоянии приблизительно 11 нм от поверхности диэлектрического окна NC. Поскольку число таких «красных» фотонов очень мало, использовалась техника счета фотонов, и накопление результатов проводилось в течение 8 час. Зарегистрированный частотный ВВ-сдвиг является наибольшим известным в литературе для переходов между нижним и первым верхним возбужденным уровнями.

### 2.2.2. Исследование переходов $D_2$ -линии

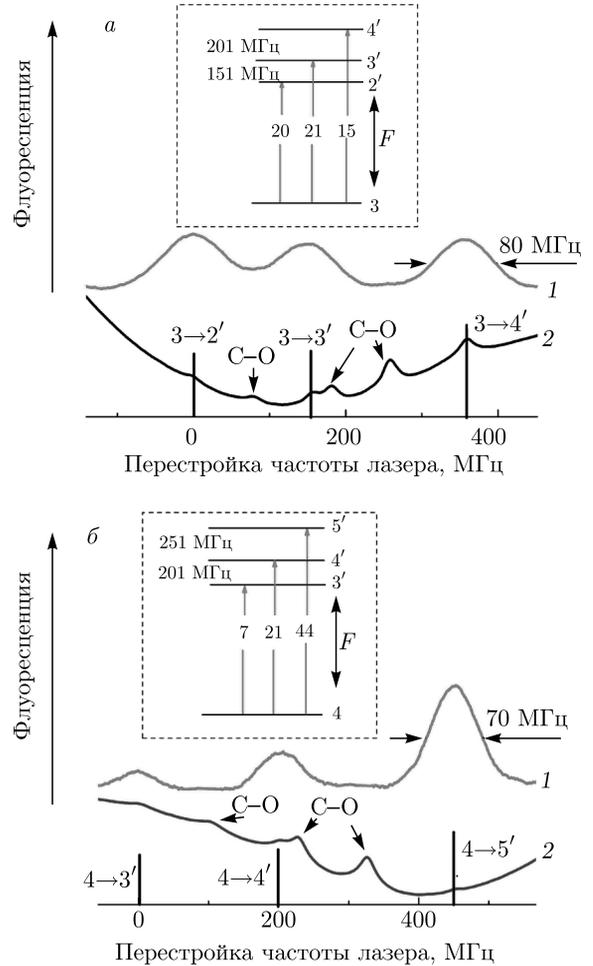
Использовался лазер «MOGLabs Cateye» на  $\lambda_1 = 852$  нм, со спектральной шириной линии около 100 кГц; лазерная частота сканировалась по переходам  $D_2$ -линии. Диаграммы сверхтонких уровней и переходов  $D_2$ -линии приведены на вставках рис. 5. Пучок лазера в поперечном сечении — эллипс с осями 3 мм и 2 мм (площадь приблизительно  $4.7 \text{ мм}^2$ ). В случае пропускания при  $L = \lambda_1/2 = 426$  нм уширение спектра относительно критично к изменению толщины, и допустимое отклонение от этой толщины составляет  $\pm 50$  нм. По этой причине для обеспечения однородной толщины по апертуре пучка использовалась диафрагма диаметром 1 мм. В случае же спектра флуоресценции изменение толщины  $L \approx 426$  нм на  $\pm 150$  нм приводит лишь к изменению уширения на 20% [15], и поскольку больший размер пучка обеспечивает большее количество атомов, участвующих во флуоресценции, пучок не диафрагмировался. На вставке рис. 4а показан спектр поглощения на атомных переходах  $F_g = 3 \rightarrow F_e = 2, 3, 4$  при  $T = 110^\circ\text{C}$  (красная кривая — результаты эксперимента, синяя кривая — расчетный спектр). Как видно, переходы частично перекрываются по частоте. Кривая 1 на рис. 4а показывает спектр поглощения NC с толщиной  $L \approx 426$  нм на тех же переходах при  $T = 35^\circ\text{C}$  и  $P_L = 0.5$  мВт. В этом случае все переходы полностью спектрально разрешены, а относительные вероятности переходов и частотные интервалы между переходами соответствуют величинам, приведенным на диаграмме вставки рис. 5а. Отметим, что из-за малого отношения сигнал-шум зарегистрированный спектр поглощения был усреднен, что привело к уширению и искажению профилей поглощения. Реальный спектр должен иметь вид расчетного, представленного кривой 2. Кривая 3 — реперный спектр SA.

Из диаграммы на вставке рис. 5а следует, что амплитуда перехода  $F_g = 3 \rightarrow F_e = 2$  должна быть в 1.3 раза больше амплитуды перехода  $F_g = 3 \rightarrow F_e = 4$ , в то время как на спектре SA она в 3 раза меньше. На вставке рис. 4б показан спектр поглощения на переходах  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 3, 4, 5$  при  $T = 110^\circ\text{C}$  (красная кривая — результаты эксперимента, синяя кривая — расчетный спектр). Видно частичное перекрытие переходов по частоте. Кривая 1 на рис. 4б показывает спектр поглощения NC при  $T = 35^\circ\text{C}$ . Все переходы спектрально полностью разрешены, а относительные вероятности переходов и частотные интервалы между переходами соответствуют величинам, приведенным на диаграм-



**Рис. 4.** (В цвете онлайн) *а*) Кривая 1 — спектр поглощения NC с толщиной  $L \approx 426$  нм на переходах  $F_g = 3 \rightarrow F_e = 2, 3, 4$ ,  $T = 35^\circ\text{C}$ , кривая 2 — расчетный спектр поглощения, кривая 3 — реперный спектр SA, C-O — crossover-резонансы. На вставке — спектр поглощения на переходах  $F_g = 3 \rightarrow F_e = 2, 3, 4$  при  $T = 110^\circ\text{C}$  (красная кривая — результаты эксперимента, синяя кривая — расчетный спектр). *б*) Кривая 1 — спектр поглощения на переходах  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 3, 4, 5$  при  $T = 35^\circ\text{C}$ , кривая 2 — расчетный спектр поглощения. На вставке — спектр поглощения на переходах  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 3, 4, 5$  при  $T = 110^\circ\text{C}$  (красная кривая — результаты эксперимента, синяя кривая — расчетный спектр)

ме вставки рис. 5б. И в этом случае усреднение зарегистрированного спектра из-за малого отношения сигнал-шум привело к уширению и искажению профиля поглощения, который соответствует расчетному спектру, показанному кривой 2.



**Рис. 5.** *а*) На вставке — частотные интервалы между переходами  $F_g = 3 \rightarrow F_e = 2, 3, 4$  и их относительные вероятности. Кривая 1 — спектр флуоресценции NC на переходах  $F_g = 3 \rightarrow F_e = 2, 3, 4$  при  $T = 22^\circ\text{C}$ , ПШПВ 80 МГц, кривая 2 — реперный спектр SA, C-O — crossover-резонансы. *б*) На вставке — частотные интервалы между переходами  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 3, 4, 5$  и их относительные вероятности. Кривая 1 — спектр флуоресценции NC на переходах  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 3, 4, 5$  при  $T \approx 22^\circ\text{C}$ , ПШПВ 70 МГц, кривая 2 — реперный спектр SA

На рис. 5а кривая 1 показывает спектр флуоресценции NC на переходах  $F_g = 3 \rightarrow F_e = 2, 3, 4$  при  $T = 22^\circ\text{C}$  и  $P_L = 14$  мВт (интенсивность  $\approx 300$  мВт/см<sup>2</sup>, что вызывает дополнительное уширение спектра, приводя к ПШПВ 80 МГц). Все переходы спектрально разрешены; относительные вероятности переходов, а также частотные интервалы между переходами практически соответствуют величинам, приведенным на диаграмме вставки к рис. 5а. Кривая 2 показывает реперный спектр SA. Частотные положения атомных переходов на кри-

вых 1 и 2 хорошо совпадают. Кривая 1 на рис. 5б показывает спектр флуоресценции NS на переходах  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 3, 4, 5$  при  $T = 22^\circ\text{C}$  и  $P_L = 7$  мВт (интенсивность  $\approx 150$  мВт/см<sup>2</sup>, что и в этом случае вызывает дополнительное уширение спектра, приводя к ПШПВ 70 МГц). Все переходы спектрально разрешены, относительные вероятности соответствуют величинам, указанным на диаграмме вставки к рис. 5б. Кривая 2 — реперный спектр SA, частотные положения атомных переходов на кривых 1 и 2 хорошо совпадают.

Согласно диаграмме на вставке рис. 5б, отношение амплитуд  $A_{4 \rightarrow 5'}/A_{4 \rightarrow 4'} \approx 2.1$ , из кривой 1 это отношение  $\approx 2.5$ , а из кривой SA —  $\approx 0.3$ . То же самое имеет место для другого перехода: согласно диаграмме, отношение  $A_{4 \rightarrow 5'}/A_{4 \rightarrow 3'} \approx 6.3$ , из кривой 1 это отношение  $\approx 5.7$ , а из кривой SA —  $\approx 0.5$ . Очевидно, что метод SA дает совершенно неверное соотношение амплитуд переходов, кроме того, на переход  $F_g = 4 \rightarrow F_e = 4$  накладывается соседний, больший по амплитуде С-О-резонанс, что несколько смещает его частотное положение и искажает амплитуду. Отмеченные выше недостатки накладывают ограничение на использование метода SA для формирования МЧ.

Отметим, что в работе [16] исследовался спектр флуоресценции тонкой ячейки Cs ( $L \approx 5$  мкм) на частотах переходов  $D_2$ -линии при температуре  $50^\circ\text{C}$  и интенсивности  $20$  мВт/см<sup>2</sup>. Вследствие эффекта оптической накачки в спектре формируются субдоплеровские пики уменьшенной флуоресценции, которые могут служить в качестве МЧ. Недостатком метода является то, что необходим нагреватель для ячейки, и то, что субдоплеровские пики расположены на доплеровски уширенном спектре флуоресценции, а это создает технические неудобства.

### 3. ОБСУЖДЕНИЕ

Использование NS при температурах, близких к комнатной, позволяет заметно уменьшить спектральную ширину регистрируемых атомных переходов (см. рис. 2б), благодаря чему становится возможным исследование уширения переходов в поле лазерного излучения (см. вставку на рис. 2а, где увеличение  $P_L$  от 3 мкВт до 8 мкВт вызывает рост уширения в спектре пропускания от 70 МГц до 130 МГц). Заметим, что при комнатной температуре температура на окнах NS несколько выше, поскольку непрерывный лазер мощностью в несколько мВт обеспечивает дополнительный нагрев окон

NS. В этом случае конденсации паров атомов на окнах NS никогда не наблюдается.

Отметим, что применение обычной ячейки сантиметровой длины для исследования полевого уширения сильно затруднено по двум причинам: а) доплеровская ширина атомного перехода щелочного металла находится в интервале 400–1000 МГц [11]; б) применение больших интенсивностей для получения больших полевых уширений 10–50 МГц приводит к эффективному протеканию нежелательного процесса ОР, который сильно искажает спектры пропускания и флуоресценции. В работе [10] для измерения небольших ( $< 5$  МГц) полевых уширений был использован метод SA, преимуществом которого является возможность формирования узких резонансов. Недостатком этого метода является несоответствие амплитуд резонансов вероятностям переходов. Использовались малые интенсивности и, по-видимому, это означает, что при применении SA для измерения величин полевых уширений есть ограничения на лазерную интенсивность.

Об измерениях больших полевых уширений с использованием хорошо отколлимированного атомного пучка с малой величиной остаточного доплеровского уширения сообщается в работе [17]. Технически формирование такого атомного пучка непросто, поскольку требуется металлическая камера длиной в несколько метров со сверхвысоким вакуумом. В той же работе приведена простая формула для оценки величины спектрального уширения:

$$\gamma_\nu = \gamma_N(I_D + 1), \quad (2)$$

где  $I_D = I_L / (6 \text{ мВт/см}^2)$ ,  $\gamma_\nu = 12\gamma_N$ , где  $\gamma_N = 4.6$  МГц — радиационная ширина  $D_1$ -линии, что приводит к  $\gamma_\nu \approx 55$  МГц. Остаточное доплеровское уширение составляет 70 МГц (уширением, вызванным интенсивностью  $0.4$  мВт/см<sup>2</sup>, можно пренебречь), поэтому полевое уширение, обусловленное интенсивностью  $\approx 800$  мВт/см<sup>2</sup>, составляет 60 МГц, что с точностью около 10% описывается формулой (2).

Следовательно, для измерения больших полевых уширений целесообразно использование спектров пропускания NS, заполненной парами атомов металла с толщиной  $L = \lambda/2$ .

Теоретические спектры пропускания (поглощения), приведенные в настоящей работе, рассчитывались численным интегрированием системы уравнений для элементов матрицы плотности с последующим усреднением по ансамблю распределения атомных скоростей, которое предполагается максвелловским [18]. Теоретическая модель представ-

лена в работах [5, 19, 20]. В модели используются следующие допущения: плотность атомов предполагается малой, так что межатомными столкновениями можно пренебречь; столкновения атомов со стенками NC носят неупругий характер, т. е. атомы после столкновений полностью теряют оптическое возбуждение. Тепловая скорость атомов Cs  $v_T = 200$  м/с, доплеровская ширина 350 МГц. Интенсивность лазерного излучения мала (частота Раби  $\Omega/2\pi \approx 0.05$  МГц), так что эффектом оптической накачки можно пренебречь, радиационная ширина  $\gamma_N \approx 4.6$  и  $5.2$  МГц соответственно для  $D_1$ - и  $D_2$ -линии [11]. В расчетах учитывается также влияние на спектр поглощения эффекта отражения излучения от взаимно параллельных внутренних поверхностей окон NC, что проявляется в образовании интерференционной картины на фотографии NC, приведенной на вставке рис. 1; поэтому NC ведет себя как низкодобротный эталон Фабри – Перо, что учитывается в расчетах [5, 21]. Свободным параметром при сравнении с результатами эксперимента являлась остаточная доплеровская ширина.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе показано, что уменьшение температуры NC обуславливает уменьшение остаточной доплеровской ширины в спектрах поглощения и флуоресценции. Это важно для практических применений, в частности, для измерения больших полевых уширений, где применение ячеек сантиметровой длины нецелесообразно. Продемонстрирована возможность регистрации субдоплеровской флуоресценции NC с  $L \approx 400$  нм при  $T \approx 20^\circ\text{C}$ , что позволяет создать маркер частот переходов  $D_{1,2}$ -линий Cs при комнатной температуре. Показаны преимущества маркера частот на основе NC по сравнению с широко используемым маркером на основе техники SA.

Следует отметить, что нами также был исследован спектр флуоресценции паров атомов Rb, заключенных в NC с толщиной  $L \approx 400$  нм. Минимальная температура, при которой удается зарегистрировать флуоресценцию NC, составляла  $40^\circ\text{C}$ , что соответствует плотности атомов Rb  $\approx 3 \cdot 10^{10}$  см $^{-3}$ . Заметим, что такая же по величине плотность в случае паров Cs получается при  $20^\circ\text{C}$ . Изготовление NC диаметром  $\varnothing = 20$  мм и толщиной  $L \approx 400$  нм (для этого на поверхность одного из окон NC по периметру осаждаются сапфировые площадки толщиной 400 нм, после чего проводится склейка окон

NC) позволит увеличить количество атомов, участвующих во флуоресценции, почти на два порядка, и при той же мощности накачки и диаметре лазерного пучка 20 мм существенно уменьшится интенсивность лазерного излучения, что приведет к более узкому спектру флуоресценции. Поскольку речь идет о комнатных температурах, могут быть использованы также недавно разработанные стеклянные NC [22, 23] (как известно, при  $T > 150^\circ\text{C}$  горячие пары щелочных металлов взаимодействуют со стеклом).

Отсутствие печки для нагрева NC приводит к уменьшению габаритов устройства, что важно, к примеру, для исследования влияния магнитных полей на атомные переходы, поскольку в этом случае сильный постоянный магнит может быть помещен непосредственно вблизи NC. Вследствие малой толщины столба паров атомов  $L \approx 400$  нм, формируемое магнитное поле  $B \approx 4$  кГс можно считать практически однородным даже при использовании одного магнита (вблизи поверхности магнита градиент составляет 150 Гс/мм). Такая величина  $B$  достаточна для регистрации эффекта Папена – Бака на сверхтонкой структуре атома [1].

#### ЛИТЕРАТУРА

1. A. Sargsyan, G. Nakhumyan, C. Leroy, Y. Pashayan-Leroy, A. Papoyan, and D. Sarkisyan, *Opt. Lett.* **37**, 1379 (2012).
2. J. Kitching, *Appl. Phys. Rev.* **5**, 031302 (2018).
3. L. Weller, K. Kleinbach, M. Zentile, S. Knappe, I. G. Hughes, and C. S. Adams, *Opt. Lett.* **37**, 3405 (2012).
4. T. A. Vartanyan and D. L. Lin, *Phys. Rev. A* **51**, 1959 (1995).
5. G. Dutier, A. Yarovitski, S. Saltiel, A. Papoyan, D. Sarkisyan, D. Bloch, and M. Ducloy, *Europhys. Lett.* **63**, 35 (2003).
6. А. Саргсян, А. Амирян, С. Карталева, Д. Саркисян, *ЖЭТФ* **152**, 54 (2017).
7. A. Sargsyan, A. Amiryanyan, Y. Pashayan-Leroy, C. Leroy, A. Papoyan, and D. Sarkisyan, *Opt. Lett.* **44**, 5533 (2019).
8. А. Саргсян, А. Амирян, Д. Саркисян, *ЖЭТФ* **158**, 241 (2020).
9. D. Sarkisyan, T. Varzhapetyan, A. Sarkisyan, Yu. Malakyan, A. Papoyan, A. Lezama, D. Bloch, and M. Ducloy, *Phys. Rev. A* **69**, 065802 (2004).

10. A. M. Akulshin, V. A. Sautenkov, V. L. Velichansky, A. S. Zibrov, and M. V. Zverkov, *Opt. Commun.* **77**, 295 (1990).
11. W. Demtröder, *Laser Spectroscopy: Basic Concepts and Instrumentation*, Springer (2004).
12. V. V. Vassiliev, A. S. Zibrov, and V. L. Velichansky, *Rev. Sci. Instrum.* **77**, 013102 (2006).
13. C. Andreeva, S. Cartaleva, L. Petrov, S. M. Saltiel, D. Sarkisyan, T. Varzhapetyan, D. Bloch, and M. Ducloy, *Phys. Rev. A* **76**, 013837 (2007).
14. K. A. Whittaker, J. Keaveney, I. G. Hughes, A. Sargsyan, D. Sarkisyan, and C. S. Adams, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 253201 (2014).
15. S. Cartaleva, S. Saltiel, A. Sargsyan D. Sarkisyan, D. Slavov, P. Todorov, and K. Vaseva, *J. Opt. Soc. Amer. B* **26**, 1999 (2009).
16. P. Todorov, D. Slavov, K. Vaseva, M. Taslakov, S. Cartaleva, and S. Saltiel, *Phys. Scripta* **2012**, 014014 (2012).
17. M. K. Citron, H. R. Gray, C. W. Gabel, and C. R. Stroud, Jr., *Phys. Rev. A* **16**, 1507 (1977).
18. P. Todorov and D. Bloch, *J. Chem. Phys.* **147**, 194202 (2017).
19. G. Dutier, S. Saltiel, D. Bloch, and M. Ducloy, *J. Opt. Soc. Amer. B* **20**, 793 (2003).
20. Г. Никогосян, Д. Саркисян, Ю. Малакян, *Оптич. ж.* **71**, 45 (2004).
21. A. Sargsyan, Y. Pashayan-Leroy, C. Leroy, and D. Sarkisyan, *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **49**, 075001 (2016).
22. T. Peyrot, C. Beurthe, S. Coumar, M. Roullia, K. Perronet, P. Bonnay, C. S. Adams, A. Browaeys, and Y. R. P. Sortais, *Opt. Lett.* **44**, 1940 (2019).
23. 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).

# NON-TRIVIAL DYNAMIC REGIMES OF SMALL (NANO-SCALE) QUANTUM SYSTEMS

V. A. Bendetskii<sup>a</sup>, E. I. Kats<sup>b\*</sup>

<sup>a</sup> *Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences  
142432, Chernogolovka, Moscow Region, Russia*

<sup>b</sup> *Landau Institute for Theoretical Physics, Russian Academy of Sciences  
142432, Chernogolovka, Moscow Region, Russia*

Received May 18, 2021,

revised version May 24, 2021.

Accepted for publication May 24, 2021

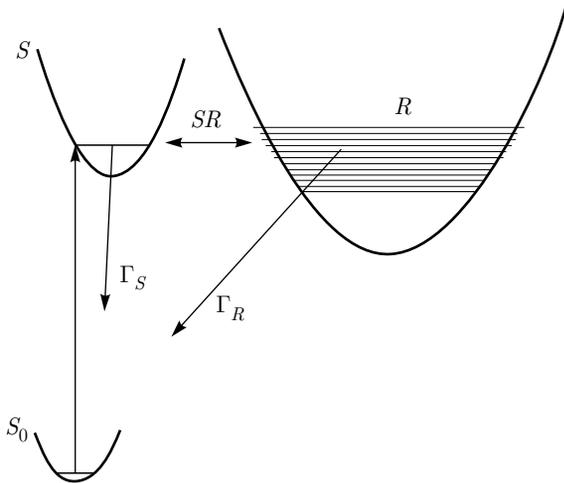
DOI: 10.31857/S0044451021100059

**Abstract.** Small (but still containing many, about  $10^2$ – $10^4$ , atoms) quantum systems (traditionally termed nano-systems) are dramatically different from their macroscopic or genuine microscopic (atomic) cousins. Microscopic molecular systems (with a few atoms) obey a regular quantum dynamics (described by time dependent Schrödinger equation), whereas in macroscopic systems with continuous energy spectra, one can expect regular dynamic behavior. The topic of our paper is in-between these limits. Nano-scale systems are characterized by small (but finite) mean interlevel spacing. In such a case with recurrence periods in picosecond range, Loschmidt echo and double resonance phenomena come into the game. System behavior becomes non-trivial and manifests a sort of transitions between regular and chaotic dynamics. We show that such dynamic transitions occur when the Loschmidt echo lifetime exceeds the typical recurrence cycle period. We illustrate this behavior in the framework of a few versions of the exactly solvable quantum problem, proposed long ago by Zwanzig [1]. It is based on the study of time evolution of the initially prepared vibrational state coupled to a reservoir with a dense spectrum of its vibrational states. In the simplest version of the Zwanzig model, the reservoir has an equidistant spectrum, and the system reservoir coupling matrix elements are independent of the reservoir states. We generalize the model to include into consideration the coupling of the initially prepared single state to system phonon excitations. The coupling re-

sults in the temperature dependent broadening and decay of the echo components. Another generalization is to replace a single level by two states coupled to the Zwanzig reservoir. We anticipate that the basic ideas inspiring our work can be applied to a large variety of interesting for the applications nano-systems (e. g., dissipative free propagation of excitations along molecular chains, or as a model for exchange reactions).

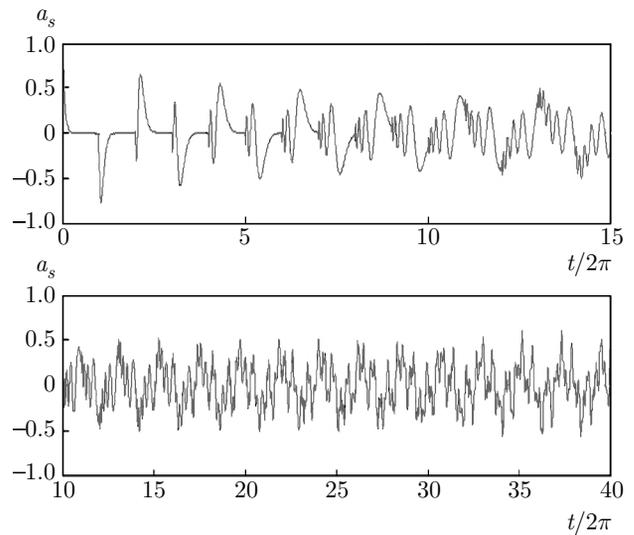
**Introduction.** There are materials which do not exhibit unusual properties in the nano-scale regime. For example, simple non-polar hydrocarbon molecules when aggregated are added merely additively. In other systems, that are under investigation in this work, the properties may exhibit anomalous values (or behavior of a system is unusual) in the nano-regime. Common wisdom borrowed from textbooks on quantum mechanics teaches that a population of somehow initially prepared state of a macroscopic system monotonically decreases in time due to the energy flow from this initial state into the states of the reservoir (formed by all continuous states of the macroscopic system under consideration). In the opposite limit (a small system with a few degrees of freedom), system behavior is also well known. The system dynamics is reduced to the recurrence cycles, with their periods (according to the famous Poincare theorem) determined by the lowest rationally independent interlevel spacings. As it is often the case, an intermediate case (relatively large but not macroscopically large quantum system) is the most difficult one for theoretical analysis. However, just such systems (generically termed as nano-systems) containing about several hundreds of atoms become more and more attractive for various applications.

\* E-mail: efim.i.kats@gmail.com

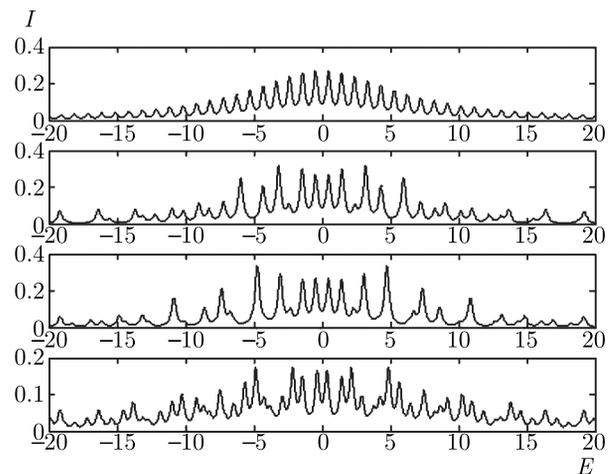


**Fig. 1.** Scheme of radiationless transitions  $\{R_n\} \leftarrow S$  accompanying by the optical transition  $S \leftarrow S_0$  from the ground to initial state. Direct optical transitions  $\{R_n\} \leftarrow S_0$  are forbidden.  $S$  is the state obtained by the optical pumping from the ground state  $S_0$ ,  $\{R_n\}$  are the final (reservoir) states, and  $\Gamma_S$  and  $\Gamma_R$  are decay rates for the corresponding states

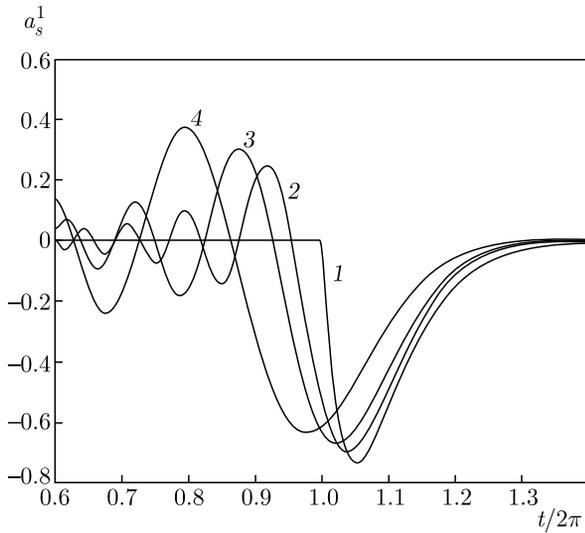
Our intent in this work is to investigate dynamic behavior of these intermediate nano-size quantum systems. In principle, the full information about the system (both dynamics and statics) is naturally contained in quantum mechanical solution of the corresponding Schrödinger equation. In practice, however, the quantum solution is unfeasible even for not too large (about  $10^2$ – $10^4$  atoms) systems. Therefore, one has to rely either on heavy *ab initio* numeric, or to look for analytically doable approximations. Luckily for us, many years ago Robert Zwanzig in a remarkable work (although published not in a regular and easy accessible journal [1]) proposed a simple (but not trivial) exactly solvable model of quantum dynamics. Within this model, an initially prepared single state of a quantum system evenly couples to the dense but discrete spectrum of the reservoir levels. Within the Zwanzig model, the coupling strength is assumed to be a constant independent of the reservoir levels. Surprisingly enough that in spite of this evidently erroneous assumption, Zwanzig approximation correctly identifies the dynamic regimes and characteristic time scales in the problem. Thus, although the Zwanzig model is a toy model (in the sense of caricaturing some physical features), when properly interpreted it can yield quite reasonable values for a variety of essential (and principally measured) quantities. That such a simple theory can predict rather complex and subtle features for nano-size quantum systems is remarkable.



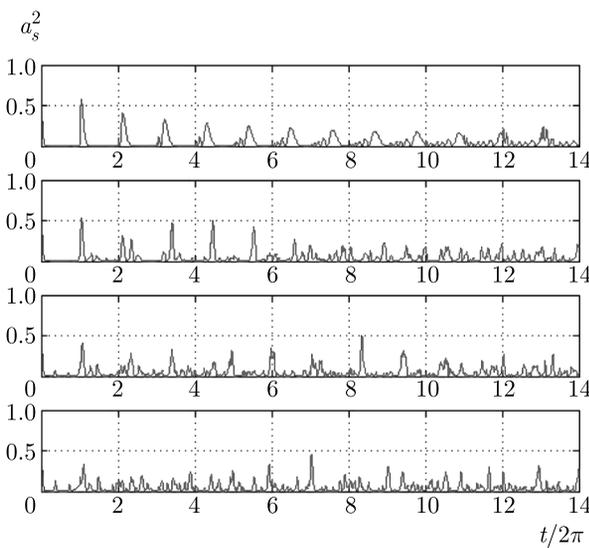
**Fig. 2.** The initial state evolution for the bare Zwanzig model:  $a_s$  is the amplitude of the optically excited state,  $C$  is the  $SR$  coupling constant,  $C^2 = 1$ ,  $\gamma_s$  and  $\gamma_n$  are the widths of the corresponding energy levels (in the figure, the both  $\gamma = 0$ ). Time is measured in the inverse interlevel spacing of the reservoir states. The upper panel shows the initial cycles with the regular dynamics. The lower panel demonstrates chaotic-like long-time dynamics in the case of the overlapping recurrence cycles



**Fig. 3.** Crossover from the regular to quasi-random spectrum of the mixed  $RS$  states upon the mixing deformation.  $I(E)$  is the spectral density, and energy  $E$  is measured in the units of the interlevel spacing;  $K$  is sublattices spectra regular splitting,  $K = 3$  in the computations;  $\delta_1$  and  $\delta_2$  are parameters which determine the additional (with respect to regular) sublattices splittings:  $\delta_1 = 0, 0.1, 0.4, 0.7$  (from the top to the bottom), and  $\delta_2 = 2\delta_1$ ;  $C^2 = 0.1$



**Fig. 4.** Backward evolution of the initial state amplitude  $a_s^1$  for the cycle  $k = 1$ . The reservoir possesses the increasing interlevel spacings.  $C^2 = 1$ . The model parameters describing the spectrum deformations are  $b = 0$  and  $a = 0, 0.15, 0.25, 0.35$  (curves 1–4, respectively)



**Fig. 5.** Time evolution of the initial state coupled to reservoir with spectral mixing for the cycle  $k = 1$ :  $C^2 = 1$ ,  $K = 3$ ,  $\delta_2 = 2\delta_1$ ,  $\delta_1 = 0, 0.019, 0.049, 0.079$ ,  $a = 0, 0.15, 0.25, 0.5$  (from the top to the bottom), and  $b = 0$

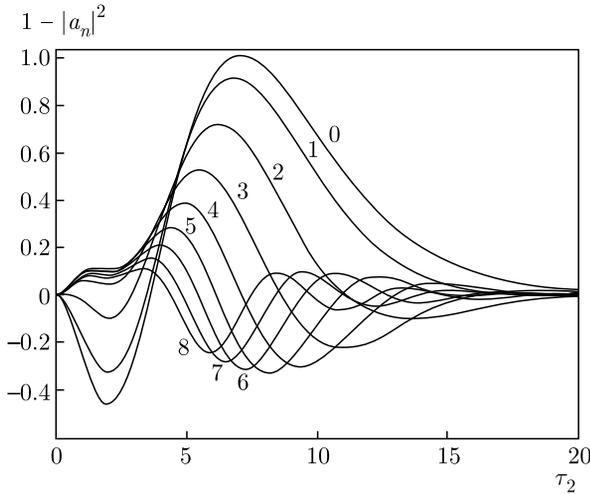
Here we compile a brief self-contained review that we wish had existed when we first entered the field [2]. In what follows in the frame work of generalized Zwanzig approach, we study a number of nano-size quantum systems. Since our work is primary about physics (and only then how it can be modeled theoretically), it is worth to note first what are physical sys-

tems we have in mind. Our topic is nano-size quantum objects, possessing discrete vibrational energy spectra. Such objects are carbon nano-tubes, graphene flaks, metallic clusters, some large organic molecules or their clusters. Typical feature (relevant for everything what follows in the paper) of such systems is that their vibrational spectra are discrete and characteristic interlevel spacing  $\bar{\Delta}$  is on the order of  $0.1\text{--}10\text{ cm}^{-1}$ . This value of  $\bar{\Delta}$  is translated into the picosecond time scale for the periods of the recurrence cycles

$$T = \frac{2\pi}{c\bar{\Delta}} \simeq 10^{-10}\text{--}10^{-12}\text{ s},$$

where  $c$  is the light speed. In turn, experimental studies of the excited state evolution in large (nano-size) molecular systems [3–8] have established that the processes of vibrational relaxation, energy transfer, and ultra-fast chemical reactions occur in the same picosecond time range as recurrence cycles. Therefore, the recurrence cycles are essential ingredients to be included to describe theoretically such features of the quantum dynamics of nano-systems as irreversibility, chaotic behavior and loss-free distant energy transfer. These and some other high-resolution experiments (which will be cited and shortly discussed in our paper) demonstrate that a system initial vibrational state evolution, as a rule, has a complicated form with irregular oscillations. The methods of double resonances in the non-linear femtosecond spectroscopy [9–12] appear to be especially useful to observe these irregular oscillations of the initial and final state populations simultaneously. The phenomenon has been observed for the wide variety of large-size molecules in liquid and solid solutions and on interfaces [13–18]. Note to the point that irregular oscillations of the population of initially prepared excited state have been confirmed by the numerous quantum dynamical calculations [19–23].

The loss-free excitation energy transfer, observed in linear molecules consisting of 12–26  $\text{CH}_2$  fragments [20, 21], also belongs to a similar class of irregular in time behavior. In such kind of experiments, the initial excitation of the molecular terminal group produces the running wave with approximately constant speed (about of 2 ps per one fragment). Even more surprising is that instead of naively expected random distribution of the excitation energy over the total set of intra-molecular modes, the wave propagation lasts during several passages along the chain before the uniform distribution is established. The distant energy transfer occurs between localized vibrations of fragments separated by about 1 nm distance during 20–40 ps whereas the lifetime of these vibration excitations themselves

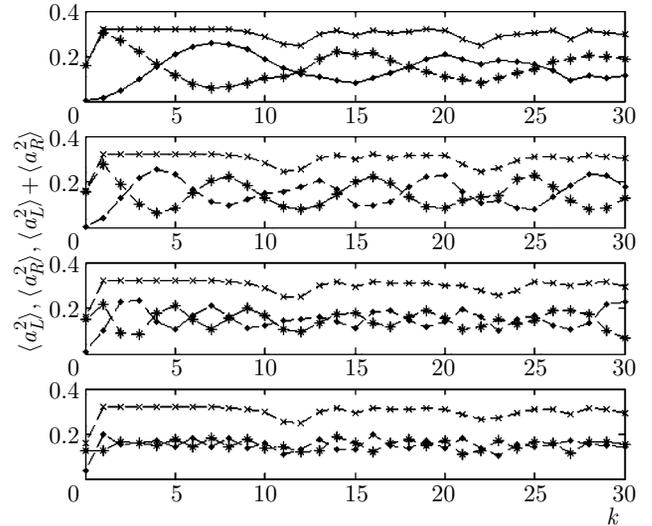


**Fig. 6.** Redistribution of the initial-state population over the mixed reservoir states with the amplitudes  $a_n$  during the second recurrence cycle  $k = 2$  with duration  $\tau_2$ . The numbers of the reservoir states are shown near the curves

does not exceed 3 ps. The matter is that the excitation energy transfer includes intermediate excitations of delocalized long-lived vibrations binding the initial and final fragments [22–25].

These data permit to suggest that the irregular evolution is the generic property of the systems with dense discrete spectra. Therefore, the role of the reservoir with a discrete spectrum is fundamentally different from that with a continuous spectrum typical for macroscopic systems. In the latter case (with the infinite recurrence period time), the reservoir serves as a sink for energy flow. Contrary in the case of the discrete spectrum, repetitive reverse transitions from the reservoir to the initial state and in the opposite direction determine the non-trivial and often irregular long-time dynamics. The synchronization of these reverse transitions results in the appearance of a multi-component Loschmidt echo phenomenon with a partial recovery of the initial state population (at the frequency corresponding to the initial excited state energy), and double resonances (at the frequencies of the reservoir states). Both effects are responsible for non-monotonic time evolution. The counterpart of such behavior is the periodic energy concentration in one of the vibration mode, arising as a result of the time-dependent exchange between reservoir states far from equilibrium.

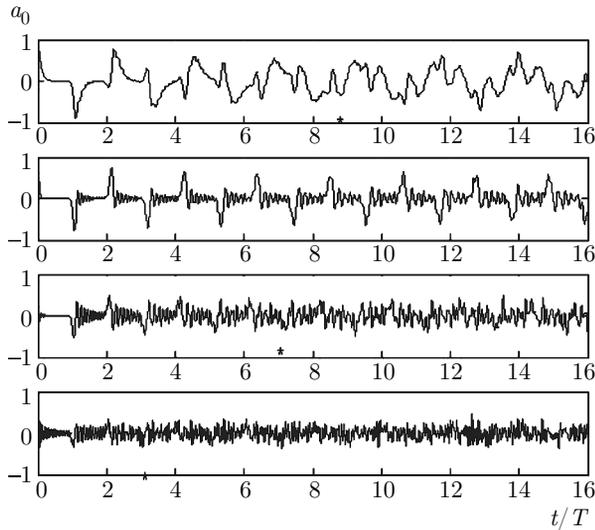
In a few of previous works of our group [2, 26–32], we illustrated how such complex behavior might appear in the frame work of the simple Zwanzig model, and how the simplest version of the model can be generalized to relax some unphysical assumptions of the



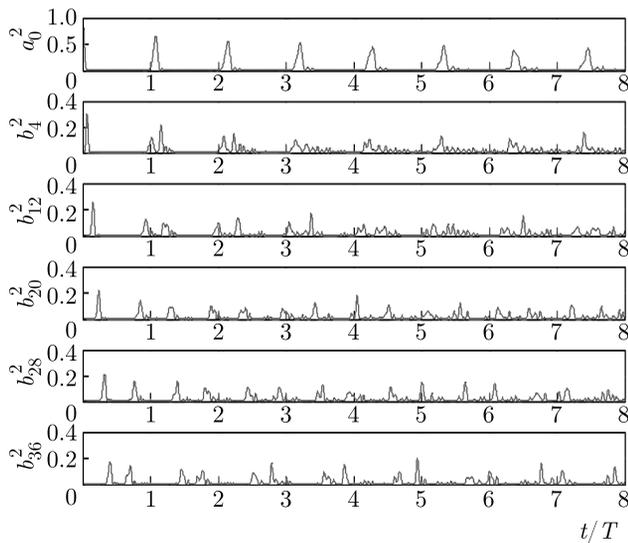
**Fig. 7.** Variation of the average per cycle populations of  $L_0$  ( $\blacklozenge$ ) and  $R_0$  ( $*$ ) states and the entire population of the two-level systems ( $\times$ ) in the recurrence cycles versus the cycle number  $k$ :  $C^2 = 1$  and the two-level splitting  $\Delta = 0.4, 1.2, 2.7, 7.4$  (from the top to the bottom)

model. In these works, we also proposed a method which makes it possible to solve the dynamical problem analytically beyond the bare Zwanzig model approximations [27–32]. The main ingredient of our new method (only schematically and briefly described in the previous papers) is the representation of the partial amplitudes of recurrence cycles. Unlike the standard Fourier expansion over eigen-frequencies, this representation reveals explicitly the time dependent exchange between intramolecular states in each recurrence cycle. The fine structure of the Loschmidt echo arises as a result of the dephasing phenomena associated with the fact that the exchange of the different reservoir states with the initial state occurs not at the same instants of time. The synchronization of the reverse transitions is destroyed when the Loschmidt echo components of the different recurrence cycles start to overlap. The cycle overlapping determines the critical recurrence cycle number. Then at larger time (cycle numbers), the system dynamics is expected to be in the stochastic-like regime.

Since that time, we have realized that the quantum dynamics of nano-size systems is much richer than that predicted for the systems with continuous spectra, and that non-monotonous in time and irregular dynamics is a robust and generic feature of almost arbitrary quantum system with  $10^2$ – $10^4$  degrees of freedom. Moreover, the regular-stochastic dynamic transition (crossover) yields to a loss of the expected one-to-



**Fig. 8.** Dynamics of the population at the excited impurity site located in the middle of the finite  $N = 49$  size chain:  $a_0$  is the amplitude of the initially excited site;  $C^2 = 0.1, 0.25, 0.5, 0.95$  from the top to the bottom; the critical cycle number  $k_c$  is marked by the a star ( $k_c = 23$  for  $C^2 = 0.5$ );  $T$  is the recurrence cycle period



**Fig. 9.** Impurity site excitation propagated along the chain.  $C^2 = 0.5, N = 49$ . The site numbers are indicated on the panels as the subscripts of corresponding values along the vertical axes

one correspondence between system spectrum and its long-time dynamics. For all our examples, the spectrum remains deterministic, while long-time dynamics eventually becomes stochastic. This unusual combination is the specific feature of nano-systems.

Motivated by this new understanding, we decided to combine altogether our previous works to illustrate

our method on a number of particular physical realizations (only partially overlapping with those in the previous works). The aim to present this review arises from the conviction that unifying our previous works supplemented by the new applications of the developed theoretical approach and by new experimental data and observations collected in very recent year, yield to a new stage of development of this field: dynamics of nano-systems.

Our manuscript is divided into 7 sections. After this Introduction, in Sec. 2 of the full text of this paper, we summarize shortly the results on quantum dynamics of the bare Zwanzig model. A possible physical realization most closely satisfying the model assumptions is also discussed. Section 2 contains also an extended list of references to compensate partially its brevity. Then, in Sec. 3 utilizing developed in our works [27–32] theoretical approach, we investigate with all details the evolution of the population of the initially prepared single state of the system. In Sec. 4, we analyze various physically motivated generalizations of the bare Zwanzig model and how our analytical method should be modified to describe theoretically these generalizations. In the same section, we show that on the similar footing we can study dynamics not only for an individual (single) nano-system but as well for the ensemble of somehow distributed nano-systems. We investigate the reservoir states evolution in Sec. 5. We collect some already discussed in literature and new applications of our approach to physically interesting phenomena in nano-systems, namely, two-level systems coupled to reservoir, propagation of vibrational excitations in nano-size chains (Sec. 6). The last Sec. 7 summarizes the main findings of our work, with a discussion of possible physical consequences and interpretation of the results.

The results from the list of Refs. [1–69] are used or/and discussed in our work.

The figures illustrated our results are presented below.

**Conclusion.** Understanding all limitations of our simplified exactly solvable models, nevertheless we hope that the results collected in this review capture the essential peculiarities in nano-system dynamics. Namely, the dense discrete spectra characteristic for nano-particles and large-size molecules are responsible for appearance of recurrence cycles. By contrast to macroscopic systems with the continuous spectra, where the initial state population decreases monotonically in time, the Loschmidt echo and double resonances arise in each recurrence cycle. The revivals

in the time evolution makes it possible the emergence of new mechanisms of vibration stimulated processes in single nano-particles and their ensembles as well. The regular behavior in the initial recurrence cycles transformed into chaotic-like long-time evolution is an inherent characteristic of nano-world. The combination of the deterministic spectra with chaotic-like long-time dynamics has no analogs in the quantum dynamics of the macroscopic dissipative systems. Owing to specific mechanisms of energy transfer and redistribution within the manifold of intramolecular modes, the loss-free and distant energy transfer becomes possible. The unique property of nano-systems is the possibility for periodical accumulation of the energy on the selected vibrational modes. The new fields for experimental studies and applications of this unusual effect are opened.

*The full text of this paper is published in the English version of JETP.*

## REFERENCES

1. R. Zwanzig, *Lect. Theor. Phys.* **3**, 106 (1960).
2. V. A. Bendetskii, L. A. Falkovsky, and E. I. Kats, *JETP Lett.* **86**, 221 (2007).
3. T. User and W. H. Miller, *Phys. Rep.* **199**, 7 (1991).
4. *Time-resolved Vibrational Spectroscopy*, ed. by S. Takahashi, Springer, Berlin (1992).
5. A. H. Zewail, *Femtochemistry: Ultrafast Dynamics of Chemical Bonds*, World Sci., Singapore (1994).
6. M. D. Feyer, *Ultrafast Infrared and Raman Spectroscopy*, Marcel Dekker, New York (2001).
7. A. H. Zewail, *Phil. Trans. Roy. Soc. London A* **364**, 315 (2005).
8. D. M. Leitner, *Adv. Chem. Phys. B* **130**, 205 (2005).
9. S. Mukamel, *Principles of Nonlinear Spectroscopy*, Oxford Univ. Press, New York (1995).
10. R. M. Hochstrasser, *PNAS* **104**, 14190 (2007).
11. J. Bredenbeck, A. Chosh, M. Smith, and M. Bohn, *J. Amer. Chem. Soc.* **130**, 2152 (2008).
12. J. B. Ashbury, T. Steinel, C. Stromberg, S. A. Orrell, C. P. Skinner, and M. D. Feyer, *J. Phys. Chem. A* **108**, 1107 (2004).
13. C. J. Fesko, J. D. Eaves, J. J. Loparo, A. Tokmakoff, and P. L. Geissler, *Science* **301**, 1698 (2003).
14. M. Khalil, N. Demirdoven, and A. Tokmakoff, *J. Chem. Phys.* **121**, 362 (2004).
15. A. V. Bendetskii and K. B. Eisenthal, *J. Phys. Chem. A* **106**, 7482 (2002).
16. M. L. Cowan, B. D. Bruner, N. Huse, J. R. Dwyer, E. T. J. Nibbering, T. Elsaesser, and R. J. D. Miller, *Nature* **434**, 199 (2005).
17. F. Gai, K. C. Hanson, J. C. McDonald, and P. A. Anfinrud, *Science* **279**, 1886 (1998).
18. S. Sportlein, H. Cartens, H. Satzger, C. Renner, R. Behrendt, L. Moroder, P. Tavan, W. Zinth, and J. Wachveitl, *PNAS* **99**, 7998 (2002).
19. D. M. Leitner and P. G. Wolynes, *J. Phys. Chem. A* **101**, 541 (1997).
20. M. Ben-Nun, F. Molnar, H. Lu, J. C. Phillips, T. J. Martinez, and K. Schulten, *Farad. Discuss.* **110**, 447 (1998).
21. G. K. Paramonov, H. Naundorf, and O. Kuhn, *Eur. Phys. J. D* **14**, 205 (2001).
22. S. Hayashi, E. Tajkhorshid, and K. Schulten, *Biophys. J.* **85**, 1440 (2003).
23. H. Fujisaki, Y. Zhang, and J. E. Straub, *J. Chem. Phys.* **124**, 144910 (2006).
24. Z. Wang, J. A. Carter, A. Laguche, Y. K. Koh, N.-H. Seong, D. C. Cahil, and D. D. Klott, *Science* **317**, 787 (2007).
25. J. A. Carter, Z. Wang, and D. D. Klott, *Acc. Chem. Res.* **42**, 1343 (2009).
26. V. A. Bendetskii, L. N. Gak, and E. I. Kats, *JETP* **108**, 159 (2009).
27. V. A. Bendetskii, L. N. Gak, and E. I. Kats, *JETP* **109**, 505 (2009).
28. V. A. Bendetskii and E. I. Kats, *JETP Lett* **88**, 338 (2008).
29. V. A. Bendetskii and E. I. Kats, *Eur. Phys. J. D* **54**, 597 (2009).
30. V. A. Bendetskii and E. I. Kats, *JETP Lett.* **92**, 370 (2010).
31. V. A. Bendetskii and E. I. Kats, *JETP* **113**, 562 (2011).
32. V. A. Bendetskii and E. I. Kats, *JETP Lett.* **94**, 459 (2011).

33. R. D. Mattuck, *A Guide to Feynmann Diagrams in Many-Body Problem*, McGraw-Hill, New York (1976).
34. G. M. Zaslavsky, *Chaos in Dynamical Systems*, Harwood, New York (1985).
35. M. Tabor, *Chaos and Integrability in Nonlinear Dynamics*, J. Wiley, New York (1989).
36. M. E. Flatte and M. Holthaus, *Ann. Phys.* **245**, 113 (1996).
37. F. M. Izrailev, *Phys. Rep.* **196**, 299 (1990).
38. W. H. Zurek, *Phys. Rev. D* **26**, 1862 (1982).
39. P. Grigolini, *Quantum Mechanical Irreversibility*, World Sci., Singapore (1993).
40. Ya. G. Sinai, *Introductrion to Ergodic Theory*, Princeton Univ. Press, Guilford (1977).
41. M. V. Berry, *Chaotic Behavior in Deterministic Systems*, ed. by G. Cassati, Plenum Press, New York (1985).
42. F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos*, Springer, Berlin (1990).
43. C. Keating, B. A. McClure, J. J. Rack, and I. V. Rubtsov, *J. Chem. Phys.* **133**, 144513 (2010).
44. H. Kuzmany, B. Burger, A. Thess, and R. E. Smalley, *Carbon* **36**, 709 (1998).
45. V. Schettino, H. Prigolini, and G. Cardini, *J. Phys. Chem. A* **106**, 1815 (2002).
46. S. Adhikari and R. Chowdhury, *Phys. Lett. A* **375**, 2166 (2011).
47. T. Ishioka, W. Yan, H. L. Strauss, and R. G. Snyder, *Spectrochem. Acta A* **59**, 671 (2003).
48. L. Van Hove, *Physica* **21**, 517 (1955).
49. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics*, Pt. 1, Pergamon, Oxford (1977).
50. L. H. Yu and C. P. Sun, *Phys. Rev. A* **49**, 592 (1994).
51. M. L. Mehta, *Random Matrices*, Acad. Press, New York (1968).
52. O. Bohigas, S. Tomsovic, and D. Ulmo, *Phys. Rep.* **223**, 43 (1993).
53. T. Papenbrock and H. A. Weidenmuller, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 997 (2007).
54. W. Dietz and S. F. Fischer, *J. Chem. Phys.* **113**, 2741 (2000).
55. D. V. Kurochkin, S. R. G. Naraharisetty, and I. V. Rubtsov, *PNAS* **104**, 14209 (2007).
56. S. G. Naraharisetty, V. M. Kysanenko, and I. V. Rubtsov, *J. Chem. Phys.* **128**, 104502 (2008).
57. I. V. Rubtsov, *Acc. Chem. Res.* **42**, 1385 (2009).
58. Z. Smedarchina, W. Siebrand, and M. Z. Zgierski, *J. Chem. Phys.* **103**, 5326 (1995).
59. V. A. Benderskii, A. V. Vetoshkin, L. von Laue, and H. P. Trommsdorff, *Chem. Phys.* **219**, 119 (1997).
60. V. A. Benderskii, V. A. Vetoshkin, and H. P. Trommsdorff, *Chem. Phys.* **234**, 173 (1998); **244**, 273 (1999); **262**, 393 (2000).
61. G. V. Milnikov and H. Nakamura, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10**, 1374 (2008).
62. A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, A. Garg, and M. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 1 (1987).
63. V. A. Benderskii, D. E. Makarov, and C. A. Wight, *Chemical Dynamics at Low Temperatures*, J. Wiley, New York (1994).
64. A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Ann. Phys.* **149**, 374 (1983).
65. A. I. Larkin and Yu. N. Ovchinnikov, *JETP* **58**, 876 (1983); **59**, 420 (1984); **60**, 1060 (1984).
66. B. I. Ivlev and Yu. N. Ovchinnikov, *JETP* **66**, 378 (1987).
67. L. H. Yu, *Phys. Rev. A* **54**, 3779 (1996).
68. H. Bateman and A. Erdelyi, *Higher Transcendental Functions*, McGraw Hill, New York (1953).
69. F. W. J. Olver, *Asymptotics and Special Functions*, Acad. Press, New York (1974).

# ПРОЦЕССЫ ВТОРОГО ПОРЯДКА В ИЗЛУЧЕНИИ АНСАМБЛЯ КВАНТОВЫХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

*А. М. Башаров*<sup>a,b\*</sup>, *А. И. Трубилко*<sup>c\*\*</sup>

<sup>a</sup> *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»  
123182, Москва, Россия*

<sup>b</sup> *Московский физико-технический институт (технический университет)  
141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

<sup>c</sup> *Санкт-Петербургский университет ГПС МЧС России  
196105, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 16 июня 2021 г.,  
после переработки 16 июня 2021 г.  
Принята к публикации 21 июня 2021 г.

Показано, что в локальном подходе к открытым осцилляторным системам, в случае наличия у ансамбля одинаковых квантовых осцилляторов общего бозонного термостата, коллективное излучение ансамбля осцилляторов демонстрирует признаки невинеровской динамики. Интенсивность излучения достаточно большого числа  $N_c$  осцилляторов ансамбля уменьшается с ростом  $N_c$  и периодически оказывается полностью подавленной процессами второго порядка по константе связи осцилляторов с общим термостатным полем.

DOI: 10.31857/S0044451021100060

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Под квантовым осциллятором мы понимаем одномодовое электромагнитное поле в высокодобротном (микро)резонаторе и/или его описание, причем о самом таком микрорезонаторе говорим как о квантовом осцилляторе. Например, можно говорить об эффективном квантовом осцилляторе резонатора с движущимся зеркалом [1]. Излучение и накачка квантового осциллятора есть взаимодействие электромагнитного поля (микро)резонатора с вакуумным электромагнитным полем и/или с когерентным полем на границе микрорезонатора или на зеркале. С общетеоретической точки зрения, одномодовый микрорезонатор и  $N$ -уровневая квантовая частица являются двумя основными объектами квантовой оптики, о которых и говорят соответственно как о квантовом осцилляторе и атомном осцилляторе [2]. Часто вообще рассматривают осцилля-

торную модель квантовой частицы [3] или предел слабого возбуждения квантовой частицы, в котором атомный осциллятор математически описывается так же, как и квантовый осциллятор.

Эти основные квантовые объекты участвуют в сходных процессах — рассматривают когерентные процессы, процессы возбуждения и релаксации, коллективные процессы в ансамблях, процессы запутывания квантовых состояний. Все указанные процессы, в зависимости от типа осцилляторов, имеют свои четкие отличия и особенности, определяемые алгеброй операторов, описывающих осцилляторы. Есть различия и в реализации ансамбля осцилляторов того или иного типа. Если атомные осцилляторы — просто примесные квантовые частицы, частицы в газообразном состоянии, то представить реализацию ансамбля квантовых осцилляторов аналогично ансамблю одинаковых квантовых частиц несколько сложнее. Ансамбль одинаковых атомов (квантовых частиц) взаимодействует с общим электромагнитным полем. Чтобы такое реализовать в виде ансамбля квантовых осцилляторов и считать их взаимодействующими с одним и тем же вакуумным электромагнитным полем и/или когерентным полем, необходимо рассматривать различные искус-

\* E-mail: basharov@gmail.com

\*\* E-mail: trubilko.andrey@gmail.com

ственные среды, например, пучок световодов, соединенных с одним общим световодом; направленные ответвители; квантовые точки в диэлектрической среде и иные искусственные объекты. Взаимодействие ансамбля осцилляторов с единым возбуждением можно также реализовать в резонаторах с общим движущимся зеркалом и рассматривать различные оптомеханические системы. Изучение ансамбля одинаковых квантовых осцилляторов востребовано в задачах построения многокубитного квантового процессора.

В настоящее время ведутся интенсивные исследования различных систем квантовых осцилляторов [4–12]. Мы не будем в дальнейшем говорить о конкретной реализации ансамбля одинаковых квантовых осцилляторов, а обсудим эффекты, родственные обнаруженным авторами эффектам в случае ансамбля атомных осцилляторов. Речь, в первую очередь, пойдет об эффекте, аналогичном эффекту стабилизации возбужденных состояний локализованного атомного ансамбля одинаковых атомов по отношению к коллективному распаду. С точки зрения математического описания подобных эффектов, в статье выводится релаксационный оператор, входящий в стандартное кинетическое уравнение, получаемое в марковском приближении. При этом мы не обсуждаем случай ангармонизма у квантового осциллятора (с точки зрения математического описания коллективного распада, здесь релаксационный оператор неизменен), и все рассматриваемые квантовые осцилляторы считаются гармоническими.

Заметим, что задачи о взаимодействии квантового осциллятора с широкополосным вакуумным электромагнитным полем, иначе релаксация или распад возбужденных состояний осциллятора, всегда рассматривают в приближении вращающейся волны, отбрасывая антивращающиеся слагаемые. Самое простое представление о вращающихся и антивращающихся слагаемых дает алгебраическая теория возмущений [13–15]. В представлении взаимодействия оператор взаимодействия открытой системы с окружением и/или с элементами самой открытой системы всегда содержит два типа слагаемых. Одни из них являются медленно меняющимися функциями по сравнению с величинами типа  $\exp(\pm i\Omega t)$ , где  $\Omega$  — характерная частота открытой системы. Такие слагаемые удобно называть вращающимися слагаемыми (геометрическую интерпретацию см. в [16]). Другие слагаемые называют антивращающимися слагаемыми. Такое разделение слагаемых в операторе взаимодействия сохранится и в представлении Шредингера, од-

нако не всегда это разделение можно просто и наглядно провести.

Обычно антивращающиеся слагаемые просто отбрасывают, говоря о приближении вращающейся волны. При этом выделенный квантовый осциллятор и представляет собой открытую систему, которая на границе (зеркале в случае резонатора) взаимодействует с окружением. Рассматривая осциллятор как открытую систему, важно считать все константы взаимодействия осциллятора малыми. Еще в работе [17] было обнаружено, что именно в приближении вращающейся волны получают корректные кинетические уравнения для описания распада квантового осциллятора. Однако до сих пор открыт вопрос о корректном учете антивращающихся слагаемых в кинетическом уравнении для квантового гармонического осциллятора. Решение этого вопроса позволит также записывать кинетические уравнения, учитывающие антивращающиеся слагаемые, и для ангармонического осциллятора, и для других осцилляторных моделей [4–12, 18–20].

Подчеркнем, что с математической точки зрения, квантовые осцилляторы, взаимодействующие между собой и/или с окружением, описываются квадратичным гамильтонианом по бозонным операторам (в случае бозонного окружения), который может быть диагонализирован в рамках глобального подхода к открытым системам [21, 22], например, при помощи преобразования Боголюбова. В результате можно получить весьма общие, но громоздкие формулы, и проблемой будет являться их анализ, так что для рассматриваемого в данной статье случая результатов, следующих из глобального подхода, пока нет. Однако требование малости констант взаимодействия позволяет в анализе осцилляторных систем прибегнуть к локальному подходу, который проще и нагляднее глобального подхода подчеркивает общность локального подхода к анализу различных по природе квантовых открытых систем и позволяет увидеть новые именно физические закономерности, которые, быть может, и содержатся в общих формулах глобального подхода, но о которых на данный момент пока ничего не известно.

Когда мы говорим об общности локального подхода к теории открытых квантовых систем, мы имеем в виду следующее. Оптические открытые квантовые системы обладают такой принципиальной особенностью, что оператор их взаимодействия с окружением всегда содержит вращающиеся и антивращающиеся слагаемые. В работах [13–15] развита алгебраическая теория возмущений применительно к за-

дачам учета антивращающих слагаемых, а в работах [23–29] показано, как алгебраическая теория возмущений сочетается с техникой квантовых стохастических дифференциальных уравнений для получения эффективного гамильтониана задачи и кинетического уравнения. Более того, в работах [24, 27] доказана необходимость использования эффективного гамильтониана (вместо полного гамильтониана) открытой системы и ее окружения в оптических задачах для возможности описания окружения открытой системы белым шумом. Однако в случае локального подхода авторам до сих пор не известен способ корректного учета антивращающих слагаемых в релаксации осцилляторных моделей открытых квантовых систем. Авторы продемонстрировали наглядность и эффективность локального подхода на основе алгебраической теории возмущений в выделении интерференционных слагаемых в задачах о возбуждении и распаде изолированных (нерезонансно связанных с другими) осцилляторов [25, 26, 28, 29], которые еще не выделены из общих решений глобального подхода.

В ряде работ рассматривалось коллективное излучение ансамбля квантовых осцилляторов в приближении вращающейся волны. Для сравнения со случаем атомных осцилляторов напомним известное обстоятельство в модели Дике — отсутствие постоянного дипольного момента как всей атомной системы, так и каждого излучателя. Импульс коллективного излучения возникает с задержкой во времени. Возможный всплеск и импульс коллективного излучения осцилляторов, которые ассоциированы в рамках классической электродинамики излучателями, следует ожидать только в моменты времени, отвечающие образованию системы сфазированных осцилляторов. Такое оказывается возможным, только в изначально пусть даже слабых, но нелинейных системах [30, 31]. Для случая системы линейных квантовых осцилляторов увеличение интенсивности оказывается возможным только при условии изначально сфазированных осцилляторов, при этом максимум интенсивности сверхизлучательного импульса наблюдается только в начальный момент времени излучения и никакой задержки импульса не возникает. Динамика как ансамбля атомов модели Дике, так и ансамбля квантовых осцилляторов описывается единым квантовомеханическим уравнением для матрицы плотности  $\rho^S$  системы, называемой открытой, с релаксационным оператором  $\hat{\Gamma}\rho^S(t)$  одного и того же вида ( $\rho^S(t)$  — матрица плотности открытой системы в представлении взаимодействия, на что указывает явное написание аргумента времени):

$$\begin{aligned} \frac{d\rho^S(t)}{dt} - \frac{i}{\hbar} [\rho^S(t), H^S] &= -\hat{\Gamma}\rho^S(t), \\ \hat{\Gamma}\rho^S(t) &= -\frac{i}{\hbar} [\rho^S(t), H^{L-S}] + \\ &+ \chi \left( \frac{1}{2} L_+ L_- \rho^S(t) + \frac{1}{2} \rho^S(t) L_+ L_- - L_- \rho^S(t) L_+ \right). \end{aligned} \quad (1)$$

Различия релаксационных операторов определяются алгеброй операторов Линдблада  $L_{\pm}$ , входящих в уравнение (1). В винеровском [24] описании динамики ансамбля под операторами  $L_{\pm}$  следует понимать коллективные повышающий и понижающий операторы  $R_{\pm}$  всей системы, отвечающие коммутационным соотношениям операторов углового момента. Динамика излучения коллектива осцилляторов описывается коллективными операторами рождения и уничтожения. Оператор  $H^{L-S}$  определяет сдвиги энергии уровней открытой системы, обусловленные релаксационными переходами. В подавляющем большинстве работ оператор  $H^{L-S}$  кладется равным нулю, поскольку авторы не выходят за рамки винеровской динамики. Эффективный гамильтониан открытой системы  $H^S$  введен для учета других возможных взаимодействий. Однако надо помнить, что любые новые взаимодействия, как правило, порождают и новые интерференционные каналы релаксации [24], и весь вопрос состоит только в том, насколько они значимы для данной задачи.

Мы показали, что коллективное излучение ансамбля квантовых осцилляторов, рассматриваемых как открытая система, может быть полностью подавлено в модельном случае, когда все осцилляторы взаимодействуют с общим вакуумным электромагнитным полем, а число самих осцилляторов в ансамбле достаточно велико. Подавление возникает в результате учета антивращающих слагаемых, которые проявляются в алгебраической теории возмущений в виде слагаемых эффективного гамильтониана, квадратичных по параметру связи осциллятора с общим квантованным электромагнитным вакуумным полем. В уравнении (1) это отражается в появлении у операторов  $L_{\pm}$  невинеровского множителя, осциллирующего с изменением числа осцилляторов. Кроме того, коллективные релаксационные переходы определяют специфический частотный сдвиг осцилляторов  $H^{L-S} \neq 0$ , величина которого сосчитана.

## 2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ЭФФЕКТИВНЫЙ ГАМИЛЬТониАН

Пусть имеется ансамбль независимых друг от друга одинаковых квантовых осцилляторов часто-

ты  $\Omega_c$  в количестве  $N_c$ . Эти осцилляторы взаимодействуют с общим вакуумным квантованным электромагнитным полем нулевой плотности фотонов, так что вся система описывается уравнением Шредингера с гамильтонианом  $H$ :

$$i\hbar \frac{d|\Psi\rangle}{dt} = H|\Psi\rangle, \quad (2)$$

$$H = \sum_{i=1}^{N_c} \hbar\Omega_c c_i^\dagger c_i + \int \hbar\omega b_\omega^\dagger b_\omega d\omega + \gamma_c \sum_i \int (c_i + c_i^\dagger)(b_\omega + b_\omega^\dagger) d\omega.$$

Здесь  $|\Psi\rangle$  — вектор состояний ансамбля осцилляторов и окружающего поля,  $c_i^\dagger$  и  $c_i$  — операторы рождения и уничтожения квантов  $i$ -го осциллятора с коммутационными соотношениями  $[c_i, c_j^\dagger] = \delta_{i,j}$ ,  $[c_i, c_j] = 0$ ,  $b_\omega^\dagger$  и  $b_\omega$  — операторы рождения и уничтожения квантов вакуумного квантованного электромагнитного поля с коммутационными соотношениями  $[b_\omega, b_{\omega'}^\dagger] = \delta(\omega - \omega')$ ,  $\gamma_c$  — константа связи квантового осциллятора с вакуумным полем.

С точки зрения терминологии квантовой теории открытых систем, ансамбль независимых друг от друга одинаковых квантовых осцилляторов представляет собой открытую систему, если константы связи  $\gamma_c$  малы, а общее вакуумное квантованное электромагнитное поле является окружением открытой системы. Уравнение Шредингера и гамильтониан (2) записаны в представлении Шредингера, однако в дальнейшем при выводе кинетического уравнения удобно преобразование проводить в представлении Дирака [24].

Наша задача — вывести кинетическое уравнение для ансамбля осцилляторов. Его вид в марковском приближении — общий вид Линдблада (1) кинетического уравнения открытых систем. В локальном подходе для вывода кинетического уравнения необходимо сначала получить эффективный гамильтониан задачи, не содержащий в представлении взаимодействия быстро меняющихся во времени слагаемых, иначе приближение белого шума для вакуумного поля окажется некорректным [17]. Самый простой и универсальный способ получения эффективного гамильтониана — алгебраическая теория возмущений, основанная на унитарном преобразовании вектора состояния  $|\Psi\rangle$  и гамильтониана  $H$ :

$$|\tilde{\Psi}(t)\rangle = \hat{T}(t)|\Psi(t)\rangle, \quad \hat{T}(t) = e^{iS(t)}, \quad S^\dagger(t) = S(t).$$

С точки зрения описания открытой системы и ее окружения, унитарное преобразование ничего не ме-

няет, только уравнение Шредингера для преобразованного вектора состояний  $|\tilde{\Psi}(t)\rangle$  определяется преобразованным гамильтонианом  $\tilde{H}(t)$ :

$$i\hbar \frac{d|\tilde{\Psi}(t)\rangle}{dt} = \tilde{H}(t)|\tilde{\Psi}(t)\rangle, \quad (3)$$

$$\tilde{H}(t) = \hat{T}(t)V(t)\hat{T}^\dagger(t) - i\hbar\hat{T}(t)\frac{d}{dt}\hat{T}^\dagger(t),$$

где  $V(t)$  — оператор взаимодействия в представлении взаимодействия.

Алгебраическая теория возмущений строится на разложении генератора унитарного преобразования  $S(t)$  и генератора сдвига системы во времени  $\tilde{H}(t)$  в ряд по константе связи  $\gamma_c$ . При этом используются формула Бейкера — Кемпбелла — Хаусдорфа и условие отсутствия быстро меняющихся во времени слагаемых по сравнению с  $\exp(\pm i\Omega_c t)$ . Это процедура неоднократно проделывалась в работах авторов [1, 24–29] поэтому приводим результаты:

$$S^{(1)}(t) = \gamma_c \sum_j \int_{\omega \notin (-\Omega_c)} \frac{c_j b_\omega \exp[i(\omega + \Omega_c)t] d\omega}{i\hbar(\omega + \Omega_c)} + \gamma_c \sum_j \int_{\omega \notin (\Omega_c)} \frac{c_j^\dagger b_\omega \exp[-i(\omega - \Omega_c)t] d\omega}{i\hbar(\omega - \Omega_c)}, \quad (4)$$

$$\tilde{H}^{(1)}(t) = \gamma_c \sum_j \int_{\omega \in (\Omega_c)} (c_j b_\omega^\dagger \exp[-i(\Omega_c - \omega)t] + c_j^\dagger b_\omega \exp[i(\Omega_c - \omega)t]) d\omega,$$

$$\tilde{H}^{(2)}(t) = -\gamma_c^2 \sum_{j=1}^{N_c} c_j^\dagger c_j \int_{\omega \notin (-\Omega_c)} \frac{d\omega}{\hbar(\omega + \Omega_c)} - \gamma_c^2 N_c \left( \int_{\omega, \omega' \in (\Omega_c)} \frac{b_\omega^\dagger b_{\omega'} \exp[i(\omega - \omega')t] d\omega d\omega'}{2\hbar(\omega + \Omega_c)} + \int_{\omega, \omega' \in (\Omega_c)} \frac{b_{\omega'}^\dagger b_\omega \exp[i(\omega' - \omega)t] d\omega' d\omega}{2\hbar(\omega + \Omega_c)} \right). \quad (5)$$

Здесь через  $(\Omega_c)$  обозначена частотная область спектра частот окружения открытой системы вблизи центральной частоты  $\omega = \Omega_c$ . Для частот  $\omega$  из этой области экспоненты  $\exp[\pm i(\omega - \Omega_c)t]$  являются медленно меняющимися функциями времени по сравнению с  $\exp(\pm i\Omega_c t)$ . Ширина области  $(\Omega_c)$  определяется скоростью затухания фотонов в микрорезонаторе в случае, когда открытая система состоит из одного квантового осциллятора. Мы распространили область суммирования по частотам непрерывного спектра окружения, положив  $b_{-\omega} = b_\omega^\dagger$ ,  $\omega > 0$ , но

при этом исключили из области интегрирования билинейных по операторам  $b_{\omega}^{\dagger}, b_{\omega'}$  слагаемых все другие области, согласно общему анализу [24].

Выписанные слагаемые представляют собой первый и второй порядки разложения генераторов по константе связи. Эффективный гамильтониан с точностью до первого порядка по константе связи есть

$$H^{eff}(t) = \tilde{H}^{(1)}(t),$$

и именно он используется в теориях взаимодействия вакуумного электромагнитного поля с квантовыми осцилляторами. Алгебраическая теория возмущений накладывает жесткие ограничения на формально введенное приближение вращающейся волны, состоящие в требовании суммирования по частотам в формуле (4) только по области  $(\Omega_c)$ . Выход за рамки таких ограничений приводит в ряде задач к «парадоксам» типа нарушения второго начала термодинамики [32].

Эффективный гамильтониан с точностью до второго порядка по константе связи есть

$$H^{eff}(t) = \tilde{H}^{(1)}(t) + \tilde{H}^{(2)}(t). \quad (6)$$

В представленном виде эффективный гамильтониан с точностью до второго порядка алгебраической теории возмущений ранее не рассматривался. В задачах, в которых фигурируют две константы взаимодействия, например, «изолированный» микрорезонатор, нерезонансно связанный с микрорезонатором, мода которого затухает вследствие потерь на зеркалах, слагаемые второго порядка алгебраической теории возмущений описывали интерференционный канал релаксации и накачки «изолированного» осциллятора [28, 29]. Учет слагаемого (6) и его роль в динамике ансамбля одинаковых квантовых осцилляторов обсудим ниже.

### 3. КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ АНСАМБЛЯ ОДИНАКОВЫХ КВАНТОВЫХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

Пусть преобразованный вектор состояния ансамбля одинаковых квантовых осцилляторов и его окружения в начальный момент времени факторизован:

$$|\tilde{\Psi}_0\rangle = |\Phi_0\rangle \otimes |\Xi_0\rangle.$$

Здесь  $|\Phi_0\rangle$  — начальный вектор состояния ансамбля квантовых осцилляторов,  $|\Xi_0\rangle$  — начальный вектор состояния вакуумного квантованного электромаг-

нитного поля. Вакуумное поле, как обычно, дельта-коррелированное поле, т. е.

$$\begin{aligned} \langle \Xi_0 | b_{\omega} | \Xi_0 \rangle &= \langle \Xi_0 | b_{\omega}^{\dagger} | \Xi_0 \rangle = \langle \Xi_0 | b_{\omega}^{\dagger} b_{\omega'} | \Xi_0 \rangle = 0, \\ \langle \Xi_0 | b_{\omega} b_{\omega'}^{\dagger} | \Xi_0 \rangle &= \delta_{\omega\omega'}, \end{aligned} \quad (7)$$

и с нулевой плотностью квантов.

При условиях (7), независимости константы связи  $\gamma_c$  от частот (в (2) мы ее сразу вынесли за знак интеграла) и дополнительном предположении о следующем виде слагаемого (5) эффективного гамильтониана:

$$\begin{aligned} \tilde{H}^{(2)}(t) &= -\gamma_c^2 N_c \times \\ &\times \int_{\omega, \omega' \in (\Omega_c)} \frac{b_{\omega}^{\dagger} b_{\omega'} \exp[i(\omega - \omega')t] d\omega d\omega'}{2\hbar\Omega_c}, \end{aligned} \quad (8)$$

уравнение Шредингера (3) с  $\tilde{H}(t) = H^{eff}(t)$  становится математически неопределенным [33, 34]. Его принято доопределять, вводя стохастические интегралы Ито в формальном решении уравнения Шредингера, выраженном через оператор эволюции  $U(t, t_0)$  и  $T$ -экспоненту:

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= I + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t H^{eff}(t') dt' + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \times \\ &\times \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} H^{eff}(t') H^{eff}(t'') dt' dt'' + \dots = \\ &= \overleftarrow{T} \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H^{eff}(t') dt' \right), \end{aligned}$$

$$|\tilde{\Psi}(t)\rangle = U(t, t_0) |\tilde{\Psi}_0\rangle.$$

В условиях (7) и (8) естественно ввести следующие операторы квантовых уничтожающего  $B(t)$ , рождающего  $B^+(t)$  и считывающего  $\Lambda(t)$  процессов [35–37]:

$$dB(t) = B(t+dt) - B(t), \quad B(t) = \int_0^t b(t') dt', \quad (9)$$

$$b(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \exp[-i(\omega - \Omega_c)t] b_{\omega},$$

и

$$\Lambda(t) = \int_0^t dt' b^{\dagger}(t') b(t'), \quad (10)$$

$$d\Lambda(t) = \Lambda(t+dt) - \Lambda(t).$$

Физическое обоснование замен пределов интегрирования см. в [33, 34, 37]. Под дифференциалом понимается дифференциал в смысле Ито [33–37]. В выражениях (9), (10) и ниже считаем время и частоты безразмерными, пока не будет оговорено о возврате к размерному времени.

Дифференциалы (9) и (10) удовлетворяют следующей алгебре Хадсона – Парцасарати:

$$\begin{aligned} d\Lambda(t) d\Lambda(t) &= d\Lambda(t), & dB(t) dB^+(t) &= dt, \\ d\Lambda(t) dB^+(t) &= dB^+(t), & dB(t) d\Lambda(t) &= dB(t), \\ d\Lambda(t) dB(t) &= d\Lambda(t) dt = dB^+(t) d\Lambda(t) = \\ &= dB^+(t) dB(t) = dB^+(t) dt = dB(t) dt = \\ &= dt dt = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

При этом средние от дифференциалов Ито введенных случайных процессов — нулевые:

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{env} \left( \rho^{S+env} dB(t) \right) &= \text{Tr}_{env} \left( \rho^{S+env} dB^+(t) \right) = \\ &= \text{Tr}_{env} \left( \rho^{S+env} d\Lambda(t) \right) = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

След берется по состоянию вакуумного электромагнитного поля,  $\rho^{S+env}(t) = |\tilde{\Psi}(t)\rangle\langle\tilde{\Psi}(t)|$  — преобразованная матрица плотности системы квантовых осцилляторов и окружения. Получение уравнения для  $\rho^{S+env}(t)$  и (путем указанной выше процедуры взятия следа) для  $\rho^S(t)$  — следующие этапы подхода к теории открытых квантовых систем на основе алгебраической теории возмущений (унитарного преобразования) и техники квантовых стохастических дифференциальных уравнений.

Для нахождения кинетических уравнений записываем стохастическое дифференциальное уравнение для оператора эволюции. Используем следующее представление:

$$dU(t, t_0) = [\exp(-iH^{eff}(t) dt) - 1]U(t, t_0), \quad (13)$$

в котором эффективный гамильтониан в базовых квантовых процессах приобретает вид

$$H^{eff-S}(t) dt = Y^+ dB(t) + Y dB^+(t) + Y_\Lambda d\Lambda(t). \quad (14)$$

В уравнениях (13) и (14) все величины безразмерные. Введены операторы

$$Y = \frac{\gamma_c}{\hbar} \sqrt{\frac{2\pi}{\Omega_c}} \sum_{j=1}^{N_c} c_j, \quad Y_\Lambda = -\frac{\pi\gamma_c^2 N_c}{\hbar}. \quad (15)$$

Время измеряется в единицах  $\Omega_c^{-1}$ , частота — в единицах  $\Omega_c$ .

Из разложения экспоненты (13) в ряд с учетом всех членов разложения и алгебры (11) следует более привычный вид стохастического дифференциального уравнения для оператора эволюции, используя который стандартным образом [24], находим искомое кинетическое уравнение. Кинетическое уравнение, как и все в марковском приближении, имеет вид (1) с операторами

$$\begin{aligned} H^{L-S} &= \frac{2\pi\gamma_c^2}{\hbar^2\Omega_c} \frac{\sin Y_\Lambda - Y_\Lambda}{Y_\Lambda^2} \sum_{j=1}^{N_c} c_j^\dagger \sum_{k=1}^{N_c} c_k, \\ L_- &= \frac{Y_\Lambda^e}{Y_\Lambda} \sum_{j=1}^{N_c} c_j, \\ L_+ L_- &= 2 \frac{1 - \cos Y_\Lambda}{Y_\Lambda^2} \sum_{j=1}^{N_c} c_j^\dagger \sum_{k=1}^{N_c} c_k, \\ Y_\Lambda^e &= \exp(-iY_\Lambda) - 1, \quad \chi = 1. \end{aligned} \quad (16)$$

Подчеркнем, что с операторами и величинами (16) кинетическое уравнение рассматривается как уравнение в безразмерных величинах.

Кинетическое уравнение (1) с операторами и величинами, определяемыми соотношениями (16), описывает динамику ансамбля одинаковых, не зависящих друг от друга квантовых осцилляторов, взаимодействующих с общим вакуумным широкополосным электромагнитным полем с нулевой плотностью фотонов. В отличие от традиционных исследований, операторы (16) кинетического уравнения (1) получены с точностью до второго порядка по константе связи  $\gamma_c$ . Оператор  $H^{L-S}$  и множители

$$Y_\Lambda, \quad Y_\Lambda^e, \quad \frac{Y_\Lambda^e}{Y_\Lambda}, \quad \frac{\sin Y_\Lambda - Y_\Lambda}{Y_\Lambda^2}, \quad \frac{1 - \cos Y_\Lambda}{Y_\Lambda^2}, \quad (17)$$

входящие в соотношения (16), отличают полученное кинетическое уравнение от традиционных уравнений. Мы говорим, что уравнение (1) с операторами (16) относится к уравнениям невинеровского типа, поскольку учет второго порядка алгебраической теории возмущений вводит в рассмотрение квантовый считывающий процесс  $\Lambda(t)$ . Множители (17) называем невинеровскими множителями, а динамику ансамбля квантовых осцилляторов, описываемую при помощи уравнения (1) и соотношений (16), — невинеровской динамикой.

В отсутствие считывающего процесса  $Y_\Lambda \equiv 0$  невинеровские операторные множители равны

$$\begin{aligned} Y_\Lambda^e &= 0, \quad \frac{Y_\Lambda^e}{Y_\Lambda} = -i, \quad \frac{\sin Y_\Lambda - Y_\Lambda}{Y_\Lambda^2} = 0, \\ &\frac{1 - \cos Y_\Lambda}{Y_\Lambda^2} = \frac{1}{2}, \end{aligned}$$

что обеспечивает описание процессов в ансамбле одинаковых квантовых осцилляторов только с точностью до первого порядка по константе связи.

Заметим, что в классическом случае считывающий процесс представляет собой пуассоновский процесс. В квантовом случае винеровский  $W(t)$  и пуассоновский  $P(t)$  процессы взаимосвязаны и определяются рождающим, уничтожающим и считывающим процессами по формулам

$$W(t) = B(t) + B^\dagger(t), \quad P(t) = \Lambda(t) + i(B^\dagger(t) - B(t)).$$

Говоря о невинеровской динамике, мы подчеркиваем, что не только винеровский процесс, но и пуассоновский процесс определяют такую динамику.

#### 4. КОЛЛЕКТИВНАЯ НЕВИНЕРОВСКАЯ ДИНАМИКА ОСЦИЛЛЯТОРОВ

Проанализируем полученный эффективный гамильтониан (6) со слагаемыми первого (4) и второго (5) порядков малости по константе связи и невинеровское кинетическое уравнение (1), определяемое операторами (16). Одним из важнейших его отличий от традиционного уравнения является непосредственное появление дополнительных к частоте  $\Omega_c$  рассматриваемых квантовых осцилляторов двух частотных сдвигов. Один из них для ансамбля осцилляторов из малого числа осцилляторов определяет новую эффективную частоту осциллятора  $\Omega'_c = \Omega_c + \Delta\Omega_c$ , где

$$\Delta\Omega_c = -\gamma_c^2 \int_{\omega \notin (-\Omega_c)} \frac{d\omega}{\omega + \Omega_c}. \quad (18)$$

Это — аналог лэмбовского сдвига энергии уровней для атомов. В случае осцилляторов сдвиг происходит в длинноволновую область. Для корректности выражения необходимо учесть исходную зависимость параметра связи  $\gamma_c$  от частоты и внести ее под знак интеграла.

Но помимо аналога лэмбовского сдвига есть и коллективный сдвиг энергии уровней осцилляторов, зависящий от числа осцилляторов в ансамбле. Поскольку этот сдвиг определяется слагаемым  $H^{L-S}$  в релаксационном операторе (1), (16), его естественно назвать коллективным релаксационным сдвигом. Авторам не известны работы, в которых бы коллективный релаксационный сдвиг для осцилляторов вычислялся и обсуждался. Авторам также не известны работы, выполненные в рамках глобального подхода, где подобное явление обсуждалось. Для

малого числа  $N_c$  осцилляторов в ансамбле наблюдается (должна наблюдаться) линейная зависимость частот осциллятора от числа осцилляторов в ансамбле. Если представить новое приближение эффективной частоты осциллятора как

$$\Omega''_c = \Omega_c + \Delta\Omega_c + \Delta\Omega_R, \quad (19)$$

то

$$\Delta\Omega_R \approx \frac{\pi^2 \gamma_c^4}{3\hbar^4 \Omega_c} N_c, \quad (20)$$

хотя корректнее говорить о сдвиге частоты коллективного состояния или о коллективной энергии

$$H^{L-S} = \frac{\pi^2 \gamma_c^4}{3\hbar^3 \Omega_c} N_c \sum_{j=1}^{N_c} c_j^\dagger \sum_{k=1}^{N_c} c_k. \quad (21)$$

Видим, что направление коллективного сдвига противоположно лэмбовскому сдвигу  $\Delta\Omega_c$ .

В данной статье, применяя локальный подход к теории открытых квантовых систем, мы преследовали цель найти в ансамбле одинаковых квантовых осцилляторов аналоги новым эффектам, которые ранее были обнаружены в коллективной атомной динамике [24]. Помимо релаксационного сдвига энергии коллективного состояния рассмотрим теперь проявление коллективной динамики осцилляторов в явлении сверхизлучения ансамбля. Зависимость интенсивности  $I(t)$  импульса сверхизлучения такой системы от времени определяется следующим размерным выражением:

$$I(t) = -\hbar\Omega_c \frac{d\langle C^\dagger C \rangle}{dt}, \quad (22)$$

где динамика среднего от оператора числа возбуждений коллектива осцилляторов

$$\langle C^\dagger C \rangle = \sum_{j=1}^{N_c} \langle c_j^\dagger c_j \rangle,$$

следует уравнению, полученному усреднением названного оператора, и, согласно уравнению (1), имеем

$$\frac{d}{dt} \langle C^\dagger C \rangle = -\gamma_c \frac{1 - \cos(\gamma_c^2 N_c / 2\Omega_c^2)}{(\gamma_c^2 N_c / 2\Omega_c^2)^2} \langle C^\dagger C \rangle. \quad (23)$$

При записи двух последних выражений мы вновь вернулись к размерному времени. Решение приведенного уравнения имеет отличительные особенности, характерные для невинеровской динамики. Так,

константа распада  $\gamma_c$  по сравнению с обычной винеровской динамикой приобретает дополнительный осциллирующий множитель

$$\frac{1 - \cos(\gamma_c^2 N_c / 2\Omega_c^2)}{(\gamma_c^2 N_c / 2\Omega_c^2)^2},$$

зависящий от числа квантовых осцилляторов в ансамбле. Нетрудно видеть, что при определенных значениях числа осцилляторов в ансамбле,  $N_c = 2n\pi 2\Omega_c^2 / \gamma_c^2$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$ , константа коллективной релаксации принимает значение, в точности равное нулю. В этих ситуациях невинеровская динамика ансамбля, производимая эффектами, учитываемыми второй порядок по взаимодействию ансамбля и вакуумного окружения и характеризуемая учетом антивращающих слагаемых в операторе взаимодействия, приводит к тому, что скорость коллективной релаксации ансамбля обращается в нуль и замораживается возбужденное состояние ансамбля осцилляторов. Этот эффект обусловлен квантовой интерференцией различных каналов взаимодействия системы с окружением — квантовых переходов в системе с излучением реального кванта и переизлучением виртуальных квантов с сохранением энергетического состояния открытой системы. Реальные переходы описываются квантовыми уничтожающим  $B(t)$  и рождающим  $B^+(t)$  процессами, а переизлучение — считывающим процессом  $\Lambda(t)$ . Они имеют различные алгебраические свойства (см. соотношения алгебры Хадсона–Партасарати (11)). Своеобразную интерференцию описывает считывающее свойство  $d\Lambda(t) dB^+(t) = dB^+(t)$ . Такая интерпретация была дана ранее на примере ансамбля атомных осцилляторов [24].

Решение уравнения (23), определяющее и вид импульса сверхизлучения во времени,

$$\langle C^\dagger C \rangle = \langle C^\dagger C \rangle_0 \exp \left( -\gamma_c \frac{1 - \cos \left( \frac{\gamma_c^2 N_c}{2\Omega_c^2} t \right)}{\left( \frac{\gamma_c^2 N_c}{2\Omega_c^2} \right)^2} t \right),$$

существенным образом зависит от начального состояния осцилляторов, определяемого средним  $\langle C^\dagger C \rangle_0$ , или от способа приготовления коллективной системы. Как и в случае винеровской динамики, значение интенсивности оказывается пропорциональным квадрату числа осцилляторов  $N_c^2$  только для случая сфазированно-приготовленного начального состояния, когда  $\langle C^\dagger C \rangle_0 \propto N_c^2$ . Для такого состояния для средних справедливы соотношения  $\langle C^\dagger \rangle_0 \propto \langle C \rangle_0 \propto N_c$ . В случае приготовления системы со

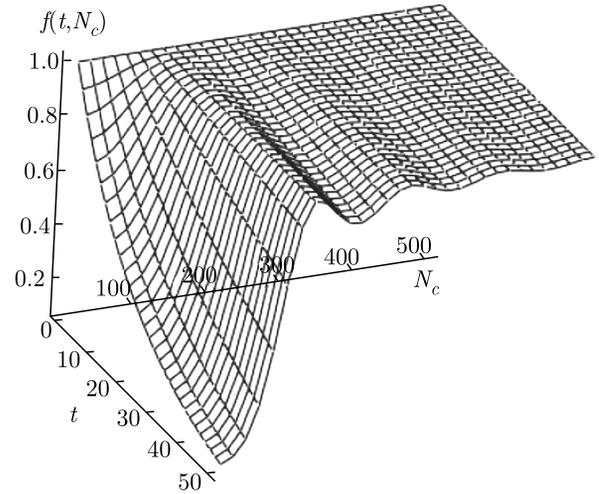


Рис. 1. Нормированное среднее число возбуждений ансамбля одинаковых квантовых осцилляторов. Время  $t$  — безразмерная величина

случайным распределением фаз осцилляторов значение среднего  $\langle C^\dagger C \rangle_0 \propto N_c$ , поскольку в этом случае  $\langle C^\dagger \rangle_0 \propto \langle C \rangle_0 \propto \sqrt{N_c}$ .

На рис. 1 представлены графики зависимости нормированного среднего числа возбуждений

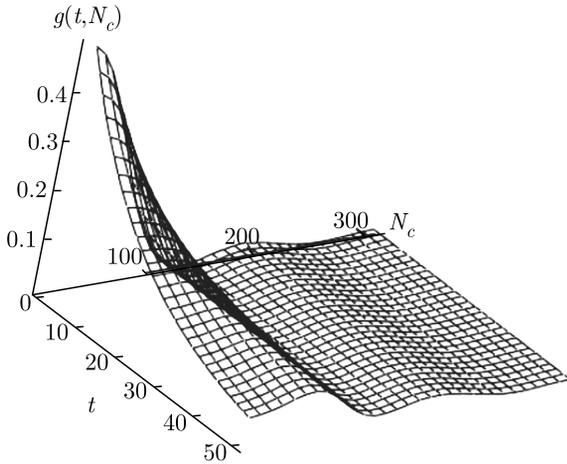
$$f(t, N_c) = \langle C^\dagger C \rangle / \langle C^\dagger C \rangle_0$$

в зависимости от времени и числа осцилляторов в системе. Среднее число возбуждений носит осцилляционный характер в зависимости от числа осцилляторов ансамбля. С увеличением числа последних среднее число возбуждений практически не меняет своего значения во времени, что определяется учетом процессов второго порядка по константе связи. Это — новый эффект, не встречающийся в теории сверхизлучения ансамбля осцилляторов при применении обычного описания в рамках традиционной теории резонансного взаимодействия ансамбля с вакуумным окружением в приближении вращающейся волны.

На рис. 2 приведены графики зависимости нормированной интенсивности

$$g(t, N_c) = \frac{I(t, N_c)}{\hbar \Omega_c \gamma_c \langle C^\dagger C \rangle_0}$$

импульсов сверхизлучения в зависимости от времени и числа осцилляторов в системе. Видно, что максимальное значение интенсивности отвечает именно начальному моменту времени, что отличает систему квантовых осцилляторов от системы атомных ос-



**Рис. 2.** Нормированная интенсивность коллективного излучения ансамбля возбужденных квантовых осцилляторов. Время  $t$  — безразмерная величина

цилляторов. Однако на зависимости  $g(t, N_c)$  от числа осцилляторов  $N_c$  наблюдаются колебания, а также уменьшение времени затухания ансамбля с увеличением  $N_c$ . Эти особенности сходны с аналогичными эффектами в ансамбле атомных осцилляторов.

Для указанных зависимостей мы не учитывали малый частотный сдвиг частоты осциллятора, полагая, что  $\Omega_c'' \approx \Omega_c$ . Для исследования сдвигов частоты (18) и (20) хорошо разработаны спектральные методы, а различные зависимости от числа осцилляторов  $N_c$  в ансамбле позволят отделить один тип частотного сдвига  $\Delta\Omega_c$  от другого  $\Delta\Omega_R$ .

**Финансирование.** Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-02-00234а).

### ЛИТЕРАТУРА

1. А. И. Трубилко, А. М. Башаров, ЖЭТФ **159**, 262 (2021).
2. В. W. Shore and P. L. Knight, J. Mod. Optics **40**, 1195 (2003).
3. Л. Мандель, Э. Вольф, *Оптическая когерентность и квантовая оптика*, Физматлит, Москва (2000).
4. А. I. Maimistov, Nonlinear Phenom. Complex Syst. J. **19**, 358 (2016).
5. Y. Kivshar, Low Temp. Phys. **45**, 1201 (2019).
6. N. B. Plougonven, C. Minot, G. Bouwmans, A. Levenson, and J.-M. Moison, Opt. Express **22**, 12379 (2014).
7. Xun-Wei Xu, Ai-Xi Chen, Yong Li, and Yu-xi Liu, Phys. Rev. A **95**, 063808 (2017).
8. K. Li, U. Krishnamoorthy, J. P. Heritage, and O. Solgaard, Opt. Lett. **27**, 366 (2002).
9. M. Hasan, I. V. Iorsh, O. V. Kibis, and I. A. Shelykh, Phys. Rev. B **93**, 125401 (2016).
10. S. Schmidt and G. Blatter, Phys. Rev. Lett. **103**, 086403 (2009).
11. J. Perczel, J. Borregaard, D. E. Chang, S. F. Yelin, and M. D. Lukin, Phys. Rev. Lett. **124**, 083603 (2020).
12. S. Rojas-Rojas, E. Barriga, C. Munoz, P. Solano, and C. Hermann-Avigliano, Phys. Rev. A **100**, 023841 (2019).
13. А. М. Башаров, А. И. Маймистов, Э. А. Манькин, ЖЭТФ **84**, 487 (1983).
14. А. М. Башаров, *Фотоника, Метод унитарного преобразования в нелинейной оптике*, МИФИ, Москва (1990).
15. А. I. Maimistov and А. М. Basharov, *Nonlinear Optical Waves*, Kluwer Acad., Dordrecht (1999).
16. Л. Аллен, Д. Эберли, *Оптический резонанс и двухуровневые атомы*, Мир, Москва (1978).
17. D. F. Walls, Z. Phys. **234**, 231 (1970).
18. B. Nachtergaele, B. Schlein, R. Sims, S. Starr, and V. Zagrebnoy, Rev. Math. Phys. **22**, 207 (2010).
19. J.-T. Hsiang and B.-L. Hu, Phys. Rev. D **101**, 125003 (2020).
20. T. Chen, V. Balachandran, C. Guo, and D. Poletti, Phys. Rev. E **102**, 012155 (2020).
21. А. S. Trushechkin and I. V. Volovich, Europhys. Lett. **113**, 30005 (2016).
22. А. Е. Teretenkov, Infinite Dimensional Analysis, Quantum Probability and Related Topics **22**, 1930001 (2019).

23. А. М. Башаров, ЖЭТФ **102**, 1126 (1992).
24. А. М. Башаров, ЖЭТФ **158**, 978 (2020).
25. А. И. Трубилко, А. М. Башаров, ЖЭТФ **156**, 407 (2019).
26. A. I. Trubilko and A. M. Basharov, Phys. Scr. **95**, 045106 (2020).
27. А. И. Трубилко, А. М. Башаров, Письма в ЖЭТФ **111**, 632 (2020).
28. А. И. Трубилко, А. М. Башаров, ЖЭТФ **157**, 74 (2020).
29. А. И. Трубилко, А. М. Башаров, Письма в ЖЭТФ **110**, 505 (2019).
30. Ю. А. Ильинский, Н. С. Маслова, ЖЭТФ **91**, 171 (1988).
31. В. В. Железняков, В. В. Кочаровский, Вл. В. Кочаровский, УФН **153**, 525 (1987).
32. A. Levy and R. Kozloff, Europhys. Lett. **107**, 20004 (2014).
33. C. W. Gardiner and P. Zoller, *Quantum Noise*, Springer-Verlag, Berlin (2004).
34. A. M. Chebotarev, *Lectures on Quantum Probability*, Sociedad Mathematica Mexicana (2000).
35. R. L. Hudson and K. R. Parthasarathy, Comm. Math. Phys. **93**, 301 (1984).
36. В. П. Белавкин, УМН **47**, 47 (1992).
37. A. M. Basharov, Phys. Rev. A **84**, 013801 (2011).

# ДИНАМИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ГРАВАСТАРОВ ДЛЯ СЛУЧАЯ ЧД АВГ

*М. Шариф\**, *Ф. Джавед\*\**

*Department of Mathematics, University of the Punjab  
Lahore-54590, Pakistan*

Поступила в редакцию 5 мая 2021 г.,  
после переработки 22 мая 2021 г.  
Принята к публикации 27 мая 2021 г.

(Перевод с английского)

## DYNAMICAL STABILITY OF GRAVASTARS COVERED WITH ABG BLACK HOLES

*M. Sharif, F. Javed*

Построена геометрия гравастаров с тонкой оболочкой на основе сшивания внутреннего решения де Ситтера и внешней черной дыры Айон-Беато–Гарсиа (де Ситтера). На тонкой оболочке эти два пространства-времени связываются с помощью техники “cut and paste”. Наличие тонкого слоя материи на тонкой оболочке играет важную роль для объяснения динамики и устойчивости гравастаров. Оказалось, что физические характеристики, такие как собственная длина, энтропия и энергетические условия зависят от толщины оболочки. Устойчивость гравастаров исследуется с использованием линеаризованного радиального возмущения и баротропного уравнения состояния. Получено, что области устойчивости для черных дыр Айон-Беато и Гарсиа–де Ситтера больше, чем для черных дыр Айон-Беато и Гарсиа, а также для черных дыр Шварцшильда. Оказалось, что гравастары с тонкой оболочкой более устойчивы, если для баротропного уравнения состояния радиус оболочки меньше, чем ожидаемый горизонт событий.

DOI: 10.31857/S0044451021100072

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Гравитационный коллапс массивной звезды приводит к формированию области пространства-времени с сильными гравитационными эффектами, откуда ничто не может вырваться, даже свет. Полная масса звезды сжимается к центральной точке, поэтому в точке центральной сингулярности кривизна пространства-времени становится бесконечной. Такие области называются черными дырами (ЧД). Черные дыры невозможно наблюдать из-за наличия горизонта событий и центральной сингулярности. В настоящее время общая теория относительности не

дает достаточно информации относительно физических характеристик ЧД. Астрономические объекты, которые гипотетически можно было бы интерпретировать как ЧД, — это гравастары (звезды гравитационного вакуума). Эту гипотезу предложили Мазур и Мотолла в работе [1]. Основная идея заключается в предотвращении формирования горизонта событий и сингулярностей, если остановить коллапс материи на горизонте событий или вблизи него.

В работе [1] рассматривался холодный компактный объект, состоящий из внутренней области, которой соответствует геометрия де Ситтера (DS), и внешней области, которой соответствует геометрия Шварцшильда, при этом к гравитационным структурам применялся принцип бозе-эйнштейновской конденсации. Эти области с различными геометриями разделены границей фаз, имеющей малую

\* E-mail: msharif.math@pu.edu.pk

\*\* E-mail: faisalrandawa@hotmail.com

конечную толщину ( $r_i - r_o = \delta$ ), также известную как тонкая оболочка; здесь  $r_i$  и  $r_o$  — соответственно внутренний и внешний радиусы гравастара. Следовательно, распределение материи в этих областях можно описывать с помощью соответствующих уравнений состояния (УС), имеющих следующий вид:

- Для внутреннего многообразия  $0 \leq r < r_i$

$$p = -\rho,$$

- Для тонкой оболочки  $r_i < r < r_o$

$$p = \rho,$$

- Для внешнего многообразия  $r_o < r$

$$p = 0 = \rho.$$

Здесь  $\rho$  — плотность энергии, а  $p$  — давление. Распределение материи в промежуточной области играет важную роль для преодоления эффектов гравитационного коллапса, поскольку является источником достаточного давления для поддержания устойчивой геометрии рассматриваемой структуры. В работе [2] для вычисления физических величин для материальной поверхности на тонкой оболочке использовался формализм Израэля. В работе [3] для получения геометрической структуры гравастара при отсутствии центральной сингулярности и горизонта событий использовался метод “cut and paste”, который позволяет сшивать внутреннее многообразие DS и внешнее многообразие, соответствующее ЧД Шварцшильда. В работах [4–11] этот метод использовался для объяснения кротовых нор с тонкой оболочкой, образованных из двух эквивалентных копий пространства-времени ЧД.

В работе [12] представлена простейшая модель гипотезы Мазура–Мотголы с использованием метода “cut and paste” для внешнего и внутреннего многообразий. В работе [13] рассматривались гравастары с тонкой оболочкой для различных случаев внутренней и внешней геометрий, а именно, многообразий ЧД DS или анти-DS в качестве внутренней геометрии и ЧД Шварцшильда–DS/анти-DS или Райснера–Нордстрема (RN) в качестве внешней. В этой работе рассматривались различные значения параметров, при которых для гравастара получаются устойчивые решения, а также были получены различные качественные результаты для уравнения состояния. В работе [14] рассматривались гравастары с электрическим зарядом, а также исследовалось

влияние на их устойчивость электрического заряда, скорости звука, параметра УС и поверхностного красного смещения. В работе [15] было получено, что при наличии электромагнитного поля гравастары имеют устойчивую конфигурацию, а также рассматривался гравастар в мире на бране с ЧД в качестве внешнего многообразия.

В работе [16] представлен новый вид гравастара, полученный подстановкой фантома Борна–Инфельда для внутренней геометрии DS. В работе [17] была построена динамическая модель прототипа гравастаров, заполненных фантомной энергией. В этой работе исследовались гравастары с тонкой оболочкой с внешним пространством-временем Вайдья, заполненные идеальной жидкостью. Было получено, что при различных распределениях материи на тонкой оболочке такая структура может представлять собой частичный (“bounded excursion”) гравастар или коллапсировать к геометрии ЧД. В работе [18] в рамках подхода Чандрасекара исследовались гравастары с непрерывным давлением, а также было получено уравнение состояния для статического случая. В работе [19] приведено краткое исследование гравастара в размерности  $(2 + 1)$  и исследованы его физические характеристики, такие как энтропия, длина, а также различные энергетические условия. Физические характеристики и устойчивые конфигурации некоммутативных гравастаров рассмотрены в работе [20]. Было показано, что вблизи ожидаемого горизонта событий должны существовать устойчивые области. В работе [21] с использованием радиальных возмущений исследовалась устойчивость некоммутативных гравастаров.

В 1968 г. Бардин предложил использовать регулярные ЧД как решения полевых уравнений Эйнштейна [22]. Такие области пространства-времени содержат горизонт событий, однако из них исключена центральная сингулярность. Затем Айон-Беато и Гарсиа [23] расширили эту концепцию ЧД в рамках нелинейной электродинамики, получив ЧД, известные как ЧД АВГ. Авторы работы [24] предложили регулярные ЧД АВГ, связанные с космологической постоянной, такие ЧД известны как ЧД АВГ–DS. Построение гравастаров с тонкой оболочкой и исследование их устойчивости для различных внешних регулярных ЧД является одной из интересных задач общей теории относительности. Устойчивость гравастаров с тонкой оболочкой в контексте регулярного пространства-времени (ЧД Бардина и ЧД Бардина–DS) исследовалась в работе авторов [25]. Были исследованы физическая достоверность предложенной модели с использованием энер-

гетических условий и устойчивость с использованием радиальных возмущений оболочки относительно положения равновесия. Затем в работе [26] были исследованы устойчивые и динамические конфигурации гравастаров с тонкой оболочкой для ЧД Хэйворда для массивного и безмассового скалярных полей. Недавно авторы исследовали влияние переменного УС на устойчивые конфигурации гравастаров с тонкой оболочкой для заряженной ЧД Киселева в качестве внешнего многообразия [27]. Интересно заметить, что области устойчивости уменьшаются при возрастании величины заряда и увеличиваются при возрастании космологической постоянной.

В настоящей работе рассматриваются гравастары для случаев ЧД АВG и АВG–DS. Работа построена следующим образом. В разд. 2 приведен формализм гравастаров с тонкой оболочкой и рассмотрена их динамика. В разд. 3 с использованием радиального возмущения и баротропного УС исследуется устойчивость гравастаров с тонкой оболочкой. Наконец, в последнем разделе обобщаются полученные результаты.

## 2. ФОРМАЛИЗМ ГРАВАСТАРОВ

Чтобы исследовать геометрическую структуру гравастара с тонкой оболочкой, выберем ЧД DS в качестве внутреннего многообразия и ЧД АВG–DS в качестве внешнего. Будем использовать метод “cut and paste”. Обозначим внутреннюю и внешнюю геометрии как  $\Upsilon^-$  и  $\Upsilon^+$ , соответственно. Линейный элемент этих многообразий можно записать как [24]

$$ds_{\pm}^2 = -\mathcal{B}_{\pm}(r_{\pm})dt_{\pm}^2 + \mathcal{B}_{\pm}^{-1}(r_{\pm})dr_{\pm}^2 + r_{\pm}^2(d\theta_{\pm}^2 + \sin^2\theta_{\pm}d\phi_{\pm}^2), \quad (1)$$

где

$$\mathcal{B}_-(r_-) = 1 - \frac{r_-^2}{\alpha^2},$$

$$\mathcal{B}_+(r_+) = 1 - \frac{2r_+^2 m}{(r_+^2 + Q^2)^{\frac{3}{2}}} + \frac{Q^2 m}{(r_+^2 + Q^2)^2} - \frac{\Lambda r_+^2}{3},$$

здесь  $\alpha$  — ненулевая постоянная,  $\Lambda$  — космологическая постоянная,  $Q$  — заряд, а  $m$  — масса регулярной ЧД. Оказывается, ЧД АВG–DS сводится к ЧД АВG, если космологическая постоянная обращается в нуль, и к ЧД Шварцшильда, если  $Q = 0 = \Lambda$ . В работе [23] представлено регулярное решение, связанное с чисто нелинейной электродинамикой; обычная линейная теория Максвелла получается в приближении слабого поля. Такое взаимодействие гравитации и нелинейной электродинамики позволяет полу-

чить точное несингулярное решение, удовлетворяющее слабым энергетическим условиям. Электрическое поле, соответствующее регулярному решению полевых уравнений, имеет вид [23, 24]

$$E = \frac{15Qr_+^4 m}{2(r_+^2 + Q^2)^{7/2}} + \frac{Qr_+^4(r_+^2 - 5Q^2)}{(r_+^2 + Q^2)^4}.$$

При больших значениях  $r_+$  это решение асимптотически соответствует решению для ЧД RN. Соответствующая метрическая функция и электрическое поле принимают вид

$$\mathcal{B}_+(r_+) = 1 - \frac{2m}{r_+} + \frac{Q^2}{r_+^2} - \frac{\Lambda r_+^2}{3} + O\left(\frac{1}{r_+^3}\right),$$

$$E = \frac{Q^2}{r_+^2} + O\left(\frac{1}{r_+^3}\right).$$

Используем теперь подход Виссера для сшивания внутреннего пространства-времени ЧД DS и внешнего пространства-времени регулярной ЧД на тонкой оболочке. Плотность энергии и давление материи, располагающейся на тонкой оболочке, имеют вид [25]

$$\rho = -\frac{1}{4\pi u} \left\{ \sqrt{\dot{u}^2 + \mathcal{B}_+(u)} - \sqrt{\dot{u}^2 + \mathcal{B}_-(u)} \right\}, \quad (2)$$

$$p = \frac{1}{8\pi u} \left\{ \frac{2\dot{u}^2 + 2u\ddot{u} + 2\mathcal{B}_+(u) + u\mathcal{B}'_+(u)}{\sqrt{\dot{u}^2 + \mathcal{B}_+(u)}} - \frac{2\dot{u}^2 + 2u\ddot{u} + 2\mathcal{B}_-(u) + u\mathcal{B}'_-(u)}{\sqrt{\dot{u}^2 + \mathcal{B}_-(u)}} \right\}. \quad (3)$$

Заметим, что

$$\dot{u}_0 = \ddot{u}_0 = 0,$$

где  $u_0$  — равновесный радиус оболочки. Компоненты тензора энергии-импульса при  $u = u_0$  имеют вид

$$\rho_0 = -\frac{1}{4\pi u_0} \left\{ \sqrt{\mathcal{B}_+(u_0)} - \sqrt{\mathcal{B}_-(u_0)} \right\}, \quad (4)$$

$$p_0 = \frac{1}{8\pi u_0} \left\{ \frac{2\mathcal{B}_+(u_0) + u_0\mathcal{B}'_+(u_0)}{\sqrt{\mathcal{B}_+(u_0)}} - \frac{2\mathcal{B}_-(u_0) + u_0\mathcal{B}'_-(u_0)}{\sqrt{\mathcal{B}_-(u_0)}} \right\}. \quad (5)$$

Мы использовали физические параметры рассматриваемой структуры, такие как гравитационная постоянная ( $G$ ), космологическая постоянная ( $\Lambda$ ), заряд ( $Q$ ), масса тонкой оболочки ( $M$ ), масс ЧД

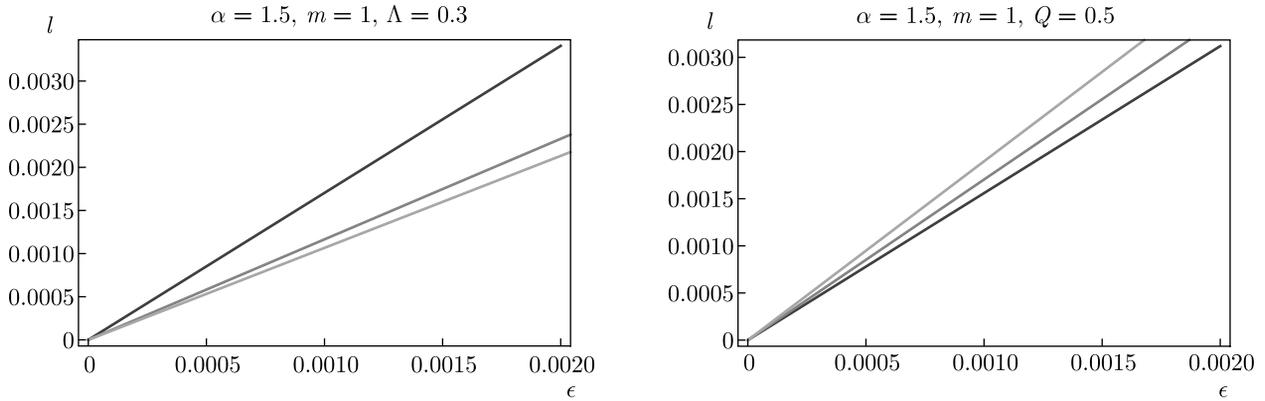


Рис. 1. Зависимости собственной длины  $l$  [км] оболочки от толщины  $\epsilon$  [км] для  $q = 0.5$  (синий),  $q = 0.9$  (красный),  $q = 1.2$  (зеленый) (левая панель) и  $\Lambda = 0.1$  (синий),  $\Lambda = 0.3$  (красный),  $\Lambda = 0.5$  (зеленый) (правая панель)

( $m$ ), равновесный радиус оболочки ( $u_0$ ) и  $\alpha$ . Эти величины имеют следующую размерность:  $\Lambda = 4.33 \cdot 10^{-66} \text{эВ}^2 = \alpha$ ,  $M = 3.36 \cdot 10^{66} \text{эВ}$ ,  $G = 6.72 \cdot 10^{-57} \text{эВ}^{-2}$  [28]. Масса тонкой оболочки приблизительно в три раза больше массы Солнца, что представляет собой нижнюю границу массы ЧД. Равновесный радиус оболочки измеряется в километрах. Однако удобнее использовать безразмерные величины физических параметров:  $m = 0.5$ ,  $\Lambda = 0.5$  и  $\alpha = 0.5$ ,  $Q = 0.5$  для подходящей области значений  $u_0$ . Эти значения могут оказаться полезны при рассмотрении влияния физических параметров на физические характеристики и устойчивость гравастаров с тонкой оболочкой [5–10].

### 2.1. Физические характеристики

Рассмотрим некоторые физические характеристики гравастаров с тонкой оболочкой, такие как собственная длина, энтропия и плотность энергии на поверхности оболочки. Пусть внешней и внутренней границам оболочки отвечают радиусы  $r = u$  и  $r = u + \epsilon$ , где  $\epsilon$  — собственная толщина тонкой оболочки, причем  $0 < \epsilon \ll 1$ . Собственная толщина промежуточной области вычисляется как [29, 30]

$$l = \int_u^{u+\epsilon} \sqrt{\mathcal{B}_+^{-1}(r)} dr = \int_u^{u+\epsilon} \frac{dr}{\sqrt{1 - \frac{2r^2m}{(r^2 + Q^2)^{3/2}} + \frac{Q^2m}{(r^2 + Q^2)^2} - \frac{\Lambda r^2}{3}}}$$

Это уравнение можно решить, предполагая

$$\sqrt{\mathcal{B}_+^{-1}(r)} = \frac{df(r)}{dr},$$

откуда

$$l = \int_u^{u+\epsilon} \frac{df(r)}{dr} dr = f(u + \epsilon) - f(u) \approx \epsilon \left. \frac{df(r)}{dr} \right|_{r=u} = \epsilon \sqrt{\mathcal{B}_+^{-1}(u)}.$$

Поскольку  $0 < \epsilon \ll 1$ , мы пренебрегаем квадратичными и более высокими степенями  $\epsilon$ . Отсюда имеем

$$l = \epsilon \left[ 1 - \frac{2u^2m}{(u^2 + Q^2)^{3/2}} + \frac{Q^2m}{(u^2 + Q^2)^2} - \frac{\Lambda u^2}{3} \right]^{-1/2}.$$

Из этого выражения видно, что собственная длина пропорциональна толщине оболочки. Поскольку приведенное выше выражение является сложным, для исследования влияния величины заряда и космологической постоянной на поведение собственной длины был проведен численный анализ. Было получено, что собственная длина возрастает с ростом  $\Lambda$  и убывает с ростом заряда, см. рис. 1.

Энтропия является мерой возмущения или беспорядка в геометрической структуре. Мы вычисляем энтропию в области оболочки как [29, 30]

$$S = \epsilon \eta u^2 \sqrt{8\pi p(u) \mathcal{B}_+^{-1}(u)},$$

где  $\eta$  — безразмерный параметр. Из этого выражения видно, что энтропия также пропорциональна толщине оболочки. Зависимости энтропии  $S$  от толщины оболочки при различных значениях  $Q$  и  $\Lambda$  приведены на рис. 2. Видно, что энтропия убывает с

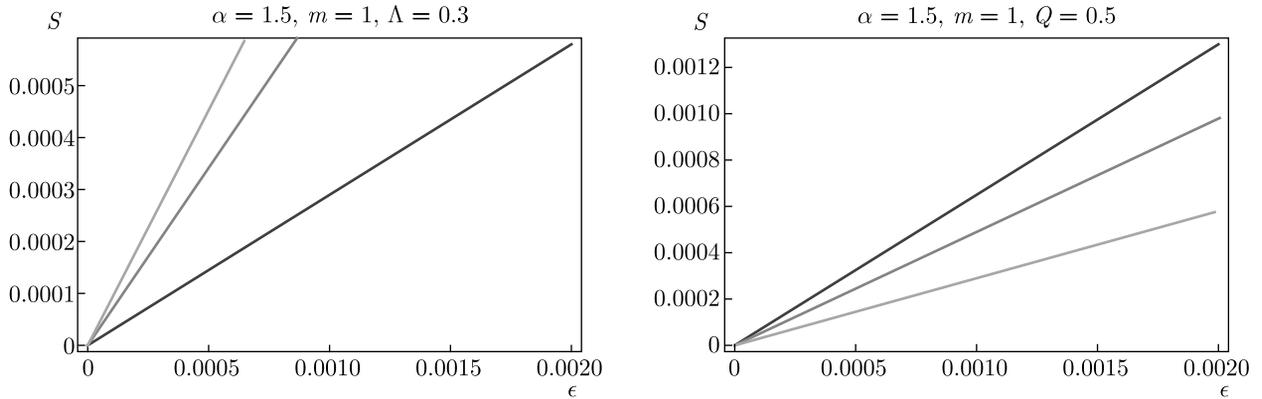


Рис. 2. Зависимости энтропии оболочки от ее толщины

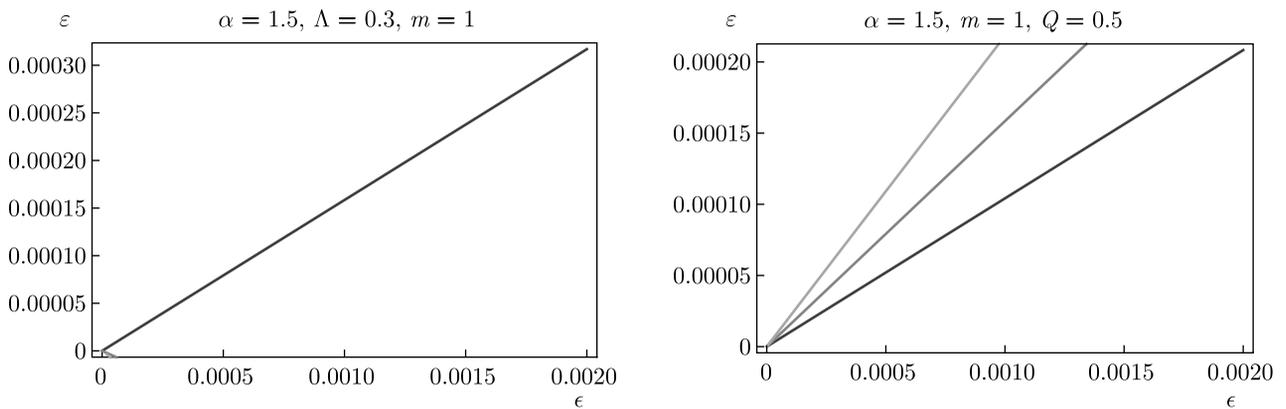


Рис. 3. Зависимости распределения энергии оболочки от ее толщины

ростом  $\Lambda$  и возрастает с ростом заряда. Более того, распределение энергии в рассматриваемой структуре определяется выражением [29, 30]

$$\varepsilon = \int_u^{u+\varepsilon} 4\pi r^2 \rho(r) dr \approx 4\pi u^2 \rho(u).$$

Видно, что распределение энергии пропорционально  $\varepsilon$ . Распределение энергии внутри оболочки одинаково для всех значений заряда и возрастает при увеличении  $\Lambda$  (см. рис. 3).

### 2.2. Равновесное уравнение состояния

Равновесное уравнение состояния для давления можно получить, используя компоненты внешней кривизны для обоих многообразий [31]:

$$\Delta^-(u_0) - \Delta^+(u_0) = \frac{p_0}{2u_0} \left( \sqrt{\mathcal{B}_+(u_0)} + \sqrt{\mathcal{B}_-(u_0)} \right) + \frac{\rho_0}{2} \left( \frac{\mathcal{B}_+(u_0)'}{\sqrt{\mathcal{B}_+(u_0)}} + \frac{\mathcal{B}_-(u_0)'}{\sqrt{\mathcal{B}_-(u_0)}} \right), \quad (6)$$

где  $\Delta^\pm(u_0)$  — напряжение, действующее вдоль радиального направления тонкой оболочки, для внутренней и внешней геометрий. Приведенное выше уравнение определяет радиальные напряжения и их разность в терминах компонент тензора энергии-импульса материальной поверхности для равновесного радиуса оболочки. Видно, что напряжение вдоль радиального направления для внешнего вакуумного решения обращается в нуль, т. е.

$$\Delta^+(u_0) = 0.$$

Для исследования динамики гравастаров будем предполагать, что плотность поверхностной энергии при  $u = u_0$  обращается в нуль. Поэтому соответствующее уравнение (6) принимает вид

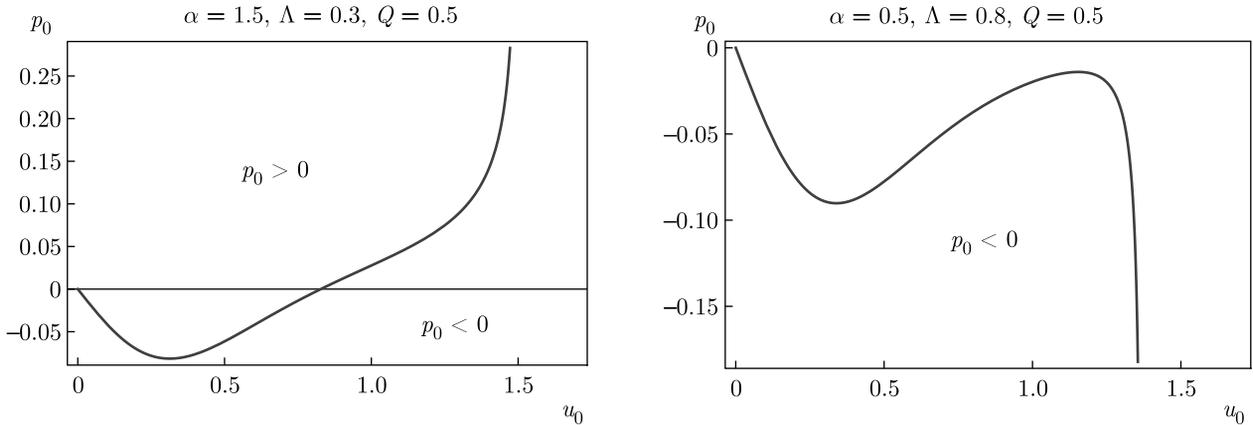


Рис. 4. Динамика гравастаров с тонкой оболочкой при различных значениях  $\Lambda$ ,  $m = 0.5$

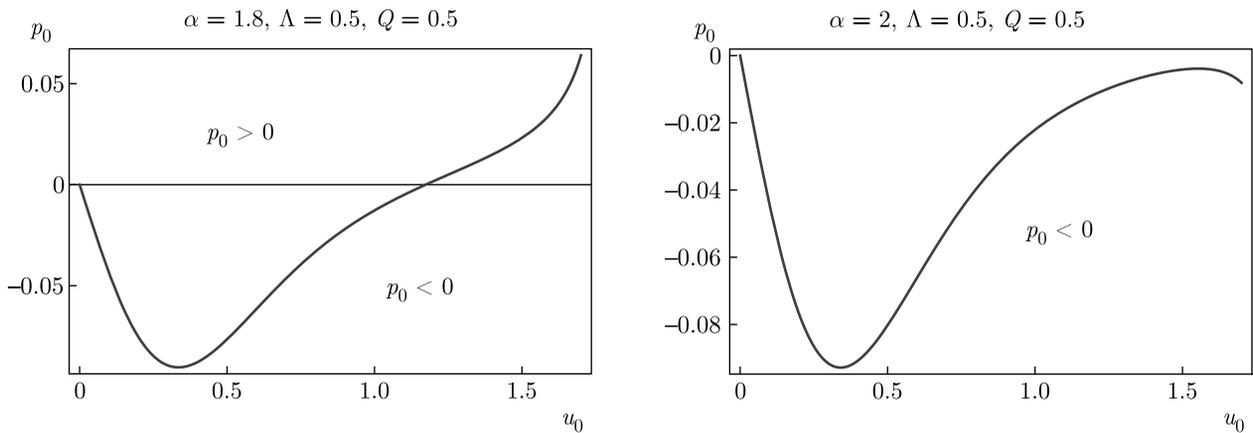


Рис. 5. Динамика гравастаров с тонкой оболочкой при различных значениях  $\alpha$ ,  $m = 0.5$

$$\Delta^-(u_0) = \frac{p_0}{2u_0} \left( \sqrt{B_+(u_0)} + \sqrt{B_-(u_0)} \right). \quad (7)$$

Это уравнение описывает соотношение между радиальным напряжением внутреннего пространства-времени ( $\Delta^-(u_0)$ ) и поверхностным давлением тонкого слоя материи на оболочке.

Нетрудно видеть, что если  $\Delta^-(u_0) < 0$ , то  $p_0 < 0$ , а при расширении оболочки  $\Delta^-(u_0) > 0$  имеем  $p_0 > 0$ , что соответствует коллапсирующему поведению гравастаров с тонкой оболочкой. Рисунок 4 иллюстрирует динамику гравастаров с тонкой оболочкой, а именно, зависимости поверхностного давления от  $u = u_0$ . На левой и правой панелях рис. 4 видно, что при  $\Lambda < 0.8$  гравастар с тонкой оболочкой претерпевает сначала коллапс, а затем расширение, тогда как при  $\Lambda \geq 0.8$  происходит только коллапс. Аналогично, как видно на рис. 5, гравастар с тонкой оболочкой демонстрирует коллапс, только если  $\alpha \geq 2$ . Оказалось, что скорости коллапса и расшире-

ния гравастаров с тонкой оболочкой убывают с ростом  $\Lambda$  (см. рис. 5, левая панель). Кроме того, для пространства-времени Шварцшильда гравастар демонстрирует только расширение, при этом для ЧД АВГ-ДС и ЧД АВГ он демонстрирует как расширение, так и коллапс (см. рис. 6, правая панель).

### 3. АНАЛИЗ УСТОЙЧИВОСТИ

В данном разделе мы рассмотрим характеристики устойчивости гравастаров, используя линеаризованное радиальное возмущение относительно  $u = u_0$  и баротропное УС. Для этого рассмотрим уравнения сохранения и уравнение движения гравастара с тонкой оболочкой. Из (2) получаем

$$\dot{u}^2 + \Omega(u) = 0,$$

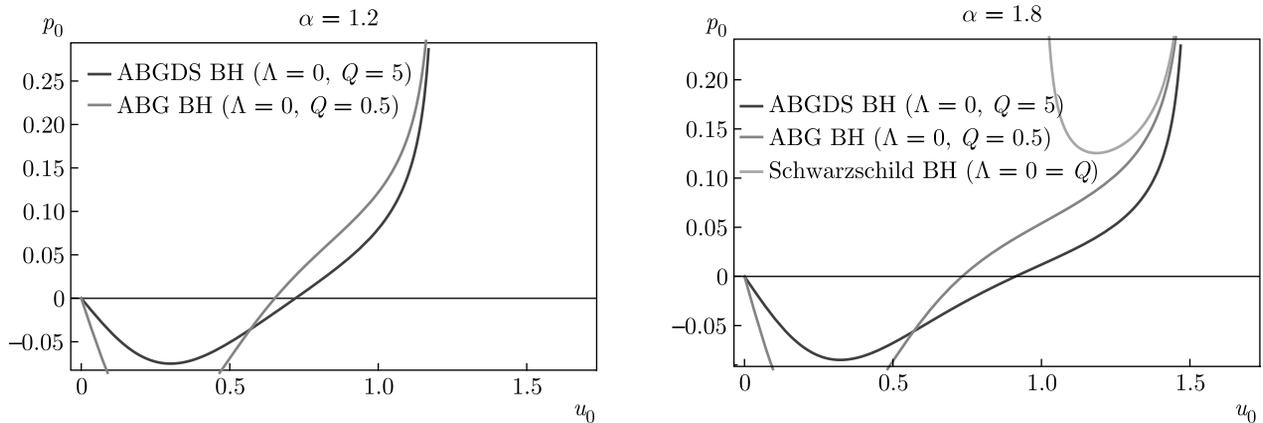


Рис. 6. Динамика гравастаров с тонкой оболочкой для ЧД АВГ–ДС (синий,  $\Lambda = 0, Q = 5$ ), АВГ (красный,  $\Lambda = 0, Q = 0.5$ ) и Шварцшильда (зеленый,  $\Lambda = 0, Q = 0$ ),  $m = 0.5$

где

$$\Omega_{ABGDS}(u) = \frac{1}{2} \left( u^2 \left( -\frac{2m}{(u^2 + Q^2)^{3/2}} + \frac{Q^2}{(u^2 + Q^2)^2} - \frac{1}{\alpha^2} - \frac{\Lambda}{3} \right) + 2 \right) - \frac{u^2 \left( \frac{6m}{(u^2 + Q^2)^{3/2}} - \frac{3Q^2}{(u^2 + Q^2)^2} - \frac{3}{\alpha^2} + \Lambda \right)^2}{576\pi^2\rho^2} - 4\pi^2 u^2 \rho^2,$$

$$\Omega_{ABG}(u) = \frac{1}{2} \left( u^2 \left( -\frac{2m}{(u^2 + Q^2)^{3/2}} + \frac{Q^2}{(u^2 + Q^2)^2} - \frac{1}{\alpha^2} \right) + 2 \right) - 4\pi^2 u^2 \rho^2 - \frac{u^2 \left( -\frac{2m}{(u^2 + Q^2)^{3/2}} + \frac{Q^2}{(u^2 + Q^2)^2} + \frac{1}{\alpha^2} \right)^2}{64\pi^2\rho^2}.$$

Из уравнения сохранения получаем

$$\rho' = -\frac{2}{u}(p(\rho) + \rho).$$

При анализе устойчивости можно записать [25]

$$\Omega''(u_0) > 0 \Rightarrow \Upsilon(u_0)\eta_0^2 - B(u_0) > 0,$$

где

$$\Upsilon_0 = (4\rho_0 p_0 + 4\rho_0^2) \times (-256\pi^4 u_0 + (\mathcal{B}_-(u_0) - \mathcal{B}_+(u_0))^2)^4 \rho_0^4,$$

$$B_0 = -(4p_0^2 + 6p_0\rho_0 + 3\rho_0^2) 256\pi^4 u_0^4 \rho_0^4 + u_0\rho_0 (u_0\rho_0 (\mathcal{B}_-(u_0)'' (16\pi^2 u_0^2 \rho_0^2 - \mathcal{B}_-(u_0) + \mathcal{B}_+(u_0)) + \mathcal{B}_+(u_0)'' (\mathcal{B}_-(u_0) + 16\pi^2 u_0^2 \rho_0^2 - \mathcal{B}_+(u_0))) + 2\mathcal{B}_-(u_0)' (u_0\rho_0 \mathcal{B}_+(u_0)' - 2(\mathcal{B}_-(u_0) - \mathcal{B}_+(u_0))(2p_0 + \rho_0)) - u_0\rho_0 (\mathcal{B}_-(u_0)')^2 - u_0\rho_0 (\mathcal{B}_+(u_0)')^2 + 4\mathcal{B}_+(u_0)' (2p_0 + \rho_0) (\mathcal{B}_-(u_0) - \mathcal{B}_+(u_0)) - (12p_0^2 + 10p_0\rho_0 + \rho_0^2) \mathcal{B}_-(u_0)^2 + 2\mathcal{B}_-(u_0) (12p_0^2 + \rho_0^2 + 10p_0\rho_0) \mathcal{B}_+(u_0) - \mathcal{B}_+(u_0)^2 (12p_0^2 + 10p_0\rho_0 + \rho_0^2),$$

а  $\eta_0^2 = dp/d\rho|_{u=u_0}$  — параметр УС. Области устойчивости гравастаров с тонкой оболочкой можно характеризовать следующим образом:

- если  $\Upsilon_0 < 0$ , то  $\eta_0^2 < B_0/\Upsilon_0$ ,
- если  $\Upsilon_0 > 0$ , то  $\eta_0^2 > B_0/\Upsilon_0$ .

Устойчивость гравастара с тонкой оболочкой можно анализировать, рассматривая изменения  $B_0/\Upsilon_0$  и  $\eta_0^2$  при различных значениях физических параметров, а именно,  $\alpha, Q, m$  и  $\Lambda$ . Оказалось, что области устойчивости гравастаров зависят от заряда, причем при его росте они уменьшаются (см. рис. 7). Было получено, что области устойчивости увеличиваются как с ростом  $m$ , так и с ростом  $\alpha$  (см. рис. 8 и 9). Увеличение космологической постоянной приводит к росту областей устойчивости гравастаров с тонкой оболочкой (см. рис. 10). Наличие регулярного пространства-времени в качестве внешней геометрии также увеличивает области устойчивости гравастаров (см. рис. 11). Таким образом, степень устойчивости гравастаров с тонкой оболочкой для различных внешних многообразий можно расположить следующим образом:

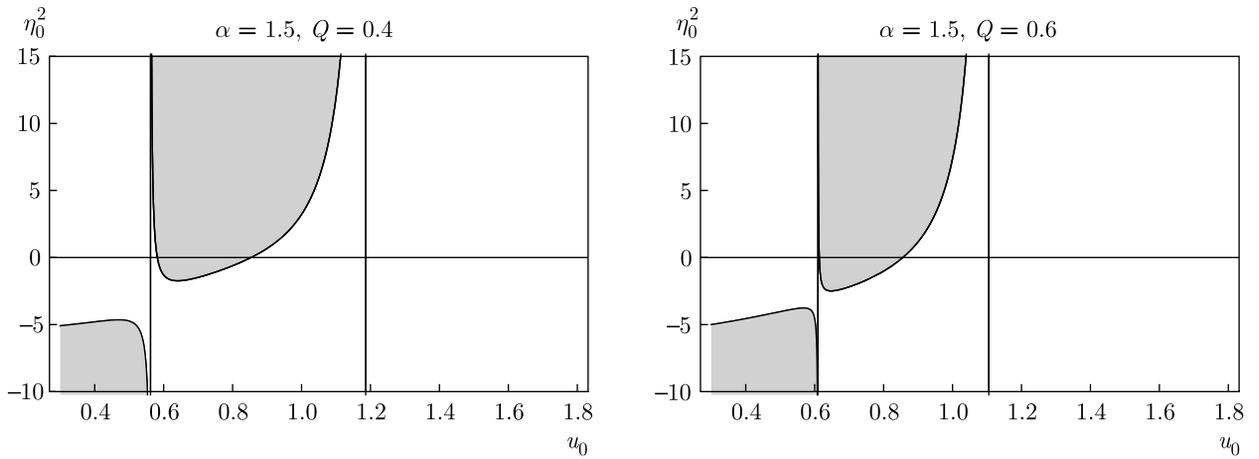


Рис. 7. Области устойчивости гравастаров с тонкой оболочкой для ЧД АВГ при различных значениях заряда ( $\Lambda = 0$ ),  $m = 0.5$

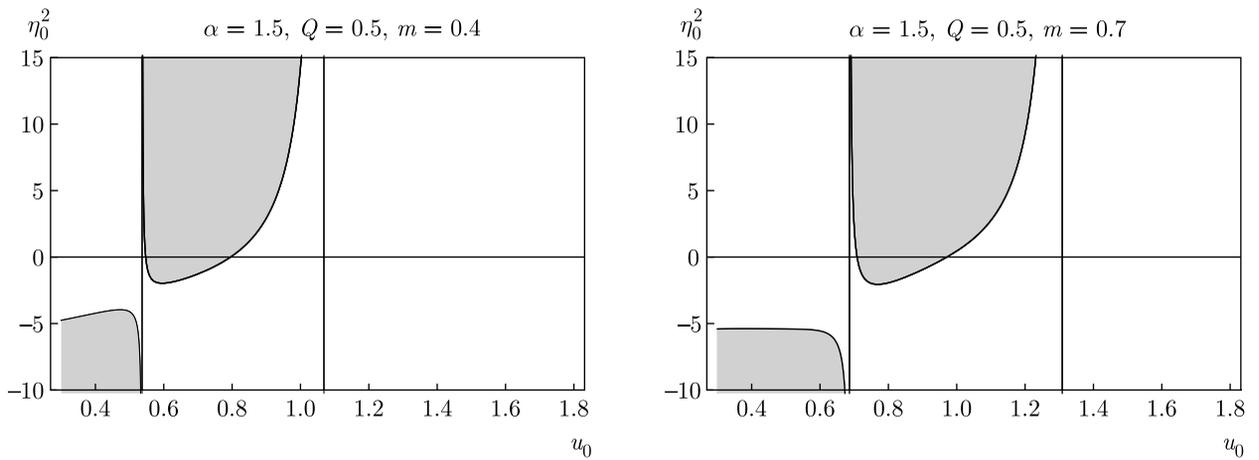


Рис. 8. Области устойчивости гравастаров с тонкой оболочкой для ЧД АВГ при различных значениях массы

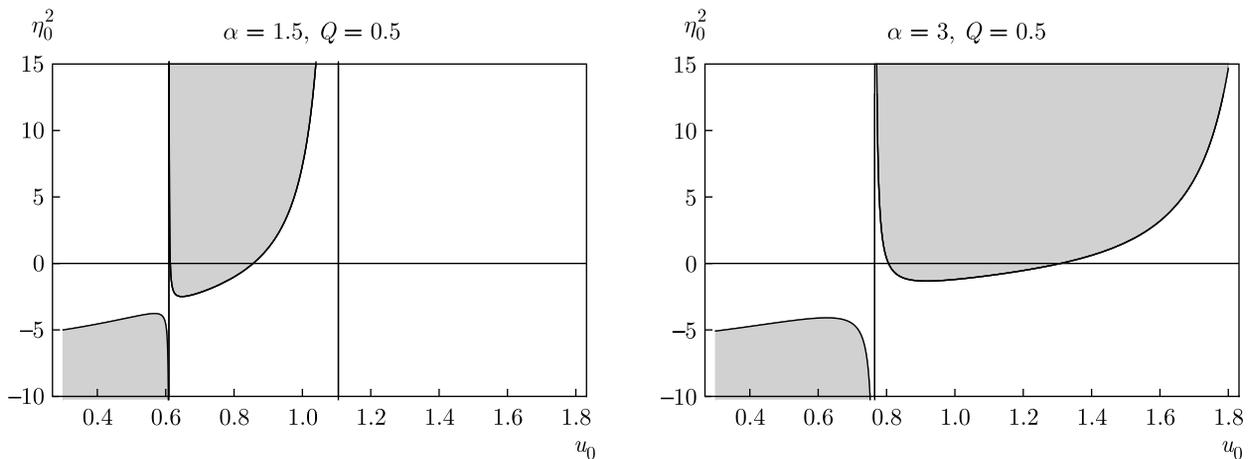


Рис. 9. Области устойчивости гравастаров с тонкой оболочкой для ЧД АВГ при различных значениях  $\alpha$ ,  $m = 0.5$

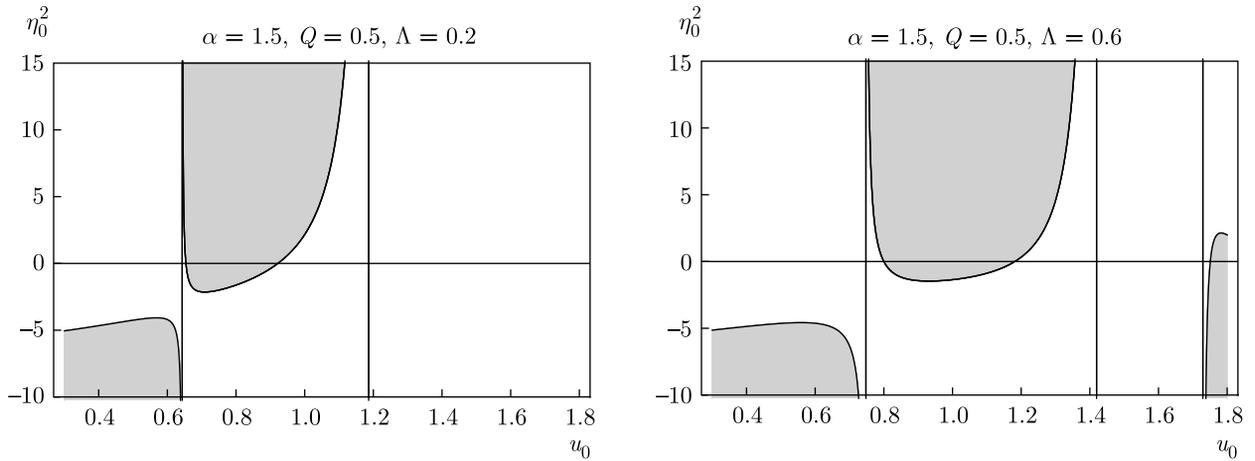


Рис. 10. Области устойчивости гравастаров с тонкой оболочкой для ЧД ABG-DS при различных значениях  $\Lambda$ ,  $m = 0.5$

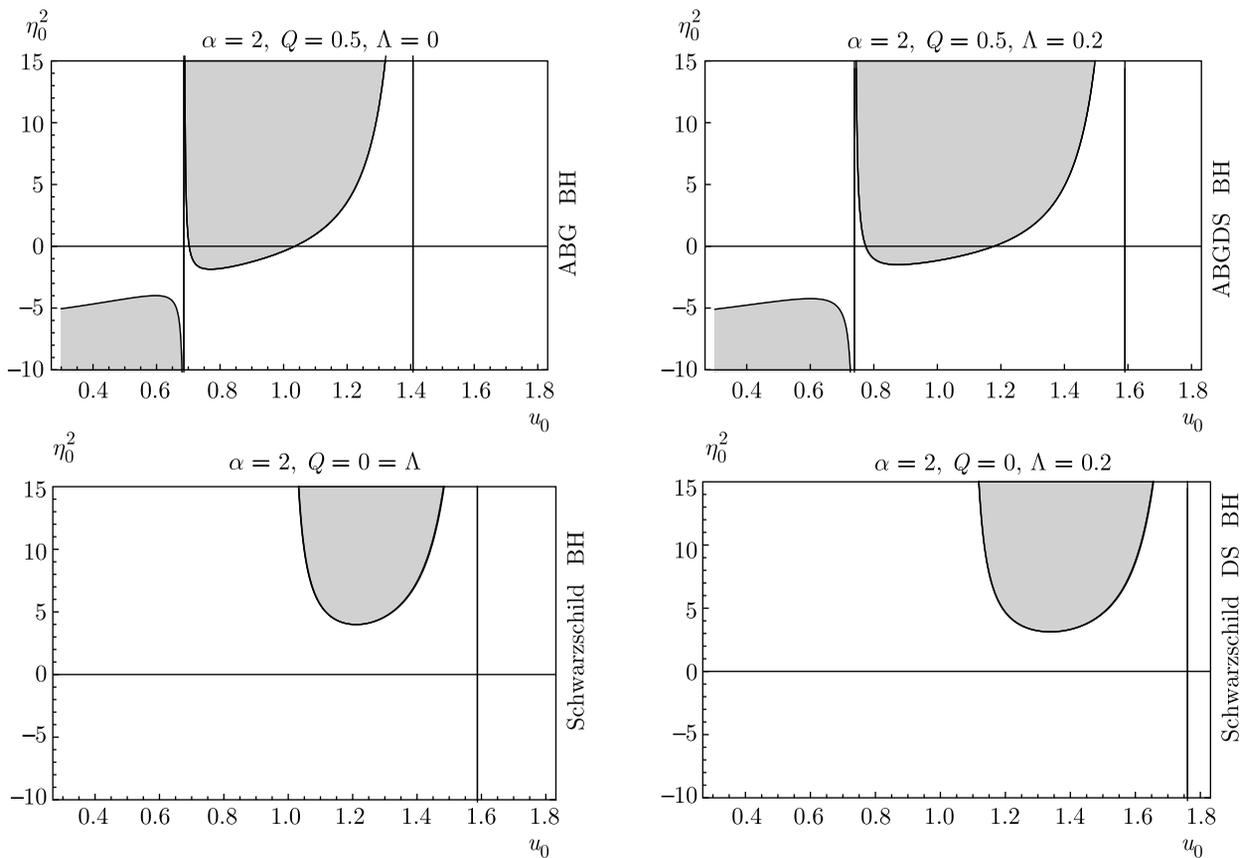


Рис. 11. Области устойчивости гравастаров с тонкой оболочкой при различном выборе внешнего пространства-времени (вверху — ЧД Шварцшильда, внизу слева — ЧД ABG, внизу справа — ЧД ABD-DS),  $m = 0.5$

ЧД Шварцшильда < ЧД Шварцшильда-DS < ЧД ABG < ЧД ABG-DS.

пределение материи влияет на устойчивость. Это уравнение можно записать как

Предположим, что тонкий слой материи удовлетворяет баротропному УС. Оказалось, что это рас-

$$p = \varpi\rho,$$

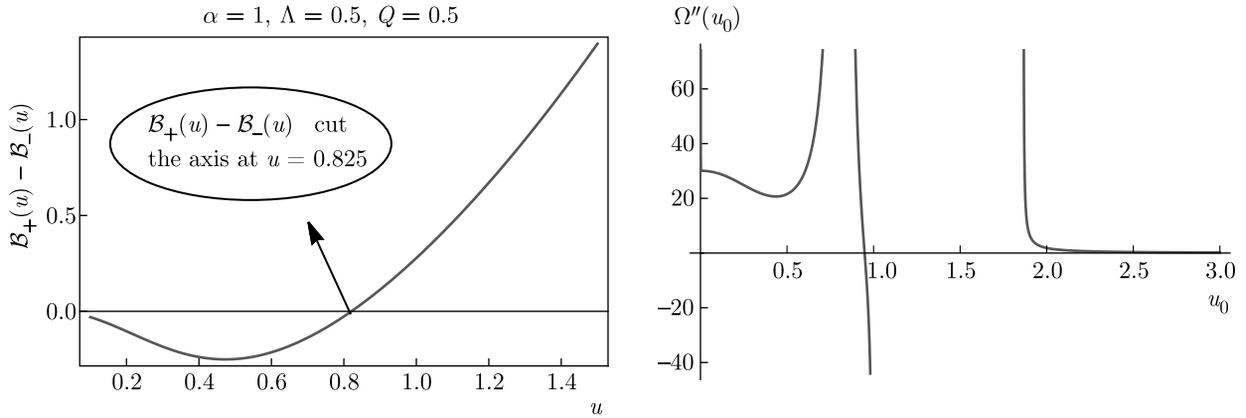


Рис. 12. Зависимости  $B_+(u) - B_-(u)$  (левая панель) и  $\Omega''(u_0)$  (правая панель) при  $m = 0.5$

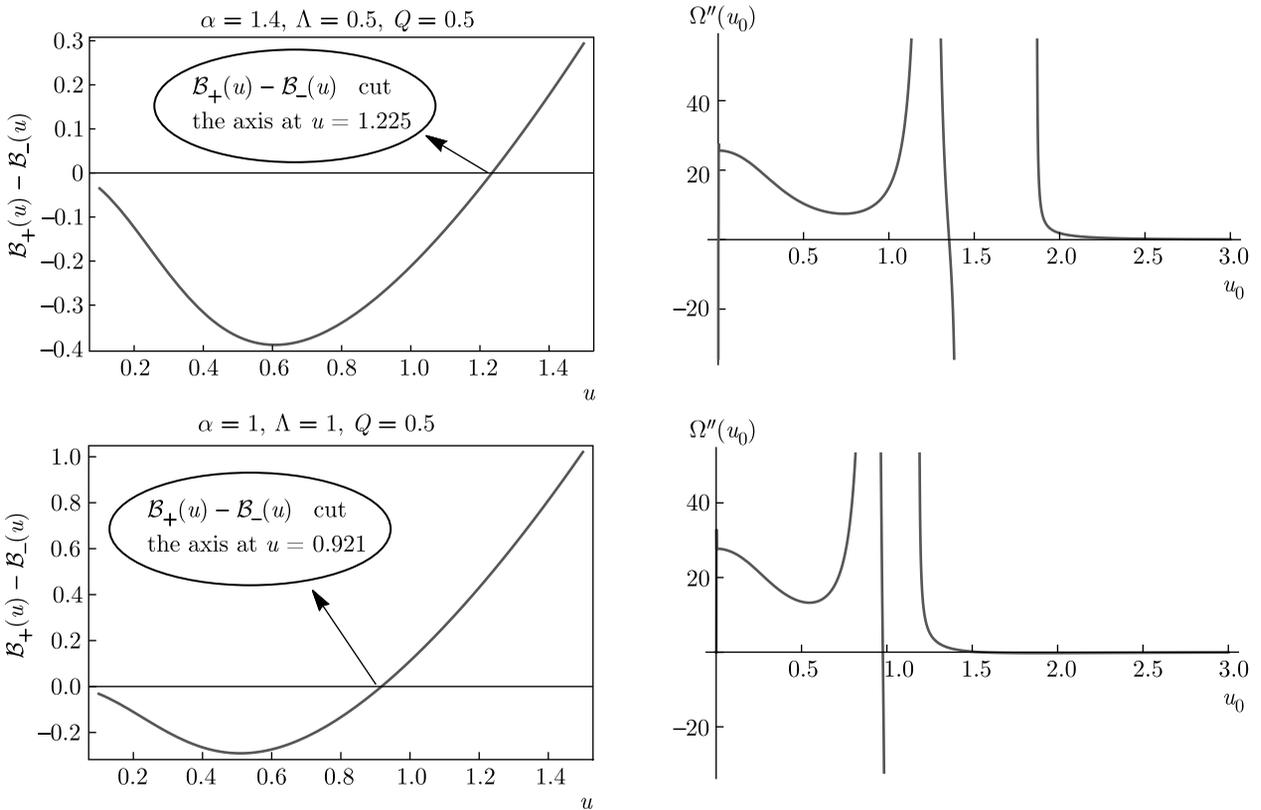


Рис. 13. Зависимости  $B_+(u) - B_-(u)$  (левая панель) и  $\Omega''(u_0)$  (правая панель) для различных значений  $\Lambda$  и  $\alpha$  при  $m = 0.5$

где  $\varpi$  — вещественная константа. Тогда из уравнения сохранения получаем

$$\rho(u) = \rho(u_0) \left(\frac{u_0}{u}\right)^{2(1+\varpi)},$$

а потенциальная функция принимает вид

$$\Omega(u) = -\frac{(B_-(u) - B_+(u))^2 \left(\frac{u_0}{u}\right)^{-2\varpi}}{64\pi^2 \rho_0^2 u_0^2} + \frac{1}{2}(B_-(u) + B_+(u)) - 4\pi^2 \rho_0^2 u_0^2 \left(\frac{u_0}{u}\right)^{2\varpi}.$$

Заметим, что  $\Omega'(u_0)$  обращается в нуль, если и только если

$$\varpi = -\frac{u_0 \mathcal{B}'_-(u_0)}{\mathcal{B}_-(u_0) + 16\pi^2 \rho_0^2 u_0^2 - \mathcal{B}_+(u_0)} - \frac{u_0 \mathcal{B}'_+(u_0)}{-\mathcal{B}_-(u_0) + 16\pi^2 \rho_0^2 u_0^2 + \mathcal{B}_+(u_0)}. \quad (8)$$

Устойчивость анализируется с помощью  $\Omega''(u_0)$  с баротропным УС для пространства-времени ЧД АВГ и АВГ–DS. На рис. 12 (левая панель) показан горизонт событий ( $u = 0.825$ ) для гравастаров с тонкой оболочкой. На правой панели изображены зависимости  $\Omega''(u_0)$  при  $m = 0.5$ . На рисунке видно, что гравастар с тонкой оболочкой демонстрирует устойчивое поведение при  $u_0 < 0.825$  и неустойчивое при  $u_0 > 0.825$  (правая панель). Аналогично, результаты анализа соответствующих горизонта событий и устойчивости гравастара приведены на рис. 13. Видно, что устойчивость гравастара увеличивается с ростом как  $\Lambda$ , так и  $\alpha$ .

#### 4. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

В настоящей работе рассмотрен общий формализм гравастаров с тонкой оболочкой, а именно, с использованием метода сшивания внутреннего (ЧД DS) и внешнего (регулярные ЧД) пространства-времени с помощью техники “cut and paste”. Проанализированы некоторые физические характеристики гравастаров с тонкой оболочкой, результаты приведены на рис. 1–3. Оказалось, что на эти характеристики сильно влияют электромагнитное поле и космологическая постоянная. Динамика гравастаров с тонкой оболочкой рассматривалась с помощью равновесного уравнения состояния, при этом оказалось, что скорости расширения и коллапса для пространства-времени регулярной ЧД АВГ–DS возрастали быстрее, чем для других. Динамика гравастара с тонкой оболочкой зависит от космологической постоянной, массы и заряда, соответствующих внешнему пространству-времени (см. рис. 4–6).

Во-первых, мы нашли области устойчивости для ЧД АВГ, причем оказалось, что они существуют вблизи ожидаемого горизонта событий. Было получено, что области устойчивости уменьшаются с ростом заряда внешнего линейного элемента и увеличиваются с ростом  $\Lambda$  и  $\alpha$  (см. рис. 7–10). Области устойчивости гравастара для пространства-времени ЧД АВГ–DS больше, чем для ЧД Шварцшильда, Шварцшильда-DS и АВГ (см. рис. 11). Во-вторых, мы рассмотрели устойчивость, используя баротропное УС. Было получено, что гравастар с тонкой оболочкой становится устойчивым, если радиус оболочки меньше радиуса ожидаемого горизонта событий

(см. рис. 12, 13). Устойчивость гравастара возрастает с ростом  $\Lambda$  и  $\alpha$ , при этом устойчивость оболочки возрастает, если в качестве внешнего многообразия использовать пространство-время регулярной ЧД. Таким образом, гравастары более устойчивы в случае ЧД АВГ–DS, чем в случае ЧД АВГ.

В работе было получено, что физические характеристики гравастаров с тонкой оболочкой, такие как собственная длина, энтропия и энергетические условия, зависят от толщины оболочки, а также от массы и заряда, что согласуется с литературными данными [19, 32]. Существование областей устойчивости вблизи ожидаемого горизонта событий также согласуется с результатами недавних работ [20, 21, 25]. Кроме того, было получено, что область устойчивости возрастает с ростом космологической постоянной и убывает с ростом заряда. Важно отметить, что результаты настоящей работы продолжают теоретические исследования поведения гравастаров с тонкой оболочкой, проведенные для случая ЧД Бардина [25].

#### ЛИТЕРАТУРА

1. P. Mazur and E. Mottola, Proc. Nat. Acad. Sci. **101**, 9545 (2004); arXiv:gr-qc/0109035.
2. W. Israel, Nuovo Cimento B **44**, 1 (1966).
3. M. Visser, S. Kar, and N. Dadhich, Phys. Rev. Lett. **90**, 201102 (2003).
4. S. H. Mazharimousavi, M. Halilsoy, and Z. Amirabi, Phys. Rev. D **81**, 104002 (2010).
5. F. Rahaman, S. Ray, A. K. Jafry, and K. Chakraborty, Phys. Rev. D **82**, 104055 (2010).
6. M. Sharif and M. Azam, Eur. Phys. J. C **73**, 2407 (2013).
7. M. Sharif and F. Javed, Gen. Relativ. Gravit. **48**, 158 (2016).
8. S. D. Forghani, S. H. Mazharimousavi, and M. Halilsoy, Eur. Phys. J. C **78**, 469 (2018).
9. M. Sharif and F. Javed, Astrophys. Space Sci. **364**, 179 (2019); Int. J. Mod. Phys. D **28**, 1950046 (2019); Ann. Phys. **407**, 198 (2019); Chin. J. Phys. **61**, 262 (2019); Mod. Phys. Lett. A **35**, 1950350 (2019); Int. J. Mod. Phys. A **35**, 2040015 (2020); Ann. Phys. **416**, 168146 (2020); Int. J. Mod. Phys. D **29**, 2050007 (2020); Mod. Phys. Lett. A **39**, 2050309 (2020).
10. M. Sharif, S. Mumtaz, and F. Javed. J. Mod. Phys. A **35**, 2050030 (2020).

11. M. Sharif and F. Javed, *Phys. Scr.* **96**, 055003 (2021); *Astron. Rep.* **65**, 353 (2021).
12. M. Visser and D. L. Wiltshire, *Class. Quantum Grav.* **21**, 1135 (2004).
13. B. M. N. Carter, *Class. Quantum Grav.* **22**, 4551 (2005).
14. D. Horvat, S. Sasa Ilijic, and A. Marunovic, *Class. Quantum Grav.* **26**, 025003 (2009).
15. Usmani et al., *Phys. Lett. B* **701**, 388 (2011).
16. N. Bilic, G. B. Tupper, and R. D. Viollier, *J. Cosmol. Astropart. Phys.* **2006**, 013 (2006).
17. P. Rocha, R. Chan, M. F. A. da Silva, and A. Wang, *J. Cosmol. Astropart. Phys.* **2008**, 10 (2008); *ibid* **2009**, 10 (2009); *ibid* **2011**, 13 (2011).
18. D. Horvat, S. Ilijic, and A. Marunovic, *Class. Quantum Grav.* **28**, 195008 (2011).
19. F. Rahaman, A. A. Usmani, S. Ray, and S. Islam, *Phys. Lett. B* **707**, 319 (2012); *ibid* **717**, 1 (2012).
20. F. S. N. Lobo and R. Garattini, *J. High Energy Phys.* **1312**, 065 (2013).
21. A. Övgün, A. Banerjee, and K. Jusufi, *Eur. Phys. J. C* **77**, 566 (2017).
22. J. M. Bardeen, *Proc. GR5, Tiflis, USSR* (1968).
23. E. Ayón-Beato and A. García, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5056 (1998).
24. M. Wen-Juan, C. Rong-Gen, and S. Ru-Keng, *Commun. Theor. Phys.* **46**, 453 (2006).
25. M. Sharif and F. Javed, *Ann. Phys.* **415**, 168124 (2020).
26. M. Sharif and F. Javed, *J. Exp. Theor. Phys.* **132**, 381 (2021).
27. M. Sharif and F. Javed, *Eur. Phys. J. C* **81**, 47 (2021).
28. T. Tangphati, A. Chatrabhuti, D. Samart, and P. Channuie, *Eur. Phys. J. C* **80**, 722 (2020).
29. S. Ghosh, F. Rahaman, B. K. Guha, and S. Ray, *Phys. Lett. B* **767**, 380 (2017).
30. S. Ray, R. Sengupta, and H. Nimesh, *Int. J. Mod. Phys. D* **29**, 2030004 (2020).
31. F. Rahaman, A. Banerjee, and I. Radinschi, *Int. J. Theor. Phys.* **52**, 2943 (2013).
32. Z. Yousaf, K. Bamba, M. Z. Bhatti, and U. Ghafoor, *Phys. Rev. D* **100**, 024062 (2019).

# К ТЕОРИИ ДВУМЕРНОГО ГОМОГЕННОГО ЗАРОЖДЕНИЯ ЗАРОДЫШЕЙ НА ПЛОТНОУПАКОВАННЫХ ГРЯНЯХ КРИСТАЛЛОВ, РАСТУЩИХ ИЗ ПАРОВОЙ ФАЗЫ

*М. С. Вещунов\**

*Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук (ИБРАЭ РАН)  
115191, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 26 апреля 2021 г.,  
после переработки 26 апреля 2021 г.  
Принята к публикации 30 мая 2021 г.

Критически проанализирована и уточнена традиционная теория двумерного гомогенного зародышеобразования на плоских плотноупакованных гранях бездислокационного кристалла, растущего из пара. Разработан более последовательный подход к проблеме зародышеобразования, основанный на диффузионной теории роста одиночного зародыша на плоской грани, путем распространения теории Зельдовича на двумерный случай. Это приводит к значительному снижению (в  $10^2$ – $10^3$  раз) неравновесного фактора Зельдовича.

DOI: 10.31857/S0044451021100084

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В соответствии с теорией Косселя [1], при росте плоских плотноупакованных поверхностей бездислокационного кристалла из пара конденсация происходит путем последовательного роста монослоев на поверхности кристалла; а образование таких монослоев может происходить в результате двумерного гомогенного зародышеобразования. Процесс образования двумерных зародышей в форме диска на кристаллической грани исследовался в соответствии с общей теорией зародышеобразования [2–4] в работе [5]. Согласно этой теории, после исчезновения вицинальных (ступенчатых) граней с высокими индексами на начальной стадии роста кристалл будет продолжать расти путем двумерного зарождения новых молекулярных слоев на гранях плотнейшей упаковки (см. рисунок). Как и при любом зародышеобразовании, вероятность образования двумерных зародышей является очень чувствительной функцией пересыщения паровой фазы (с парциальным давлением  $p$ ) и экспоненциально мала вблизи точки насыщения (с парциальным давлением  $p_0$ ).

Аналогичный подход был применен в работах [6, 7] к рассмотрению выпадения зародышей в пере-



Зародыши в форме диска моноатомной толщины и атомом на плоской грани кристалла

сыщенном твердом растворе путем диффузии атомов примеси, конденсирующихся в зародышах новой фазы. В этой теории скорость конденсации атомов определялась энергией активации диффузии и средней концентрацией атомов в сплаве, по аналогии с зарождением капель в паре. Однако Кабрера и Бартон [8] отметили, что это предположение не совсем верно, поскольку предполагает однородность пересыщения по всему объему, которая нарушается в случае диффузионного массопереноса.

Классическая теория зародышеобразования [2–5], в которой предполагается, что зародыши новой фазы критического размера находятся в равновесии с исходной фазой, дает выражение для скорости нуклеации

$$\dot{N} = N^* \omega^* \quad (1)$$

Здесь  $\omega^*$  — частота присоединения атомов к критическим зародышам,  $N^*$  — концентрация зародышей

\* E-mail: vms@ibrae.ac.ru

критического радиуса  $r^*$ , вычисленная в [3] как

$$N^* = \bar{n} \exp\left(-\frac{\Delta G^*}{kT}\right), \quad (2)$$

где  $\bar{n}$  — концентрация молекул пара (мономеров) в газовой фазе (с парциальным давлением  $p$ ),  $\Delta G^*$  — свободная энергия образования критического зародыша. Зельдович [9] уточнил эту теорию, учитывая неравновесность критических зародышей, приводящую к появлению дополнительного множителя  $Z$ , так называемого фактора Зельдовича, в выражении для скорости зарождения:

$$\dot{N} = ZN^*\omega^*. \quad (3)$$

Двумерная теория скорости зародышеобразования была разработана Паундом [10] (см. также [11]), который модифицировал классическое выражение (2) для  $N^*$ , рассматривая  $\bar{n}$  как концентрацию адсорбированных атомов (адатомов) на поверхности кристалла, находящихся в равновесии с паровой фазой, а

$$\Delta G^* \approx \pi \varepsilon r^* = \frac{\pi \varepsilon^2 s'}{kT \ln \alpha}$$

определял как свободную энергию образования критического дискообразного зародыша (мономолекулярной высоты  $l_0$ ) на поверхности, где  $\varepsilon$  — энергия на единицу длины края мономолекулярной ступени,  $s' \approx l_0^2$  — удельная площадь поверхности, приходящаяся на один адатом,

$$\alpha = \frac{p}{p_0} = \frac{\bar{n}}{n_0}$$

— коэффициент насыщения (см. также разд. 2).

В этой теории

$$\omega^* \approx \frac{1}{4} n 2\pi r^* l_0$$

— частота, с которой адатомы присоединяются к критическому зародышу, определяемая произведением количества адатомов, расположенных в ближайшей окрестности к зародышу,  $\approx 2n\pi r^* l_0$ , и частоты их скачков по поверхности,

$$\nu \approx \nu_s \exp\left(-\frac{\Delta G_{sd}}{kT}\right),$$

умноженным на вероятность скачка в направлении критического зародыша, равную  $1/4$ . Здесь  $\nu_s$  — частота колебаний адатомов, а величина  $G_{sd}$  предполагается равной энергии активации поверхностной диффузии; таким образом, с учетом выражения для коэффициента диффузии поверхности,

$$D_s \approx \frac{1}{4} l_{0s}^2 \exp\left(-\frac{\Delta G_{sd}}{kT}\right),$$

выражение для  $\omega^*$  принимает вид

$$\omega^* \approx 2\pi r^* \bar{n} D_s l_0^{-1}. \quad (4)$$

В дальнейшем этот подход был усовершенствован Хирсом [12], который рассчитал фактор Зельдовича для дискообразного зародыша на поверхности в рамках общего подхода Паунда [10] как

$$Z = \left(\frac{\Delta G^*}{4\pi kT i^* s'}\right)^{1/2}, \quad (5)$$

где

$$i^* \approx \frac{\pi r^{*2}}{s'}$$

— число адатомов в критическом зародыше, и оценил его как  $Z \cong 10^{-2}$ . Суперпозиция уравнений (2)–(5) приводит к выражению

$$\dot{N} \approx s' \frac{D_s}{l_0} \bar{n}^2 \sqrt{\frac{\varepsilon}{r^* kT}} \exp\left(-\frac{\pi \varepsilon r^*}{kT}\right). \quad (6)$$

По аналогии с рассмотрением в [6, 7] трехмерного зародышеобразования в твердом растворе при конденсации атомов примеси, Паунд и Хирс предполагали равномерное распределение адатомов по поверхности, что с точки зрения [8] является ошибочным в случае существования поверхностной диффузии. Действительно, в терминах числа Кнудсена,  $\text{Kn} = \lambda/r$  (где  $\lambda$  — длина свободного пробега мономеров, или средняя длина скачка,  $r$  — радиус зародыша), этот подход соответствует свободномолекулярному режиму,  $\text{Kn} \gg 1$ , и может быть хорошо обоснован для классической задачи конденсации зародышей из пара.

Однако в случае решеточной диффузии в кристалле или по поверхности кристалла, когда  $\lambda \approx l_0$ , справедливым оказывается противоположное неравенство,  $\text{Kn} \approx l_0/r \ll 1$ , что соответствует «континуальному», или диффузионному, режиму массопереноса. В этом случае диффузионный профиль концентрации адатомов вокруг зародыша имеет характерный размер  $x_s = (D_s \tau_s)^{1/2}$ , определяемый как среднеквадратичное смещение адатома за время его средней жизни  $\tau_s$  на поверхности перед испарением с поверхности ([8]; см. также ниже). Соответственно, подход Паунда–Хирса [10, 12] для зарождения на грани кристалла, основанный на предположении о равномерном распределении адатомов на поверхности, становится справедливым лишь в пределе  $x_s \sim l_0$ , когда диффузионные профили исчезают.

Следовательно, в этом случае рост одиночного зародыша на плоской грани контролируется поверхностным диффузионным переносом адатомов, связанным с неоднородным распределением адатомов

вокруг зародыша,  $n(r)$ , и вычисляемым в рамках модели Кабреры и Бартона [8] (см. также [13]). Следует заметить, что при решении задачи диффузии адатомов к растущему зародыщу проблема зародышеобразования рассматривалась в работе [8] лишь на качественном уровне.

Легко понять, что реализация предложенного в [8, 13] механизма роста зародышей, адекватно учитывающего диффузионный перенос адатомов к растущему зародыщу, должна существенно снизить скорость нуклеации по сравнению с упрощенным подходом [10–12]. В частности, это позволяет предположить, что фактор Зельдовича, входящий в (3), может быть значительно переоценен в рамках традиционного подхода и, следовательно, должен быть пересчитан с использованием диффузионного механизма роста зародышей.

## 2. СКОРОСТЬ НУКЛЕАЦИИ

Для корректного рассмотрения зародышеобразования в пересыщенном твердом растворе (первоначально исследованном в [6, 7]) Ландау и Лифшиц [14] применили теорию Зельдовича [9] к механизму образования зародышей, который адекватно учитывает диффузионный перенос атомов к растущему ядру. Модификация теории [9, 14] применительно к двумерному зарождению на поверхности грани может быть осуществлена следующим образом.

Минимальная работа, необходимая для образования круглого зародыша (террасы) радиусом  $a$ , составляет

$$R_{min}(a) = -\frac{\pi a^2}{s'}(\mu - \mu') + 2\pi a\varepsilon, \quad (7)$$

где  $\varepsilon$  — энергия на единицу длины края террасы,  $s' \approx l_0^2$  — удельная площадь адатома,  $\Delta\mu = \mu - \mu'$  — разность химических потенциалов в двух фазах адатомов (поверхностный решеточный газ и плотный моноатомный слой соответственно). Критический радиус зародыша, который дает экстремум для  $R_{min}$  в случае  $\Delta\mu > 0$ , равен

$$a_{cr} = \frac{\varepsilon s'}{\Delta\mu} = \frac{\varepsilon s'}{kT \ln\left(\frac{\bar{n}}{n_{0\infty}}\right)} = \frac{\varepsilon s'}{kT \ln \alpha}, \quad (8)$$

где  $\bar{n}$  и  $n_{0\infty}$  — соответственно средняя (вдали от зародыша) и равновесная (вблизи зародыша бесконечного радиуса) концентрации адатомов,  $\alpha$  — коэффициент насыщения, определяемый как

$$\alpha = \frac{\bar{n}}{n_{0\infty}} = \frac{p}{p_0} \geq 1,$$

$p$  — фактическое парциальное давление пара,  $p_0$  — значение насыщения.

В этих обозначениях минимальная работа принимает вид

$$R_{min}(a) = \pi a_{cr}\varepsilon - \frac{\pi\varepsilon}{a_{cr}}(a - a_{cr})^2, \quad (9)$$

при этом равновесное число  $N(n)$  (на единицу площади) зародышей с  $n$  адатомами,  $n \gg 1$ , оценивается (см. Приложение) как

$$N(n) \approx n_{0\infty} \exp\left(-\frac{R_{min}}{kT}\right). \quad (10)$$

Функция равновесного распределения зародышей по размерам  $f_0(a) da$ , определяемая как количество зародышей в диапазоне размеров от  $a$  до  $a + da$ , может быть пересчитана из уравнения (10) как

$$f_0(a) da = N(i) di = N\left(i = \frac{\pi a^2}{s'}\right) \frac{2\pi a da}{s'},$$

и, таким образом, принимает вид

$$f_0(a) = f_0(a_{cr}) \frac{a}{a_{cr}} \exp\left(\frac{\pi\varepsilon}{kT a_{cr}}(a - a_{cr})^2\right). \quad (11)$$

Здесь

$$f_0(a_{cr}) \approx \frac{2\pi a_{cr}}{s'} n_{0\infty} \exp\left(-\frac{\pi\varepsilon a_{cr}}{kT}\right). \quad (12)$$

Используя эту функцию, скорость генерации критических зародышей (на единицу площади) можно рассчитать как [14]

$$\dot{N} = \left(\int_0^\infty \frac{da}{f_0(a) B(a)}\right)^{-1}, \quad (13)$$

где

$$B(a) = -\frac{kT}{R'_{min}(a)} \left(\frac{da}{dt}\right)_{macro}$$

и

$$R'_{min}(a) = -\frac{2\pi\varepsilon}{a_{cr}}(a - a_{cr}).$$

Скорость роста двумерного зародыша, контролируемая уравнением поверхностной диффузии адатомов, в терминах безразмерной концентрации

$$\psi(r) = \frac{\bar{n} - n(r)}{n_{0\infty}} = \alpha - \alpha(r)$$

принимает вид

$$x_s^2 \nabla^2 \psi(r) = \psi(r),$$

где

$$x_s = (D_s \tau_s)^{1/2}$$

— диффузионная длина [8, 13]. Решение этого уравнения

$$\psi(r) = \psi(a) \frac{I_0\left(\frac{r}{x_s}\right)}{I_0\left(\frac{a}{x_s}\right)}, \quad r < a,$$

$$\psi(r) = \psi(a) \frac{K_0\left(\frac{r}{x_s}\right)}{K_0\left(\frac{a}{x_s}\right)}, \quad r > a,$$

с равновесным граничным условием

$$n(a) = n_{0a} = n_{0\infty} \exp\left(\frac{\varepsilon s'}{akT}\right)$$

определяет диффузионный поток к краю зародыша,

$$J_s = -2\pi r D_s \left. \frac{dn}{dr} \right|_{r=a+0} + 2\pi r D_s \left. \frac{dn}{dr} \right|_{r=a-0} =$$

$$= -\frac{2\pi D_s n_{0\infty} \psi(a)}{K_0\left(\frac{a}{x_s}\right) I_0\left(\frac{a}{x_s}\right)},$$

и скорость роста закритического («макро») зародыша,

$$\left(\frac{da}{dt}\right)_{macro} = \frac{s' 2\pi D_s n_{0\infty} \psi(a)}{2\pi a K_0\left(\frac{a}{x_s}\right) I_0\left(\frac{a}{x_s}\right)} =$$

$$= \frac{s' D_s}{a K_0\left(\frac{a}{x_s}\right) I_0\left(\frac{a}{x_s}\right)} (\bar{n} - n_{0\infty}) \frac{a - a_{cr}}{a},$$

или при  $a/x_s \gg 1$

$$\left(\frac{da}{dt}\right)_{macro} \approx \frac{2s' D_s}{x_s} (\bar{n} - n_{0\infty}) \frac{a - a_{cr}}{a}. \quad (14)$$

Интегрирование уравнения (13), в пренебрежении гораздо более медленной зависимостью от  $a$  предэкспоненциального множителя, в рассматриваемом двумерном случае приводит к выражению

$$\dot{N} \approx B(a_{cr}) f_0(a_{cr}) \times$$

$$\times \left( \int_0^\infty \exp\left[-\left(\frac{\pi\varepsilon}{kT a_{cr}} (a - a_{cr})^2\right)\right] da \right)^{-1} \approx$$

$$\approx \frac{\alpha - 1}{\ln \alpha} 2s' \frac{D_s}{x_s} n_{0\infty}^2 \sqrt{\frac{\varepsilon}{a_{cr} kT}} \exp\left(-\frac{\pi\varepsilon a_{cr}}{kT}\right), \quad (15)$$

или в пределе  $\alpha \approx 1$ , соответствующем

$$n_{0\infty} \approx \bar{n}$$

и

$$\frac{\alpha - 1}{\ln \alpha} \approx 1,$$

сводится к выражению

$$\dot{N} \approx 2s' \frac{D_s}{x_s} n_{0\infty}^2 \sqrt{\frac{\varepsilon}{a_{cr} kT}} \exp\left(-\frac{\pi\varepsilon a_{cr}}{kT}\right). \quad (16)$$

Сравнивая этот результат с формулой (6), выведенной Хирсом [10], можно видеть, что при диффузионном подходе в (16) возникает дополнительный множитель  $2l_0/x_s$ , который в [13] оценивался как  $10^{-2}$ – $10^{-3}$ . Это подтверждает сделанное выше предположение, что входящий в уравнение (3) фактор Зельдовича, вычисленный в [10] как

$$Z = \frac{kT}{2\pi\varepsilon l_0} (\ln \alpha)^{3/2} \cong 10^{-2},$$

был переоценен в  $10^{-2}$ – $10^{-3}$  раз и в итоге составляет

$$Z = \frac{kT}{2\pi\varepsilon x_s} (\ln \alpha)^{3/2} \approx 10^{-4}$$
– $10^{-5}$ .

### 3. СКОРОСТЬ РОСТА ПРИ МАЛОМ ПЕРЕСЫЩЕНИИ

При малом пересыщении,  $\alpha \approx 1$ , временем роста критического зародыша (до образования монослоя) можно пренебречь по сравнению с обратной скоростью его генерации  $\dot{N}^{-1}$ , определяемой уравнением (16), которая в этом (так называемом «моноядерном») случае и определяет скорость перемещения грани,

$$u_f = \dot{N} S l_0 \approx 2\pi D_s L^2 s' \frac{l_0}{x_s} n_{0\infty}^2 \sqrt{\frac{\varepsilon}{a_{cr} kT}} \times$$

$$\times \exp\left(-\frac{\pi\varepsilon a_{cr}}{kT}\right), \quad (17)$$

где  $S \approx \pi L^2$  — площадь грани.

Подставляя (8) в (17), получаем явную зависимость скорости роста от степени насыщения, которую можно использовать для сравнения с измерениями,

$$u_f \approx 2\pi D_s L^2 s' \frac{l_0}{x_s} n_{0\infty}^2 \sqrt{\frac{\ln \alpha}{s'}} \times$$

$$\times \exp\left(-\frac{\pi\varepsilon^2}{(kT)^2} \frac{s'}{\ln \alpha}\right) \approx 2\pi D_s L^2 \frac{s'}{x_s} n_{0\infty}^2 \sqrt{\ln \alpha} \times$$

$$\times \exp\left(-\frac{\pi\varepsilon^2}{(kT)^2} \frac{s'}{\ln \alpha}\right). \quad (18)$$

Аналогичная попытка расчета скоростей зарождения и роста граней в рамках диффузионного подхода была предпринята в работе [15]. Однако альтернативный, упрощенный метод расчета привел к ошибочному предсказанию зависимости скорости роста от степени насыщения  $\alpha$  (которая впоследствии была использована в работе [16] для интерпретации экспериментальных наблюдений). А именно, по сравнению с уравнениями (15) и (18) в [15] был получен дополнительный множитель  $\ln \alpha$ , который стремится к 0 при  $\alpha \rightarrow 1$  и, таким образом, значительно снижает скорости зародышеобразования и роста грани вблизи точки насыщения. В результате полученное соотношение для скорости зародышеобразования не сходилась к классическому выражению (6) в пределе  $x_s \sim l_0$  (когда диффузионный профиль вокруг ядра исчезает, см. разд. 1). Кроме того, следуя модифицированной теории Паунда – Хирса [11] (см. Приложение), в расчетах [15] был опущен фактор  $\bar{n}s' \ll 1$ , происходящий из определения (2); это может частично компенсировать лишний множитель  $\ln \alpha \ll 1$  в пределе  $\alpha \rightarrow 1$ , но при этом будет сильно завышать скорость нуклеации при больших пересыщениях.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Критически проанализирована и уточнена классическая теория [10–12] гомогенного образования двумерных зародышей на плоских плотноупакованных гранях бездислокационного кристалла, растущего из пара. В частности, было показано, что подход Паунда – Хирса [10–12] для определения скорости зародышеобразования на грани кристалла, основанный на предположении об однородном распределении адатомов вокруг ядра, оказывается справедливым лишь в пределе  $x_s \sim l_0$ , где  $x_s$  – диффузионная длина,  $l_0$  – постоянная решетки. Однако этот предел вряд ли может быть достигнут в реальном случае роста кристалла из паровой фазы (с типичным значением  $x_s/l_0 \sim 10^2\text{--}10^3$  [13]).

Соответственно, более последовательный подход к проблеме зародышеобразования, основанный на диффузионной теории роста одиночного зародыша на плоской грани [8, 13], был развит в настоящей статье путем распространения формализма Зельдовича [9, 14] на двумерный случай. В результате показано, что скорость нуклеации, рассчитанная Хирсом [10], была занижена на дополнительный множитель  $l_0/x_s$ , что можно интерпретировать как значительное завышение (в  $10^2\text{--}10^3$  раз) неравновесного фак-

тора Зельдовича (входящего в выражение для скорости нуклеации (1) и оцениваемого в традиционном подходе как  $Z \cong 10^{-2}$ ). Этот результат становится существенным для анализа экспериментальных измерений скорости роста кристаллов вблизи точки насыщения [16].

#### ПРИЛОЖЕНИЕ

Для зародышеобразования в газовой фазе равновесное число ядер  $N_i$  (состоящих из  $i$  мономеров) рассчитывалось в работе [3] в терминах химического равновесия,  $iC_1 \leftrightarrow C_i$ , между мономерами и критическими зародышами, рассматриваемыми как смесь двух идеальных газов  $C_i$  и  $C_1$ , в виде

$$i\mu_1 = \mu_i, \tag{A.1}$$

где  $\mu_{1,i}$  – химические потенциалы двух компонент (соответственно  $C_1$  и  $C_i$ ).

Для зародышеобразования в кристаллической решетке (3d или 2d) условие равновесия между мономерами и кластерами,  $C_1$  и  $C_i$ , распределенными по кристаллической решетке (а не в газовой фазе), следует уточнить. Из-за их взаимодействий (столкновений) термодинамические потенциалы системы не равны сумме термодинамических потенциалов для каждого компонента, и свободная энергия Гиббса может быть вычислена аналогично рассмотренному в [17] случаю слабого раствора следующим образом.

Пусть  $\Phi_0(P, T, N) = N_1\mu_0(P, T)$  – свободная энергия Гиббса решеточного газа мономеров («растворителя»), где  $\mu_0(P, T)$  – химический потенциал мономеров, а  $N_1$  – их количество. Пусть  $\alpha$  обозначает небольшое изменение, которое произошло бы в свободной энергии при добавлении в растворитель одного кластера («растворенной молекулы»). Из-за взаимодействий кластеров с мономерами (например, в результате пермутаций (перестановок) мономеров между кластерами, рассмотренных в [18]) это значение следует рассматривать как функцию от  $N_1$ , т. е.  $\alpha = \alpha(P, T, N_1)$ . Благодаря тому, что  $N_i \ll N_1$ , взаимодействиями между кластерами можно пренебречь и, таким образом, свободная энергия системы принимает вид

$$\Phi = N_1\mu_0(P, T) + N_i\alpha(P, T, N_1) + kT \ln(N_i!), \tag{A.2}$$

где последнее слагаемое учитывает идентичность всех кластеров одного сорта  $i$ . Это выражение в точности совпадает со свободной энергией слабого раствора, что приводит к следующим выражениям, по-

лученным в [17]: для химического потенциала растворителя

$$\mu_1 = \mu_0 - kT c_i \approx \mu_0, \quad (\text{A.3})$$

где

$$c_i = \frac{N_i}{N_1 + N_i} \approx \frac{N_i}{N_1} \ll 1,$$

и растворенного вещества

$$\mu_i = kT \ln c_i + \psi_i, \quad (\text{A.4})$$

где  $\psi_i$  представляет собой свободную энергию («локализованного») кластера, а логарифмический член  $kT \ln c_i$  учитывает случайное распределение («делокализацию») кластеров в растворенном веществе. В результате закон действующих масс, полученный из условия равновесия (A.1), принимает вид

$$c_i \approx \frac{N_i}{N_1} = K(T) \quad (\text{A.5})$$

с константой равновесия

$$K_i(T) = \exp\left(-\frac{\psi_i - i\mu_0}{kT}\right) = \exp\left(-\frac{\Delta G_i}{kT}\right), \quad (\text{A.6})$$

где

$$\Delta G_i = R_{min}(a)$$

— свободная энергия (или минимальная работа) образования (локализованного) кластера радиуса

$$a = \left(\frac{is'}{\pi}\right)^{1/2},$$

так что

$$c_i = c_1 \exp\left(-\frac{\Delta G_i}{kT}\right). \quad (\text{A.7})$$

Если концентрации других кластеров  $C_k$  с  $k \neq i$  также малы,  $c_k \ll 1$ , их вклады в полную свободную энергию системы линейны и, таким образом, их концентрации подчиняются соотношениям, подобным уравнению (A.7).

Как отмечено в [14], термодинамическое рассмотрение функции распределения зародышей по размерам справедливо только в применении к полному статистическому равновесию и, таким образом, может быть расширено для приближенного рассмотрения неравновесных (метастабильных) систем только в небольшой окрестности состояния равновесия (насыщения), т. е. при

$$\alpha = \frac{P}{P_0} \approx 1.$$

В этом пределе концентрация мономеров близка к их равновесной (насыщенной) концентрации,

$$c_1 = \frac{n_{0\infty}}{\alpha} \approx n_{0\infty},$$

что приводит к формуле (10),

$$c_i \approx n_{0\infty} \exp\left(-\frac{\Delta G_i}{kT}\right). \quad (\text{A.8})$$

В последующих после [10, 12] статьях Хирс и Паунд модифицировали уравнение (A.7), полагая, что при выводе этого уравнения мономеры и кластеры рассматривались как локализованные (см., например, [11]). По этой причине они ошибочно добавили к свободной энергии образования кластеров  $\Delta G_i$  статистический член, отвечающий за «делокализацию» кластеров по поверхности, что в конечном итоге привело к дополнительному коэффициенту  $N_0/N_1$  ( $N_0$  — число узлов в поверхностной решетке) или замене  $c_1$  на 1 в уравнении (A.7). Таким образом, в модифицированном подходе эффект делокализации кластеров учитывался дважды (первый раз в уравнении (A.4)), что привело к сильному завышению окончательного результата в  $N_0/N_1$  раз.

Чтобы избежать этого недоразумения и дополнительно обосновать (A.8), этот результат может быть независимо подтвержден в кинетическом подходе, который был использован в работе [3] для рассмотрения неравновесных концентраций кластеров в приближении Фоккера–Планка (приводящего к возникновению фактора Зельдовича [9]). Для расчета равновесного распределения кластеров по размерам этот подход можно свести к рассмотрению нулевого потока в «пространстве размеров»,  $J = 0$  (вместо ненулевого постоянного потока в неравновесном стационарном случае [3]). В этом пределе роста кластеров не происходит, поскольку скорости образования и распада кластеров любого размера равны, что в терминах модели Хирса [12], представленной в разд. 1, принимает вид

$$J = J_+ - J_- = \omega_{i-1}c_{i-1} - \omega'_i c_i = 0, \quad (\text{A.9})$$

где  $J_+$  — поток мономеров, конденсирующихся на кластерах  $C_{i-1}$ ,  $J_-$  — поток испарения из кластеров  $C_i$ . Как отмечено в работе [12], поток испарения из кластера равен потоку атомов, конденсирующихся в кластер из популяции мономеров, находящихся в равновесии с кластером, и, таким образом,

$$\omega'_i = \omega_i \frac{n_{0a}}{n},$$

где

$$n_{0a} = n_{0\infty} \exp\left(\frac{\varepsilon s'}{akT}\right)$$

(см. обозначения в разд. 2), и с достаточной точностью  $\omega_i \approx \omega_{i-1}$ . Таким образом, из уравнения (A.9) получаем

$$\frac{c_{i-1}}{c_i} = \frac{P_0}{P} \exp\left(\frac{\varepsilon s'}{akT}\right) = \frac{1}{\alpha} \exp\left(\frac{\varepsilon s'}{akT}\right) = \frac{1}{\alpha} \exp\left(\frac{\varepsilon s'^{1/2} \pi^{1/2}}{i^{1/2} kT}\right), \quad (\text{A.10})$$

или аналогично расчетам в 3d-случае [19]

$$\frac{c_1}{c_i} = \frac{c_1}{c_2} \frac{c_2}{c_3} \dots \frac{c_{i-1}}{c_i} \approx \frac{1}{\alpha^{i-1}} \times \exp\left(\frac{\varepsilon s'^{1/2} \pi^{1/2}}{kT} \sum_{k=2}^i k^{-1/2}\right) \approx \frac{1}{\alpha^{i-1}} \exp\left(\frac{\varepsilon s'^{1/2} \pi^{1/2}}{kT} \int_0^i k^{-1/2} dk\right), \quad (\text{A.11})$$

в результате чего

$$c_i = c_1 \alpha^{i-1} \exp\left(-\frac{2\varepsilon s'^{1/2} \pi^{1/2} i^{1/2}}{kT}\right) = n_{0\infty} \alpha^i \exp\left(-\frac{2\varepsilon s'^{1/2} \pi^{1/2} i^{1/2}}{kT}\right) = n_{0\infty} \exp\left(-\frac{2\varepsilon s'^{1/2} \pi^{1/2} i^{1/2}}{kT} + i \ln \alpha\right) = n_{0\infty} \exp\left(-\frac{\Delta G_i}{kT}\right), \quad (\text{A.12})$$

что в точности совпадает с формулой (A.8).

**Благодарности.** Автор благодарит В. И. Тарасова (ИБРАЭ РАН) за внимательное чтение рукописи и ценные замечания.

### ЛИТЕРАТУРА

1. W. Kossel, Nachr. Ges. Wiss. Goettingen **2**, 135 (1927).
2. M. Volmer, *Kinetics of Phase Formation (Kinetik der Phasenbildung)*, Dresden and Leipzig, Steinkopf (1939); <https://apps.dtic.mil/sti/pdfsADA800534.pdf>.
3. M. Volmer and A. Weber, Z. Phys. Chem. **119**, 277 (1926).
4. R. Becker and W. Doering, Ann. Phys. **24**, 719 (1935).
5. R. Kaishew and I. Stranski, Z. Phys. Chem. B **26**, 317 (1934).
6. J. Frenkel, Sowjet Phys. **1**, 498 (1932).
7. R. Becker, Ann. Phys. **32**, 128 (1938).
8. N. Cabrera and W. K. Burton, Disc. Faraday Soc. **5**, 40 (1949).
9. Ja. B. Zeldovich, Acta Physicochim. URSS **18**, 1 (1943).
10. G. M. Pound, M. T. Simnad, and L. Yang, J. Chem. Phys. **22**, 1215 (1954).
11. J. P. Hirth and G. M. Pound, *Condensation and Evaporation: Nucleation and Growth Kinetics*, Macmillan, London (1963).
12. J. P. Hirth, Acta Met. **7**, 755 (1959).
13. W. K. Burton, N. Cabrera, and F. C. Frank, Phil. Trans. Roy. Soc. London, Ser. A, Math. Phys. Sci. **243**(866), 299 (1951).
14. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. 10, *Физическая кинетика*, Наука, Москва (1978).
15. В. Lewis, J. Cryst. Growth **21**, 29 (1974).
16. В. Lewis, J. Cryst. Growth **21**, 40 (1974).
17. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. V, *Статистическая физика*, ч. 1, Наука, Москва (1976).
18. Н. Reiss and J. L. Katz, J. Chem. Phys. **46**, 2496 (1967).
19. S. K. Friedlander, *Smoke, Dust and Haze: Fundamentals of Aerosol Behavior*, New York (1977).

# САМОДИФФУЗИЯ В ЖИДКИХ И ТВЕРДЫХ СПЛАВАХ СИСТЕМЫ Ti–Al: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

*Г. М. Поледаев\**

*Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова  
656038, Барнаул, Россия*

Поступила в редакцию 4 мая 2021 г.,

после переработки 4 мая 2021 г.

Принята к публикации 14 мая 2021 г.

С помощью метода молекулярной динамики проведено исследование самодиффузии в жидких и твердых сплавах системы Ti–Al, включая чистые металлы Ti и Al. Помимо интерметаллидов  $Ti_3Al$ ,  $TiAl$ ,  $TiAl_3$ , рассматривались разупорядоченные сплавы с аналогичным соотношением компонентов. Для рассмотренных систем получены характеристики самодиффузии отдельно для атомов Ti и Al. Согласно полученным данным, как в жидких, так и в твердых сплавах системы Ti–Al энергия активации диффузии существенно зависит от концентрации компонентов, приблизительно повторяя фазовую диаграмму. При этом для разупорядоченных сплавов энергия активации оказалась почти в полтора раза меньше, чем для упорядоченных. При изучении самодиффузии в расплавах и в твердых разупорядоченных сплавах не было замечено существенного различия диффузионной подвижности атомов разного сорта. Однако в случае упорядоченных сплавов, особенно интерметаллидов  $Ti_3Al$  и  $TiAl$ , это различие было ярко выраженным: атомы Al диффундировали значительно медленнее атомов Ti. В интерметаллиде  $TiAl_3$  диффузия имеет анизотропный характер: основные перемещения атомов происходили вдоль атомных плоскостей с чередующимися атомами Ti и Al в сверхструктурной упаковке  $D0_{22}$ .

DOI: 10.31857/S0044451021100096

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Интерметаллические соединения системы Ti–Al и сплавы на их основе, благодаря сочетанию таких свойств, как низкая плотность, высокий предел текучести при повышенных температурах, хорошая стойкость к окислению и коррозии, имеют высокий потенциал применения в качестве высокотемпературных конструкционных материалов, в частности, для аэрокосмической и автомобильной отраслей [1–5]. Основой технологии получения интерметаллидов и сплавов является диффузия, процесс которой в подобных системах имеет сложный и многофакторный характер. В диффузионной зоне на границе Ti и Al, например в процессе высокотемпературного синтеза, могут присутствовать одновременно как твердые упорядоченные и разупорядоченные

фазы, так и жидкие смеси с различным содержанием компонентов [6–9]. При этом диффузионные характеристики, такие как, например, энергия активации диффузии, значительно различаются не только в указанных фазах, но зависят и от концентрации компонентов в простой смеси [8–11]. Знание характеристик и механизмов диффузии отдельно в разных фазах системы Ti–Al необходимо для более детального понимания процессов, происходящих при высокотемпературном синтезе, а также имеет большое значение для всей области исследования и создания сплавов Ti–Al.

К настоящему времени накоплены экспериментальные данные о самодиффузии атомов Al и Ti преимущественно в интерметаллидах  $TiAl$  и  $Ti_3Al$  [11–13]. При этом остается слабоизученной самодиффузия в разупорядоченных сплавах (ввиду их очень высокой тенденции к упорядочению), в интерметаллиде  $TiAl_3$ , в соответствующих расплавах. Последнее обусловлено рядом сложностей, связанных с проведением подобных исследований: высокая температура, химическая реакционная способность,

\* E-mail: gmpoletaev@mail.ru

кристаллизация, вызванная стенками контейнера, отсутствие подходящих изотопов в случае Al [14–16].

Иной концептуальный подход к созданию баз данных о транспортных и термодинамических свойствах сплавов может быть основан на моделировании методом молекулярной динамики. Такой подход полностью лишен ограничений, присущих экспериментальным исследованиям. В отличие от эксперимента, молекулярно-динамическое моделирование напрямую позволяет изучать состав и температурные зависимости соотношений между различными транспортными и термодинамическими свойствами сплавов.

Целью настоящей работы являлось получение с помощью метода молекулярной динамики характеристик самодиффузии для жидких и твердых сплавов системы Ti–Al. Рассматривались упорядоченные и разупорядоченные сплавы с составом  $Ti_{75}Al_{25}$ ,  $Ti_{50}Al_{50}$ ,  $Ti_{25}Al_{75}$ , а также чистые металлы Ti и Al.

## 2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Для описания межатомных взаимодействий в системе Ti–Al использовались потенциалы модели погруженного атома (embedded atom model, EAM) из работы [17], где они были получены на основе сопоставления с результатами экспериментов и с данными расчетов методом *ab initio* для различных свойств и структур металлов Ti, Al и интерметаллидов  $Ti_3Al$  и  $TiAl$ . Они хорошо зарекомендовали себя при проведении различных исследований и прошли успешную апробацию по широкому спектру механических и структурно-энергетических свойств сплавов системы Ti–Al [17–19].

Расчетные ячейки содержали от 30 до 50 тысяч атомов и имели вид прямоугольных параллелепипедов (рис. 1). По всем осям использовались периодические граничные условия. В случае моделирования диффузии в жидких металлах вдоль одной из осей дополнительно создавалось свободное пространство (сверху и снизу на рис. 1а) для того, чтобы расплав мог свободно менять объем при изменении температуры и первоначальном плавлении исходного кристалла. Структура расплава в модели создавалась путем задания температуры расчетной ячейки выше температуры плавления и выдерживания в течение времени, достаточного для полного плавления всей ячейки. Коэффициент диффузии в этом случае определялся по смещению атомов только в затемненной зоне на рис. 1а, чтобы исключить влияние свободной поверхности.

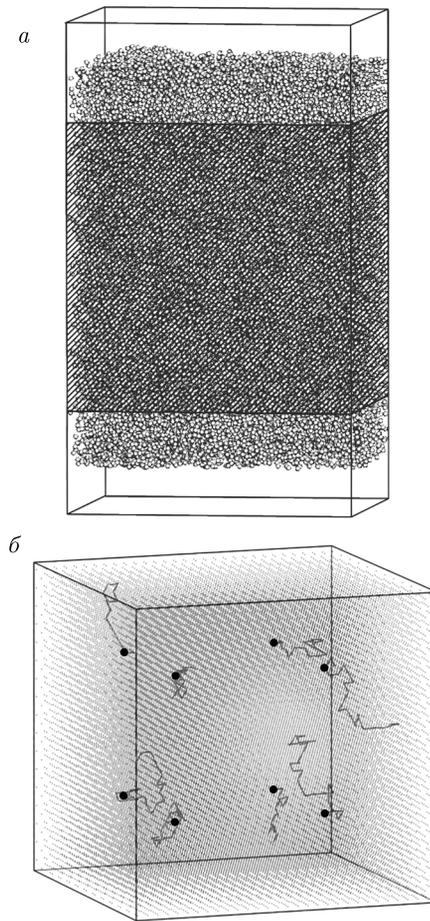


Рис. 1. Модели для исследования самодиффузии: а — в расплаве (диффузия оценивалась по смещению атомов в затемненной области); б — в кристалле (жирными точками показаны начальные позиции восьми вакансий и примеры смещений атомов в результате самодиффузии)

В случае моделирования твердых сплавов при задании той или иной температуры учитывалось тепловое расширение на основе данных из работы [17]. Температура в модели задавалась через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла. Для сохранения температуры постоянной в процессе моделирования использовался термостат Нозе–Гувера [20, 21].

Диффузия в кристаллах в условиях термодинамического равновесия, как известно, осуществляется преимущественно по вакансионному механизму. Существуют, конечно, сравнительно более «подвижные» дефекты, например межузельные атомы, бивакансии. Но их равновесная концентрация значительно ниже концентрации вакансий, и их вклад на фоне вклада вакансионного механизма очень мал [22]. Энергия активации вакансионной диффузии складывается из энергии образования вакансии,  $E_v^f$ ,

и энергии активации ее миграции,  $E_v^m$ . Обе эти энергии в методе молекулярной динамики, как правило, определяют отдельно. При этом для нахождения энергии миграции используют два метода, которые условно можно назвать статическим и кинематическим [22]. Статическим методом, при знании траектории миграции дефекта, определяется величина энергетического барьера на пути миграции. Этот метод обладает более высокой точностью, но имеет и два недостатка: невозможность получения другой важной диффузионной характеристики — предэкспоненциального множителя  $D_0$  в соответствующем уравнении Аррениуса, а также необходимость рассмотрения и сложность учета отдельного вклада всех возможных вариантов миграции рассматриваемого дефекта (особенно в многокомпонентных системах с низкосимметричной структурой).

Другой метод, кинематический, менее точен, чем статический, но позволяет определить эффективные значения энергии миграции и предэкспоненциального множителя. Он заключается в нахождении зависимости коэффициента диффузии от температуры,  $D'(T)$ , при введении в расчетную ячейку заданного количества дефектов рассматриваемого типа. Вероятность диффузионного акта в моделируемом объеме кристалла в этом случае существенно выше, чем в условиях термодинамического равновесия. Для пересчета коэффициента диффузии для условия равновесия используют данные по энергии образования вакансий.

Для нахождения диффузионных характеристик в настоящей работе использовался кинематический метод. При изучении диффузии в твердых металлах и сплавах в расчетные ячейки изначально вводились восемь вакансий с учетом стехиометрического соотношения компонентов (рис. 1б). В случае моделирования диффузии в жидкой фазе во введении дополнительных дефектов необходимости не было. В этом случае также не нужно было делать пересчет коэффициентов диффузии для равновесной концентрации, как для твердых сплавов.

Коэффициент самодиффузии рассчитывался с помощью соотношения Эйнштейна

$$D = \frac{\langle \Delta r^2 \rangle}{6t}, \quad (1)$$

где  $\langle \Delta r^2 \rangle$  — среднеквадратическое смещение атомов относительно начальных позиций,  $t$  — время. Молекулярно-динамические эксперименты для определения коэффициента диффузии имели продолжительность от 0.5 до 2 нс. Шаг интегрирова-

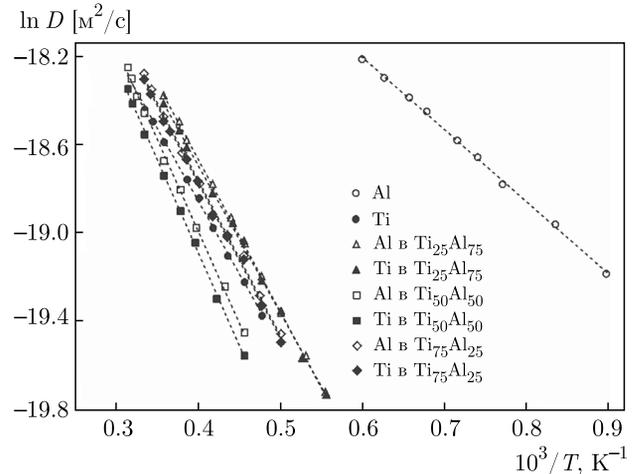


Рис. 2. Зависимости  $\ln D$  от  $10^3/T$  для жидких смесей Ti-Al и чистых металлов Ti и Al

ния по времени в методе молекулярной динамики был равен 2 фс.

### 3. САМОДИФФУЗИЯ В ЖИДКИХ СМЕСЯХ СИСТЕМЫ Ti-Al

На рис. 2 изображены полученные в модели зависимости  $\ln D$  от  $10^3/T$  для жидких смесей Ti-Al, а также для чистых металлов Ti и Al. Все найденные коэффициенты диффузии имели значения в пределах  $10^{-8}$ – $10^{-9}$  м<sup>2</sup>/с, что для рассматриваемых температур хорошо согласуется с экспериментальными работами и данными других авторов [14, 16, 23–27]. Все полученные зависимости строго линейны, что говорит о том, что на рассматриваемом температурном интервале действует один и тот же механизм диффузии с одной и той же энергией активации.

Согласно уравнению Аррениуса, энергию активации самодиффузии можно определить по угловому коэффициенту линейной зависимости:

$$Q = -k \frac{d(\ln D)}{d(T^{-1})} = -k \operatorname{tg} \alpha, \quad (2)$$

где  $k$  — постоянная Больцмана. При этом предэкспоненциальный множитель вычисляется по пересечению линии с осью ординат:

$$\ln D(0) = \ln D_0. \quad (3)$$

Найденные значения  $Q$  и  $D_0$  приведены в табл. 1. Энергия активации диффузии в жидких Al и Ti

**Таблица 1.** Характеристики самодиффузии для жидких сплавов системы Ti–Al

Дифф. элемент	$Q$ , эВ	$D_0$ , м <sup>2</sup> /с
Al в Al	0.28	$0.88 \cdot 10^{-7}$
	<i>0.274</i> [25]	<i><math>1.79 \cdot 10^{-7}</math></i> [25]
	<i>0.280</i> [26]	
Ti в Ti	0.57	$0.89 \cdot 10^{-7}$
	<i>0.563</i> [27]	<i><math>1.14 \cdot 10^{-7}</math></i> [27]
Al в Ti <sub>75</sub> Al <sub>25</sub>	0.60	$1.17 \cdot 10^{-7}$
Ti в Ti <sub>75</sub> Al <sub>25</sub>	0.60	$1.15 \cdot 10^{-7}$
Al в Ti <sub>50</sub> Al <sub>50</sub>	0.72	$1.54 \cdot 10^{-7}$
Ti в Ti <sub>50</sub> Al <sub>50</sub>	0.72	$1.47 \cdot 10^{-7}$
Al в Ti <sub>25</sub> Al <sub>75</sub>	0.59	$1.21 \cdot 10^{-7}$
Ti в Ti <sub>25</sub> Al <sub>75</sub>	0.57	$1.08 \cdot 10^{-7}$

почти совпала с данными реальных экспериментов [25–27] (приведены в табл. 1 курсивом), что говорит в пользу реалистичности используемых потенциалов межатомных взаимодействий. Энергия активации в сплавах, как и ожидалось, существенно зависит от концентрации компонентов. Эта зависимость немонотонна и, начинаясь от 0.28 эВ для чистого Al и заканчиваясь 0.57 эВ для чистого Ti, при одинаковом соотношении компонентов имеет максимум 0.72 эВ. Следует заметить, что в жидкой фазе не было замечено существенного преобладания диффузии того или иного компонента для всех рассмотренных составов смесей — диффузионные характеристики для Ti и Al оказались близки при одинаковых условиях. В работе [14] при исследовании методом молекулярной динамики самодиффузии в жидких смесях системы Ni–Al такое отмечалось для равной концентрации компонентов Ni и Al, но при повышенном содержании того или иного компонента в смеси коэффициент диффузии этого элемента преобладал. Возможно, данное различие результатов обусловлено более высокой энергией связи Ni–Al по сравнению с энергией связи Ti–Al.

#### 4. САМОДИФФУЗИЯ В ТВЕРДЫХ СПЛАВАХ СИСТЕМЫ Ti–Al

Самодиффузия в твердых металлах и сплавах системы Ti–Al моделировалась, как уже говорилось выше, путем введения в исходную расчетную ячейку восьми вакансий. Температурные зависимости коэффициента самодиффузии  $D'$  (соответствующего

заданной концентрации вакансий), так же как и для расплавов, строго подчинялись закону Аррениуса. На рис. 3 приведены зависимости  $\ln D'$  от  $10^3/T$  для упорядоченных и разупорядоченных сплавов с составом Ti<sub>75</sub>Al<sub>25</sub>, Ti<sub>50</sub>Al<sub>50</sub>, Ti<sub>25</sub>Al<sub>75</sub>, а также для чистых металлов Ti и Al. Рассматривались интерметаллиды Ti<sub>3</sub>Al (сверхструктура  $D0_{19}$ ), TiAl (сверхструктура  $L1_0$ ) и TiAl<sub>3</sub> (сверхструктура  $D0_{22}$ ). Для изучения диффузии в разупорядоченных сплавах для каждого соотношения компонентов создавалось по три расчетных ячейки с различными случайными распределениями атомов Ti и Al. При создании разупорядоченных сплавов использовался тот же тип кристаллической решетки, что и для упорядоченного сплава с тем же соотношением компонентов, но с проведением дополнительной релаксации структуры для снятия напряжений, вызванных случайным распределением атомов разного сорта.

Для коэффициента самодиффузии в условиях термодинамического равновесия можно записать

$$D = \frac{c_v}{c'_v} D' = \frac{N}{n} D'_0 \exp\left(\frac{\Delta S_v^f}{k}\right) \times \exp\left(-\frac{E_v^f + E_v^m}{kT}\right) = D_0 \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right). \quad (4)$$

Здесь  $c_v$  и  $c'_v$  — соответственно равновесная для температуры  $T$  и заданная в модели концентрации вакансий,  $N$  — количество атомов в расчетной ячейке,  $D'_0$  — предэкспоненциальный множитель, полученный при введении  $n$  вакансий в расчетную ячейку,  $\Delta S_v^f$  — энтропия образования вакансии,  $E_v^f$  и  $E_v^m$  — соответственно энергии образования и миграции вакансии. Правая часть в выражении (4) — это классический закон Аррениуса.

Следовательно, предэкспоненциальный множитель в условиях равновесия имеет вид

$$D_0 = \frac{N}{n} D'_0 \exp\left(\frac{\Delta S_v^f}{k}\right). \quad (5)$$

Колебательная составляющая энтропии образования вакансии определялась по методике, описанной в работе [22]. Для всех рассматриваемых материалов в настоящей работе она оказалась в интервале от  $0.3k$  до  $0.4k$ .

В двухкомпонентном упорядоченном сплаве энергии образования вакансии при удалении атомов A и B обычно различаются, но для расчета энергии активации диффузии имеет смысл использовать

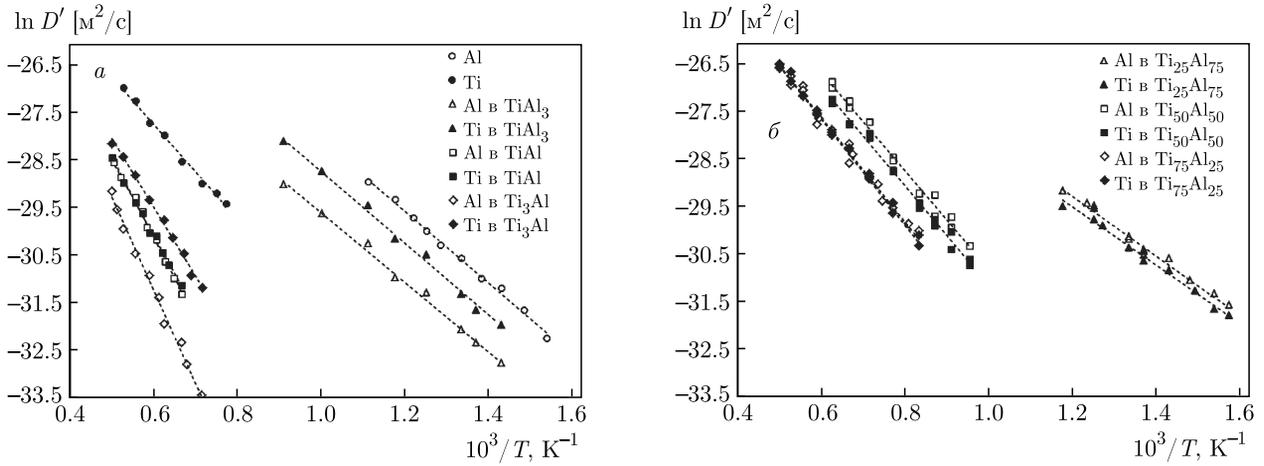


Рис. 3. Зависимости  $\ln D'$  от  $10^3/T$  для упорядоченных (а) и разупорядоченных (б) сплавов системы Ti–Al, а также для чистых металлов Ti и Al (а)

эффективную энергию образования вакансии в сплаве:

$$\overline{E}_v^f = -kT \ln \left[ \frac{N_A}{N} \exp \left( -\frac{E_{vA}^f}{kT} \right) + \frac{N_B}{N} \exp \left( -\frac{E_{vB}^f}{kT} \right) \right]. \quad (6)$$

Здесь использовано допущение, что энтропии образования вакансий А и В равны. Тогда для энергий активации диффузии атомов компонентов А и В имеем

$$Q_A = \overline{E}_v^f + \overline{E}_{vA}^m, \quad Q_B = \overline{E}_v^f + \overline{E}_{vB}^m. \quad (7)$$

Эффективная энергия активации скачка атома сорта А или В на место вакансии определялась по формуле (2) аналогично описанному в разд. 3 методу.

Полученные значения  $\overline{E}_v^f$ ,  $\overline{E}_{vA}^m$ ,  $Q$  и  $D_0$  приведены в табл. 2, в которой также представлены данные из других работ, полученные как экспериментально [11–13, 17, 28, 29], так и с помощью расчетов методом *ab initio* [30, 31]. Для эффективной энергии образования вакансии в табл. 2 указаны значения для температуры  $0.7T_m$ , где  $T_m$  — температура плавления.

Анализируя приведенные в табл. 2 данные, в первую очередь следует отметить значительное (почти в полтора раза) различие энергий активации самодиффузии в упорядоченных и разупорядоченных сплавах. В связи с этим самодиффузия в разупорядоченных сплавах протекала гораздо быстрее, чем в упорядоченных. В разупорядоченных

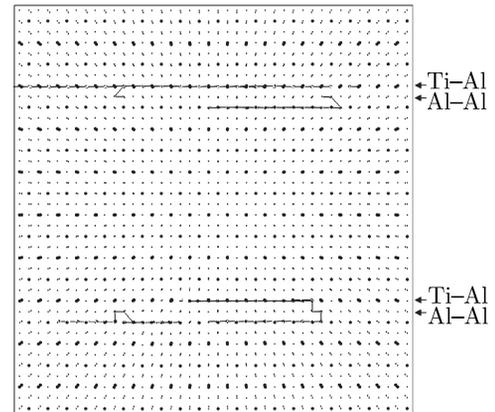


Рис. 4. Анизотропия диффузии в интерметаллиде TiAl3 со сверхструктурой D022

сплавах, как и в расплавах, не было замечено существенного различия диффузионной подвижности атомов разного сорта. Однако в интерметаллидах Ti3Al и TiAl это различие было ярко выраженным: атомы Al в этом случае диффундировали значительно медленнее атомов Ti, что хорошо согласуется с экспериментальными данными работ [12, 13].

При исследовании самодиффузии в интерметаллиде TiAl3 было обнаружено, что она имеет ярко выраженный анизотропный характер: основные перемещения атомов происходили в атомных плоскостях с чередующимися атомами Ti и Al в сверхструктурной упаковке D022 (рис. 4).

Таблица 2. Характеристики самодиффузии для твердых сплавов системы Ti–Al

Дифф. элемент	$\overline{E}_v^f$ , эВ	$\overline{E}_v^m$ , эВ	$Q$ , эВ	$D_0$ , м <sup>2</sup> /с
Al в Al	0.71 <i>0.68</i> [28, 29]	0.65	1.36 <i>1.33</i> [17] <i>1.47</i> [11]	$7.2 \cdot 10^{-6}$ <i><math>1.71 \cdot 10^{-4}</math></i> [11]
Ti в Ti	1.83 <i>1.55</i> [17]	0.85	2.68 <i>3.14</i> [11] <i>2.02</i> [30]	$2.0 \cdot 10^{-6}$ <i><math>1.35 \cdot 10^{-3}</math></i> [11]
Al в Ti <sub>3</sub> Al (D0 <sub>19</sub> )	2.13 <i>1.35</i> [11]	1.68	3.81 <i>4.08</i> [12]	$2.0 \cdot 10^{-5}$ <i><math>2.32 \cdot 10^{-1}</math></i> [12]
Ti в Ti <sub>3</sub> Al (D0 <sub>19</sub> )	<i>2.24</i> [31]	1.25	3.38 <i>2.99</i> [12]	$5.4 \cdot 10^{-6}$ <i><math>2.24 \cdot 10^{-5}</math></i> [12]
Al в Ti <sub>75</sub> Al <sub>25</sub> (нет порядка)	1.31	0.96	2.27	$4.5 \cdot 10^{-6}$
Ti в Ti <sub>75</sub> Al <sub>25</sub> (нет порядка)		0.95	2.26	$4.4 \cdot 10^{-6}$
Al в TiAl (L1 <sub>0</sub> )	2.02 <i>1.22</i> [11]	1.46	3.48 <i>3.71</i> [13]	$1.6 \cdot 10^{-5}$ <i><math>2.11 \cdot 10^{-2}</math></i> [13]
Ti в TiAl (L1 <sub>0</sub> )	<i>1.80</i> [31]	1.36	3.38 <i>2.59</i> [13]	$7.9 \cdot 10^{-6}$ <i><math>1.43 \cdot 10^{-6}</math></i> [13]
Al в Ti <sub>50</sub> Al <sub>50</sub> (нет порядка)	1.18	0.89	2.07	$9.4 \cdot 10^{-6}$
Ti в Ti <sub>50</sub> Al <sub>50</sub> (нет порядка)		0.90	2.08	$9.4 \cdot 10^{-6}$
Al в TiAl <sub>3</sub> (D0 <sub>22</sub> )	1.53 <i>1.46</i> [31]	0.63	2.16	$1.4 \cdot 10^{-6}$
Ti в TiAl <sub>3</sub> (D0 <sub>22</sub> )		0.65	2.18	$4.0 \cdot 10^{-6}$
Al в Ti <sub>25</sub> Al <sub>75</sub> (нет порядка)	0.99	0.54	1.53	$2.4 \cdot 10^{-6}$
Ti в Ti <sub>25</sub> Al <sub>75</sub> (нет порядка)		0.53	1.52	$1.7 \cdot 10^{-6}$

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью метода молекулярной динамики проведено исследование самодиффузии в жидких и твердых сплавах системы Ti–Al, а также в чистых металлах Ti и Al. Помимо интерметаллидов Ti<sub>3</sub>Al, TiAl, TiAl<sub>3</sub>, рассматривались разупорядоченные сплавы с аналогичным соотношением компонентов. Для рассмотренных систем получены характе-

ристики самодиффузии (энергия активации и предэкспоненциальный множитель в соответствующем уравнении Аррениуса) отдельно для атомов Ti и Al.

Согласно полученным данным, как в жидких, так и в твердых сплавах системы Ti–Al энергия активации диффузии существенно зависит от концентрации компонентов, приблизительно повторяя фазовую диаграмму. При этом для разупорядоченных сплавов энергия активации самодиффузии ока-

залась почти в полтора раза меньше, чем для упорядоченных.

При изучении самодиффузии в расплавах и в твердых разупорядоченных сплавах не было замечено существенного различия диффузионной подвижности атомов разного сорта. Однако в случае упорядоченных сплавов, особенно интерметаллидов  $Ti_3Al$  и  $TiAl$ , это различие было ярко выраженным: атомы Al диффундировали значительно медленнее атомов Ti. В интерметаллиде  $TiAl_3$  диффузия имеет анизотропный характер: основные перемещения атомов происходили вдоль атомных плоскостей с чередующимися атомами Ti и Al в сверхструктурной упаковке  $D0_{22}$ .

**Финансирование.** Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FZMM-2020-0002).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Y.-W. Kim, *J. Metals* **46**, 30 (1994).
2. F. Appel, P. A. Beaven, and R. Wagner, *Acta Metall. Mater.* **41**, 1721 (1993).
3. J. Lapin, *Conf. Proc. Metal-2009*, **19**, 21.5 (2009).
4. T. Tetsui, *Rare Metals* **30**, 294 (2011).
5. T. Voisin, J.-P. Monchoux, and A. Couret, in *Spark Plasma Sintering of Materials*, ed. by P. Cavaliere, Springer, Cham (2019), p. 713.
6. Q. Wu, J. Wang, Y. Gu, Y. Guo, G. Xu, and Y. Cui, *J. Phase Equilib. Diffus.* **39**, 724 (2018).
7. N. Thiyaneshwaran, K. Sivaprasad, and B. Ravikiran, *Sci. Rep.* **8**, 16797 (2018).
8. H. Wu, Sh. Zhang, H. Hu, J. Li, J. Wu, Q. Li, and Zh. Wang, *Intermetallics* **110**, 106483 (2019).
9. J.-G. Luo, *Welding J.* **79**, 239-s (2000).
10. J. Rusing and Ch. Herzig, *Scr. Metall. Mater.* **33**, 561 (1995).
11. Y. Mishin and Ch. Herzig, *Acta Mater.* **48**, 589 (2000).
12. J. Rusing and C. Herzig, *Intermetallics* **4**, 647 (1996).
13. C. Herzig, T. Przeorski, and Y. Mishin, *Intermetallics* **7**, 389 (1998).
14. E. V. Levchenko, T. Ahmed, and A. V. Evteev, *Acta Mater.* **136**, 74 (2017).
15. E. Sondermann, F. Kargl, and A. Meyer, *Phys. Rev. B* **93**, 184201 (2016).
16. N. Jakse and A. Pasturel, *Sci. Rep.* **3**, 3135 (2013).
17. R. R. Zope and Y. Mishin, *Phys. Rev. B* **68**, 024102 (2003).
18. Y.-K. Kim, H.-K. Kim, W.-S. Jung, and B.-J. Lee, *Comput. Mater. Sci.* **119**, 1 (2016).
19. Q.-X. Pei, M. H. Jhon, S. S. Quek, and Z. Wu, *Comput. Mater. Sci.* **188**, 110239 (2021).
20. Г. М. Полетаев, И. В. Зоря, *ЖЭТФ* **158**, 485 (2020).
21. Г. М. Полетаев, Р. Ю. Ракитин, *ФТТ* **63**, 582 (2021).
22. Г. М. Полетаев, М. Д. Старостенков, *ФТТ* **52**, 1075 (2010).
23. A. Mao, J. Zhang, Sh. Yao et al., *Results in Phys.* **16**, 102998 (2020).
24. J. Qin, X. Li, J. Wang, and Sh. Pan, *AIP Adv.* **9**, 035328 (2019).
25. F. Demmel, D. Szubrin, W.-C. Pilgrim, and C. Morchel, *Phys. Rev. B* **84**, 014307 (2011).
26. F. Kargl, H. Weis, T. Unruh, and A. Meyer, *J. Phys.: Conf. Ser.* **340**, 012077 (2012).
27. J. Horbach, R. E. Rozas, T. Unruh, and A. Meyer, *Phys. Rev. B* **80**, 212203 (2009).
28. Г. Й. Волленбергер, в сб. *Физическое металловедение. Т. 3. Физико-механические свойства металлов и сплавов*, под ред. Р. Кана, Мир, Москва (1987), с. 5.
29. А. Н. Орлов, Ю. В. Трушин, *Энергии точечных дефектов в металлах*, Энергоатомиздат, Москва (1983).
30. J. R. Fernandez, A. Monti, and R. Pasianot, *J. Nucl. Mater.* **229**, 1 (1995).
31. А. В. Бакулин, С. Е. Кулькова, *ЖЭТФ* **154**, 1136 (2018).

## ДИСПЕРСИЯ ИЗГИБНЫХ МОД В ГРАФЕНЕ

А. Н. Ипатов <sup>a,b\*</sup>, Д. А. Паршин <sup>b\*\*</sup>, Д. А. Конюх <sup>c\*\*\*</sup><sup>a</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого  
195251, Санкт-Петербург, Россия<sup>b</sup> Академический университет им. Ж. И. Алфёрова  
194021, Санкт-Петербург, Россия<sup>c</sup> Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук  
194021, Санкт-Петербург, РоссияПоступила в редакцию 15 мая 2021 г.,  
после переработки 25 июня 2021 г.  
Принята к публикации 25 июня 2021 г.

В рамках модели Борна–фон Кармана построена простая аналитическая теория дисперсии изгибных колебаний в графене, позволяющая учесть, в принципе, любое количество конфигурационных сфер. В рамках этой теории была проанализирована квадратичная дисперсия изгибных акустических фононов в графене. Показано, что причиной возникновения такой дисперсии изгибных колебаний в графене является взаимодействие каждого атома не только с ближайшими соседями, но и с более дальними атомами. При этом знаки эффективных силовых констант, соответствующих разным координационным сферам, должны различаться, сохраняя устойчивость системы. Получены аналитические соотношения между упругими константами, при которых оказывается возможным распространение изгибных колебаний в плоскости графена. При выведенном в данной работе «критическом» соотношении отрицательные упругие константы второй и третьей координационных сфер практически полностью компенсируют положительный вклад от первой координационной сферы. В результате в узком интервале значений волнового вектора вблизи  $k = 0$  распространение низкочастотных изгибных акустических волн с обычной линейной дисперсией оказывается невозможным. Определены условия, при которых закон дисперсии изгибных мод в графене приобретает квадратичный характер, характерный для изгибных колебаний в тонких макроскопических мембранах.

DOI: 10.31857/S0044451021100102

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Двумерные кристаллические структуры являются объектом интенсивных исследований в последние десятилетия, что объясняется активным развитием нанотехнологий [1]. До недавнего времени основное внимание было обращено на их электронные свойства, чему дали толчок первые экспериментальные работы, посвященные изучению графена [2, 3]. Позднее начались исследования спектров фононных мод как в двумерных решетках на основе углерода [4–6], так и в других кристаллических структурах [7]. Как известно, в элементарной ячейке графе-

на находятся два атома углерода, поэтому в его фонном спектре имеются шесть колебательных мод, три акустические и три оптические. Четыре из них, LA-, LO-, TA-, TO-моды, соответствуют смещениям атомов, лежащих в плоскости листа графена. Две оставшихся моды, ZO и ZA, соответствуют смещениям атомов перпендикулярно плоскости, поэтому их называют изгибными модами. Они в силу симметрии никак не взаимодействуют с оставшимися четырьмя модами. Неожиданным оказалось то, что изгибные ZA-фононы в графене имели аномальный закон дисперсии при малых значениях волнового вектора,  $\omega \propto k^2$  [5]. Эта зависимость наблюдалась экспериментально при рассеянии рентгеновских лучей в графите [8] и при расчетах *ab initio* в графите [9] и графене [6], однако причины возникновения этого закона оставались неясными. Специалисты по теории упругости утверждали, что такой

\* E-mail: andrei\_ipatov@mail.ru

\*\* E-mail: dmitry.a.parshin@gmail.com

\*\*\* E-mail: conyuh.dmitrij@yandex.ru

закон дисперсии вполне ожидаем, поскольку наблюдается в тонких мембранах [10]. Но графен не является макроскопической мембраной, и, как указано в работе [11], атомы графена «не знают», что должны подчиняться макроскопическим уравнениям теории упругости. При этом теоретические расчеты, проведенные с учетом взаимодействия только с атомами первой координационной сферы, дают обычную линейную дисперсию  $\omega \propto k$ , как и положено для звуковой волны [12]. Ситуация немного прояснилась с появлением работ Фальковского [11, 13, 14], который, учтя взаимодействия с двумя, а затем с тремя конфигурационными сферами, получил, наконец, «аномальный» квадратичный закон дисперсии. В этих работах было продемонстрировано, что имеется возможность получить дисперсионные зависимости для фононных мод в графене, в широком диапазоне значений волновых векторов, согласующиеся с экспериментальными данными. При этом по-прежнему оставалось непонятным, что является причиной аномальной дисперсии изгибных волн.

Из уже имеющихся результатов исследований особенностей дисперсии колебательных мод в сильноанизотропных слоистых кристаллических материалах, состоящих из слабосвязанных между собой многоатомных слоев, в частности графита, известно, что в законе дисперсии упругой волны, поляризованной в направлении, перпендикулярном слоям кристалла, в общем случае присутствуют как линейный, так и квадратичный члены [15]. В последней работе, в частности, были сделаны выводы, что для адекватного анализа колебательных характеристик квазидвумерных систем типа графита или графена необходимо учитывать взаимодействие не менее трех координационных сфер. Там же авторами на основе анализа симметрии тензора модулей упругости были получены соотношения для упругих констант, при которых в длинноволновом пределе дисперсия акустической ветви изгибных мод становится чисто квадратичной. При этом значения частот в особых точках зоны Бриллюэна, полученные с использованием этих соотношений, совпадают с результатами, приведенными в статьях [13, 14]. Целью нашего исследования было не только проанализировать закон дисперсии решетки графена, но и определить роль каждой из координационных сфер по отдельности в формировании дисперсионной зависимости. В частности, стояла задача не только продемонстрировать, что для изменения характера закона дисперсии с линейного на квадратичный необходимо наличие в системе отрицательных упругих констант, но и на основании простых аналитических

выкладок наглядно показать, взаимодействие с какими из соседей в решетке приводит к этому изменению.

В нашей работе в рамках теории Борна–фон Кармана в результате решения уравнений движения для атомов двумерной кристаллической решетки графена были получены достаточно простые аналитические выражения для фононных частот ZO- и ZA-мод и проанализированы их зависимости от выбора силовых констант. Важно отметить, что наша модель не требует экспериментальных данных для определения параметров межатомного взаимодействия, как это было сделано, например, в работах [9, 16, 17], в которых для описания межатомного взаимодействия были использованы эффективные потенциалы, включающие в себя ряд эмпирических параметров. В рамках простой модели, не требующей сложных численных расчетов, мы показали, что меняя число учитываемых координационных сфер и значения силовых констант, оказывается возможным улучшать согласие результатов расчета с экспериментом. Важно отметить, что эффективные упругие константы взаимодействия с более далекими соседями могут существенно отличаться от констант взаимодействия с ближайшими атомами и даже иметь разные знаки [18, 19], что и является причиной изменения характера дисперсии. В настоящей работе наша задача показать, что именно наличие упругих констант разного знака приводит к возможности появления в системе изгибных колебательных мод с квадратичной дисперсией с сохранением при этом ее устойчивости. Основной целью работы было вывести простые аналитические соотношения между упругими константами, соответствующими взаимодействию с атомами разных координационных сфер, при которых линейный закон дисперсии сменяется на квадратичный. При этом важно отметить, что наша модель позволяет получить эти соотношения для любого числа учитываемых координационных сфер.

## 2. ИЗГИБНЫЕ МОДЫ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

Вначале обсудим, каким образом появление отрицательных упругих констант влияет на характер колебательных мод в системе на примере колебаний линейной цепочки атомов [20, 21]. Проблема дисперсии изгибных мод в такой системе была достаточно детально проанализирована в книге [21], где было продемонстрировано, что в общем случае дисперси-

онная зависимость  $\omega(k)$  атомной цепочки в длинно-волновом пределе  $ka \ll 1$  содержит как линейное, так и квадратичное слагаемое. Наша задача состоит в том, чтобы в рамках простой модели определить, при каких условиях закон дисперсии становится чисто квадратичным, что в дальнейшем будет использовано для анализа свойств изгибных мод в двумерной решетке графена.

### 2.1. Колебания линейной цепочки атомов

Пусть имеется линейная цепочка из одинаковых атомов массой  $m$ , в положении равновесия расположенных в узлах одномерной решетки с постоянной решетки  $a$ . Сперва рассмотрим хорошо известную задачу нахождения спектра нормальных колебательных мод, когда учитывается только короткодействующее взаимодействие между ближайшими соседями, описываемое упругой силой с константой взаимодействия  $\kappa_1 > 0$ . Обозначив смещение  $n$ -го атома относительно положения равновесия как  $u_n$ , запишем для него уравнение движения

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \kappa_1 (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n). \quad (1)$$

Будем искать решение в виде бегущей волны

$$u_n = u_0 \exp(i(\omega t - kna)), \quad (2)$$

где  $k$  — волновой вектор. После подстановки (2) в уравнение (1) получаем

$$-\omega^2 m u_n = \kappa_1 u_n (\exp(ika) + \exp(-ika) - 2), \quad (3)$$

откуда следует хорошо известный закон дисперсии [20]

$$\omega^2(k) = \frac{2\kappa_1}{m} (1 - \cos(ka)) = 4\Omega_1^2 \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right), \quad (4)$$

где  $\Omega_1 = \sqrt{\kappa_1/m}$ . При малых значениях  $k$ , т. е. при длинах волн, значительно превышающих межатомные расстояния в цепочке, частота колебаний  $\omega$  зависит от  $k$  линейно, как для звуковой волны, распространяющейся вдоль непрерывной упругой струны [20],

$$\omega \approx a \sqrt{\frac{\kappa_1}{m}} k = v_s k, \quad (5)$$

где  $v_s$  — скорость распространения акустических волн, не зависящая от длины волны.

В случае, если в цепочке могут взаимодействовать не только ближайшие соседи, но и атомы, от-

стоящие друг от друга на два периода решетки, уравнение движения  $n$ -го атома записывается в виде

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \kappa_1 (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + \kappa_2 (u_{n+2} + u_{n-2} - 2u_n), \quad (6)$$

где  $\kappa_1$  и  $\kappa_2$  — соответствующие упругие константы, знаки которых в общем случае могут различаться.

Формула (3) теперь приобретает вид

$$-\omega^2 m u_n = \kappa_1 u_n (\exp(ika) + \exp(-ika) - 2) + \kappa_2 u_n (\exp(i2ka) + \exp(-i2ka) - 2), \quad (7)$$

что приводит к изменению в законе дисперсии

$$\omega^2 = \frac{4}{m} \left( \kappa_1 \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) + \kappa_2 \sin^2(ka) \right). \quad (8)$$

Таким образом, необходимым условием устойчивости для распространения вдоль цепочки атомов упругой волны с фазовой скоростью  $v_s = \omega/k$  при малых  $k$  является требование

$$\kappa_1 \frac{k^2 a^2}{4} + \kappa_2 k^2 a^2 > 0. \quad (9)$$

Отсюда следует предельное отрицательное значение для константы  $\kappa_2$ ,

$$\kappa_2 = -\frac{\kappa_1}{4}, \quad (10)$$

ниже которого система теряет устойчивость. Легко убедиться, что в случае «критического» соотношения упругих констант (10), при котором скорость звука в пределе малых  $k$  стремится к нулю, закон дисперсии колебаний цепочки (8) с точностью до численного множителя воспроизводит квадрат дисперсионного соотношения из формулы (4), учитывающей взаимодействие только с ближайшими соседями:

$$\omega^2(k) = 4\Omega_1^2 \left( \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) - \frac{\sin^2(ka)}{4} \right) = 4\Omega_1^2 \sin^4\left(\frac{ka}{2}\right). \quad (11)$$

В результате мы получаем квадратичный закон дисперсии колебаний. Другими словами, включение взаимодействия с атомами, отстоящими на два периода решетки, при отрицательном «критическом» значении упругой константы  $\kappa_2$  приводит к смене линейного закона дисперсии на квадратичный,  $\omega \sim k^2$ , характерный для изгибных колебательных мод [10, 21].

В самом общем случае, когда во взаимодействии участвуют соседи, отстоящие от рассматриваемого  $n$ -го атома на  $N$  периодов цепочки, уравнение движения приобретает вид

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \kappa_1(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + \kappa_2(u_{n+2} + u_{n-2} - 2u_n) + \kappa_3(u_{n+3} + u_{n-3} - 2u_n) + \dots + \kappa_N(u_{n+N} + u_{n-N} - 2u_n) \quad (12)$$

и при  $Nka \ll 1$  в первом порядке разложения его правой части в ряд преобразуется как

$$m\omega^2(k) \approx (ka)^2 \sum_{j=1}^N j^2 \kappa_j. \quad (13)$$

Таким образом, множество всех возможных «критических» сочетаний упругих констант, для которых в дисперсионной зависимости  $\omega(k)$  при малых  $k$  исчезают линейные по  $k$  члены и скорость звука  $v_s$  стремится к нулю, определяется из условия

$$\sum_{j=1}^N j^2 \kappa_j = 0, \quad (14)$$

что в рассматриваемом одномерном случае воспроизводит доказанное в [21] свойство симметрии элементов силовой матрицы.

Условие (14) по своему физическому смыслу является не чем иным, как условием полной компенсации положительных упругих констант отрицательными. Модуль Юнга такой предельно мягкой среды равен нулю, поэтому равна нулю и скорость звука. Обычные упругие волны в такой среде распространяться не могут, в отличие от изгибных волн с квадратичной дисперсией [19].

Таким образом, на простом примере линейной цепочки атомов нами продемонстрировано, что для появления изгибных колебательных мод с квадратичным законом дисперсии необходимо, чтобы в системе присутствовали межатомные связи с отрицательными силовыми константами. При этом по мере увеличения числа соседних атомов, взаимодействие с которыми принимается в расчет, растет и число всевозможных «критических» сочетаний констант взаимодействия.

### 2.2. Графен: взаимодействие с атомами из первой координационной сферы

Кристаллическая решетка графена, фрагмент которой представлен на рис. 1, состоит из правиль-

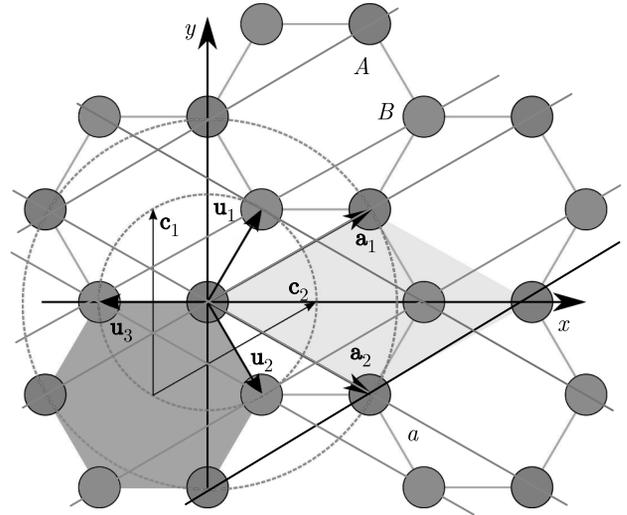


Рис. 1. Фрагмент кристаллической решетки графена [4]

ных шестиугольников. В ее элементарной ячейке находятся два атома углерода, которые на рисунке условно изображены красным и синим цветом и обозначены соответственно как А и В. Векторы  $\mathbf{u}_1$ ,  $\mathbf{u}_2$  и  $\mathbf{u}_3$  показывают положения трех ближайших «синих» соседей по отношению к одному из «красных» атомов. Если принять за начало отсчета один из узлов решетки, из которого проведена пара векторов элементарных трансляций  $\mathbf{a}_1$  и  $\mathbf{a}_2$ , и ввести декартову систему координат, как показано на рисунке, их координаты запишутся как [4, 5]

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \frac{a}{2} (3\mathbf{e}_x + \sqrt{3}\mathbf{e}_y), \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2} (3\mathbf{e}_x - \sqrt{3}\mathbf{e}_y), \end{aligned} \quad (15)$$

где  $a$  — постоянная кристаллической решетки. Им соответствуют элементарные векторы обратной решетки, показанные на рис. 2, на котором изображена первая зона Бриллюэна графена и ее точки особой симметрии:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{3}\mathbf{e}_x - \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{e}_y \right), \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{3}\mathbf{e}_x + \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{e}_y \right). \end{aligned} \quad (16)$$

Рассмотрим колебания атомов двумерной решетки графена в приближении ближайших соседей [22]. При этом будем рассматривать отдельно движение «красных» и «синих» атомов, обозначив их нормальные к плоскости графена смещения относительно положения равновесия соответственно как  $V_{n,m}$  и  $U_{n,m}$ . Здесь индексы  $n$  и  $m$  определяют положение атома на осях, направленных соответственно

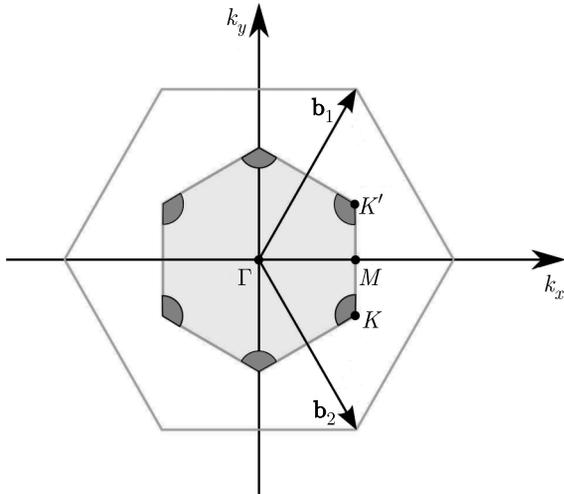


Рис. 2. Первая зона Бриллюэна с векторами обратной решетки  $\mathbf{b}_1$  и  $\mathbf{b}_2$  [4]

вдоль векторов  $\mathbf{a}_1$  и  $\mathbf{a}_2$ . Пусть  $\kappa_1$  — упругая константы взаимодействия атома  $(n, m)$  со своими соседями из первой координационной сферы, насчитывающей, как видно на рис. 1, три атома. Считая массы атомов одинаковыми, запишем их уравнения движения [12]:

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 U_{n,m}}{dt^2} &= \\ &= \kappa_1 (V_{n,m} + V_{n-1,m} + V_{n,m-1} - 3U_{n,m}), \\ m \frac{d^2 V_{n,m}}{dt^2} &= \\ &= \kappa_1 (U_{n,m} + U_{n+1,m} + U_{n,m+1} - 3V_{n,m}). \end{aligned} \quad (17)$$

Будем искать решения в виде плоских бегущих волн возмущения,

$$\begin{aligned} U_{n,m} &= u_0 \exp(i(\omega t - \mathbf{k}(n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2))), \\ V_{n,m} &= v_0 \exp(i(\omega t - \mathbf{k}(n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2))), \end{aligned} \quad (18)$$

где  $\omega(\mathbf{k})$  — фононная частота,  $\mathbf{k}$  — волновой вектор.

После подстановки (18) и введения обозначения  $\Omega_1^2 = \kappa_1/m$  уравнения (17) преобразуются к виду

$$\begin{aligned} U_{n,m} (\omega^2 - 3\Omega_1^2) + \\ + V_{n,m} \Omega_1^2 (1 + e^{i\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{k}} + e^{i\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{k}}) &= 0, \\ V_{n,m} (\omega^2 - 3\Omega_1^2) + \\ + U_{n,m} \Omega_1^2 (1 + e^{-i\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{k}} + e^{-i\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{k}}) &= 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Система (19) имеет нетривиальное решение при условии равенства нулю определителя

$$(\omega^2 - 3\Omega_1^2)^2 - \Omega_1^4 A(\mathbf{k}) A^*(\mathbf{k}) = 0, \quad (20)$$

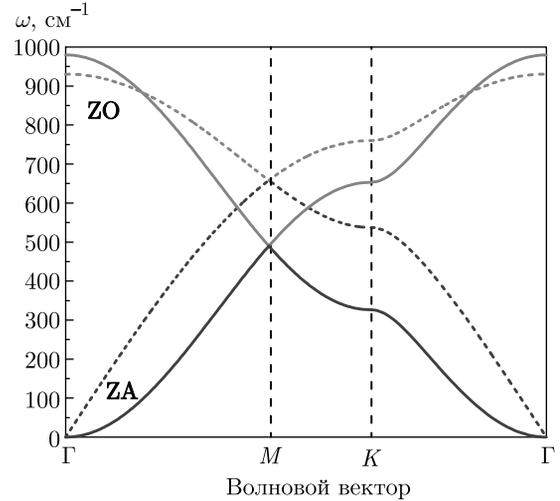


Рис. 3. Фононная дисперсия  $\omega(k)$  в графене при взаимодействии только с атомами из первой координационной сферы (штриховые линии) и с атомами из первых двух координационных сфер при  $\kappa_2 = -\kappa_1/6$  (сплошные линии)

где

$$A(\mathbf{k}) = 1 + e^{i\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{k}} + e^{i\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{k}}. \quad (21)$$

В результате выражение, определяющее зависимость  $\omega(\mathbf{k})$ , может быть записано как

$$(\omega^2 - 3\Omega_1^2)^2 - \Omega_1^4 (3 + 2f(\mathbf{k})) = 0, \quad (22)$$

где использована функция

$$f(\mathbf{k}) = \cos(\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{k}) + \cos(\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{k}) + \cos((\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{k}). \quad (23)$$

Таким образом, в случае учета взаимодействия только с соседями из первой координационной сферы закон дисперсии фононных мод в графене принимает вид

$$\omega^2 = \Omega_1^2 \left( 3 \pm \sqrt{3 + 2f(\mathbf{k})} \right), \quad (24)$$

где знаки «+» и «-» соответствуют оптической (ZO) и акустической (ZA) ветвям спектра.

Функция (23) при малых значениях волнового вектора может быть представлена в виде ряда по степеням  $k^2$ ,

$$f(\mathbf{k}) \approx 3 - \frac{9}{4} k^2 a^2 + \frac{27}{64} k^4 a^4 + \dots, \quad (25)$$

и, таким образом, в результате подстановки (25) в (24) получаем, что, как видно на рис. 3, для акустической ветви в длинноволновом пределе в дисперсионном соотношении наблюдается линейная зависимость  $\omega \sim k$ , как это было и в случае одномерной цепочки при учете взаимодействия с ближайшими соседями (5):

$$\omega \approx \frac{\sqrt{3}}{2} a\Omega_1 k = v_s k. \quad (26)$$

Таким образом, в случае, когда атом решетки графена взаимодействует только с ближайшими соседями из первой координационной сферы, изгибные моды с квадратичным законом дисперсии в системе отсутствуют. Как было продемонстрировано выше на примере линейной цепочки, для их появления необходимо учесть взаимодействие с более дальними соседями, что должно коренным образом изменить дисперсионные соотношения.

### 2.3. Графен: взаимодействие с атомами из двух ближайших координационных сфер

Запишем уравнения движения с учетом взаимодействия с атомами первой и второй координационных сфер:

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 U_{n,m}}{dt^2} &= \kappa_1 (V_{n,m} + V_{n-1,m} + V_{n,m-1} - 3U_{n,m}) + \\ &+ \kappa_2 (U_{n+1,m} + U_{n-1,m} + U_{n,m+1} + \\ &+ U_{n,m-1} + U_{n-1,m+1} + U_{n+1,m-1} - 6U_{n,m}), \quad (27) \\ m \frac{d^2 V_{n,m}}{dt^2} &= \kappa_1 (U_{n,m} + U_{n+1,m} + U_{n,m+1} - 3V_{n,m}) + \\ &+ \kappa_2 (V_{n+1,m} + V_{n-1,m} + V_{n,m+1} + \\ &+ V_{n,m-1} + V_{n-1,m+1} + V_{n+1,m-1} - 6V_{n,m}), \end{aligned}$$

где  $\kappa_2$  — упругая константа взаимодействия с соседями из второй координационной сферы, в которой, как видно на рис. 1, содержится шесть атомов, и вновь будем искать решения в виде бегущих волн вида (18).

В результате уравнения (27) преобразуются к виду

$$\begin{aligned} U_{n,m} (\omega^2 - 3\Omega_1^2 - 2\Omega_2^2(3 - f(\mathbf{k})) + \\ + V_{n,m}\Omega_1^2 A(\mathbf{k})) = 0, \quad (28) \\ V_{n,m} (\omega^2 - 3\Omega_1^2 - 2\Omega_2^2(3 - f(\mathbf{k})) + \\ + U_{n,m}\Omega_1^2 A^*(\mathbf{k})) = 0, \end{aligned}$$

где  $\Omega_1^2 = \kappa_1/m$  и  $\Omega_2^2 = \kappa_2/m$ .

Из условия равенства нулю определителя системы (28) следует соотношение для закона дисперсии

$$(\omega^2 - 3\Omega_1^2 - 2\Omega_2^2(3 - f(\mathbf{k})) - \Omega_1^4(3 + 2f(\mathbf{k}))) = 0 \quad (29)$$

и может быть получена искомая зависимость  $\omega^2(\mathbf{k})$ :

$$\omega^2 = \Omega_1^2 \left( 3 \pm \sqrt{3 + 2f(\mathbf{k})} \right) + 2\Omega_2^2(3 - f(\mathbf{k})). \quad (30)$$

При этом в случае учета взаимодействия только с соседями из первой координационной сферы, что эквивалентно условию  $\kappa_2 = 0$ , дисперсионное соотношение воспроизводит формулу (24).

Согласно заявленной цели работы, необходимо вновь проанализировать полученный закон дисперсии (30) в пределе малых  $k$ , чтобы определить «критическое» соотношение параметров  $\kappa_1$  и  $\kappa_2$ , при котором для акустической ветви будет наблюдаться квадратичная зависимость  $\omega \sim k^2$ , характерная для изгибных мод. Это соотношение значений упругих констант может быть получено из условия стремления частоты (30) к пределу (35) для акустической ветви,

$$\omega(k) \sim k^2, \quad (31)$$

в то время как частоты оптической ветви всегда отличны от нуля, поэтому для них это условие роли не играет. Действительно, используя разложение функции (23) в ряд (25), дисперсионное соотношение в длинноволновом пределе  $ka \ll 1$  можно записать как

$$\begin{aligned} \omega^2 \approx \Omega_1^2 \left( 3 \pm 3 \left( 1 - \frac{k^2 a^2}{4} + \frac{k^4 a^4}{64} \right) \right) + \\ + 9\Omega_2^2 \left( \frac{k^2 a^2}{2} - \frac{3}{32} k^4 a^4 \right). \quad (32) \end{aligned}$$

Легко видеть, что линейный по  $k^2$  член разложения (32) для акустической ветви,

$$\omega^2 \approx \frac{3}{4} k^2 a^2 (\Omega_1^2 + 6\Omega_2^2), \quad (33)$$

при «критическом» соотношении упругих констант  $\kappa_2 = -\kappa_1/6$  обращается в нуль, что соответствует стремлению к нулю скорости звука в пределе длинных волн:

$$v_s^2 = (3/4)a^2 (\Omega_1^2 + 6\Omega_2^2) \rightarrow 0. \quad (34)$$

При этом дисперсионное соотношение приобретает вид, соответствующий закону дисперсии, характерному для изгибных мод,  $\omega(k) \sim k^2$ ,

$$\omega^2 \approx \frac{3}{32} \Omega_1^2 k^4 a^4. \quad (35)$$

Таким образом, как и в случае линейной цепочки атомов, необходимым условием появления квадратичных изгибных мод в графене является наличие

в системе отрицательных упругих констант при сохранении ее устойчивости.

Следует также отметить, что при «критическом» соотношении констант выражение (30) в общем случае с точностью до численного множителя воспроизводит квадрат частоты (24). Действительно, возводя (24) в квадрат, получаем

$$\begin{aligned} \omega^4 &= \Omega_1^4 \left( 12 \pm 6\sqrt{3 + 2f(\mathbf{k})} + 2f(\mathbf{k}) \right) = \\ &= 6\Omega_1^4 \left( 2 \pm \sqrt{3 + 2f(\mathbf{k})} + \frac{f(\mathbf{k})}{3} \right). \end{aligned} \quad (36)$$

В свою очередь, при  $\kappa_2 = -\kappa_1/6$ , формула (30) естественным образом преобразуется к виду

$$\omega^2 = \Omega_1^2 \left( 2 \pm \sqrt{3 + 2f(\mathbf{k})} + f(\mathbf{k})/3 \right), \quad (37)$$

что отличается от (36) лишь численным коэффициентом, сохраняя функциональную зависимость закона дисперсии. Этот результат означает, что в «критическом» случае для получения закона дисперсии при учете двух координационных сфер достаточно просто возвести в квадрат выражение для закона дисперсии, соответствующего только первой координационной сфере. Другими словами, добавка к лапласиану взаимодействия с атомами первой координационной сферы лапласиана, соответствующего второй сфере, оказывается эквивалентной возведению первого лапласиана в квадрат. Немаловажно, что это выполняется во всем диапазоне волновых векторов.

Таким образом, можно сделать вывод, что, как видно на рис. 3, общий характер дисперсионной зависимости в широком диапазоне значений волнового вектора определяется взаимодействием с атомами из первой координационной сферы. Включение взаимодействия с соседями из второй сферы принципиально меняет низкочастотный закон дисперсии колебательных мод в графене. В случае «критического» соотношения упругих констант происходит смена линейной зависимости  $\omega(k)$ , определяемой взаимодействием с атомами первой координационной сферы, на квадратичную, соответствующую изгибным фононным модам, как это наблюдалось на примере линейной атомной цепочки. Как мы покажем ниже, для численных оценок дисперсии изгибных волн в графене учета двух координационных сфер практически вполне достаточно. Учет третьей сферы приводит лишь к незначительным поправкам, не превышающим 15%. Это означает, что дисперсия изгибных мод в графене с достаточной точностью аналитически описывается простой формулой (37),

которая не имеет подгоночных параметров, кроме выбора масштаба по горизонтальной и вертикальной осям.

## 2.4. Графен: учет взаимодействия с атомами из третьей координационной сферы

Учет взаимодействия с тремя атомами из третьей координационной сферы с упругой константой  $\kappa_3$  приводит к появлению дополнительных слагаемых в уравнениях, описывающих движение атомов в решетке графена:

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 U_{n,m}}{dt^2} &= \\ &= \kappa_1 \left( V_{n,m} + V_{n-1,m} + V_{n,m-1} - 3U_{n,m} \right) + \\ &+ \kappa_2 \left( U_{n+1,m} + U_{n-1,m} + U_{n,m+1} + \right. \\ &+ \left. U_{n,m-1} + U_{n-1,m+1} + U_{n+1,m-1} - 6U_{n,m} \right) + \\ &+ \kappa_3 \left( V_{n-1,m-1} + V_{n-1,m+1} + \right. \\ &\quad \left. + V_{n+1,m-1} - 3U_{n,m} \right), \end{aligned} \quad (38)$$

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 V_{n,m}}{dt^2} &= \\ &= \kappa_1 \left( U_{n,m} + U_{n+1,m} + U_{n,m+1} - 3V_{n,m} \right) + \\ &+ \kappa_2 \left( V_{n+1,m} + V_{n-1,m} + V_{n,m+1} + \right. \\ &+ \left. V_{n,m-1} + V_{n-1,m+1} + V_{n+1,m-1} - 6V_{n,m} \right) + \\ &+ \kappa_3 \left( U_{n+1,m+1} + U_{n-1,m+1} + \right. \\ &\quad \left. + U_{n+1,m-1} - 3V_{n,m} \right). \end{aligned}$$

После подстановки (18) и введения обозначения  $\Omega_3^2 = \kappa_3/m$  уравнения (38) преобразуются в систему алгебраических уравнений

$$\begin{aligned} U_{n,m} \left( \omega^2 - 3\Omega_1^2 - 2\Omega_2^2(3 - f(\mathbf{k})) - 3\Omega_3^2 \right) + \\ + V_{n,m} \left( \Omega_1^2(1 + e^{i\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{k}} + e^{i\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{k}}) + \right. \\ + \left. \Omega_3^2(e^{i(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{k}} + 2 \cos((\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{k})) \right) = 0, \\ V_{n,m} \left( \omega^2 - 3\Omega_1^2 - 2\Omega_2^2(3 - f(\mathbf{k})) - 3\Omega_3^2 \right) + \\ + U_{n,m} \left( \Omega_1^2(1 + e^{-i\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{k}} + e^{-i\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{k}}) + \right. \\ + \left. \Omega_3^2(e^{-i(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{k}} + 2 \cos((\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{k})) \right) = 0. \end{aligned} \quad (39)$$

Из требования равенства нулю ее определителя закон дисперсии приобретает вид

$$\begin{aligned} \omega^2 = & 3(\Omega_1^2 + \Omega_3^2) + 2\Omega_2^2(3 - f(\mathbf{k})) \pm \left[ \Omega_1^4(3 + 2f(\mathbf{k})) + \right. \\ & + \Omega_3^4(1 + 4\cos^2((\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)k) + 4\cos((\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)k) \times \\ & \times \cos((\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)k)) + \Omega_1^2\Omega_3^2(2\cos((\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)k) + \\ & + 2\cos((\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)k) + 4\cos((\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)k) \times \\ & \left. \times (\cos(\mathbf{a}_1 k) + \cos(\mathbf{a}_2 k)) + 2f(\mathbf{k}) \right]^{1/2}. \quad (40) \end{aligned}$$

С использованием явного вида функции  $f(\mathbf{k})$  и трансляционных векторов  $\mathbf{a}_1$  и  $\mathbf{a}_2$  (15) зависимость (40) от проекций волнового вектора  $k_x$  и  $k_y$  может быть приведена к виду

$$\begin{aligned} \omega^2 = & 3(\Omega_1^2 + \Omega_3^2) + 2\Omega_2^2(3 - f(\mathbf{k})) \pm \\ & \pm \left[ \Omega_1^4(3 + 2f(\mathbf{k})) + \Omega_3^4(1 + 4\cos^2(\sqrt{3}k_y) + \right. \\ & + 4\cos(\sqrt{3}k_y a) \cos(3k_x a)) + \\ & + \Omega_1^2\Omega_3^2(2\cos(3k_x a) + 2\cos(\sqrt{3}k_y a) + \\ & + 8\cos(\sqrt{3}k_y a) \cos(\frac{3}{2}k_x a) \times \\ & \left. \times \cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a) + 2f(\mathbf{k})) \right]^{1/2}. \quad (41) \end{aligned}$$

Важно отметить, что формула (41) в общем случае воспроизводит дисперсионную зависимость для изгибных колебаний, полученную в работе [11] с помощью векторной модели Борна – фон Кармана.

С учетом (25) в пределе малых  $k$  выражение (41) можно разложить в ряд, ограничившись членами первого порядка:

$$\begin{aligned} \omega^2 \approx & 3(\Omega_1^2 + \Omega_3^2) + \frac{9}{2}\Omega_2^2 k^2 a^2 \pm \\ & \pm 3(\Omega_1^2 + \Omega_3^2) \left( 1 - \frac{1}{4}k^2 a^2 \frac{\Omega_1^4 + 4\Omega_3^4 + 5\Omega_1^2\Omega_3^2}{(\Omega_1^2 + \Omega_3^2)^2} \right). \quad (42) \end{aligned}$$

Для акустической ветви формула (42) преобразуется как

$$\omega^2 \approx \frac{3}{4}k^2 a^2 (\Omega_1^2 + 6\Omega_2^2 + 4\Omega_3^2), \quad (43)$$

и при  $\kappa_3 \neq 0$  «критическое» соотношение упругих констант, обеспечивающее возможность распространения изгибных мод в решетке графена, уже не сводится к единственно возможному сочетанию  $\kappa_1$ ,  $\kappa_2$  и  $\kappa_3$ . При этом в случае фиксированной  $\kappa_1$  возможные «критические» значения двух оставшихся параметров  $\kappa_2$  и  $\kappa_3$  определяются по формуле (45), а их

связь также может быть представлена в виде функционального соотношения

$$\kappa_1 + 6\kappa_2 + 4\kappa_3 = 0, \quad (44)$$

которое в точности совпадает с результатом, полученным в работе [15] на основе анализа симметрии тензора модулей упругости.

При фиксированном  $\kappa_1$  также может быть использовано соотношение для приведенных безразмерных параметров  $\tilde{\Omega}_2 = \Omega_2/\Omega_1$  и  $\tilde{\Omega}_3 = \Omega_3/\Omega_1$ , при котором исчезает квадратичный член в законе дисперсии (43),

$$\tilde{\Omega}_3^2 = -\frac{3}{2}\tilde{\Omega}_2^2 - \frac{1}{4}, \quad (45)$$

что эквивалентно функциональной зависимости между упругими константами (44).

Легко убедиться, что, как и в случае линейной цепочки (14), соотношение (44) соответствует условию

$$\sum_{j=1}^3 N_j \kappa_j r_j^2 = 0, \quad (46)$$

где  $N_j$  – число атомов в  $j$ -й координационной сфере, а  $r_j$  – ее радиус. Для графена  $N_1 = 3$ ,  $N_2 = 6$ ,  $N_3 = 3$ , а  $r_1^2 = a^2$ ,  $r_2^2 = 3a^2$ ,  $r_3^2 = 4a^2$ . Равенство нулю суммы (46) также обеспечивает необходимое при описании изгибных колебаний сокращение вкладов в закон дисперсии от положительных и отрицательных упругих констант. Следует отметить, что как и в ситуации с линейной цепочкой атомов, полученное соотношение легко обобщить на случай учета взаимодействия с атомами из произвольного числа координационных сфер, узлы которых соответствуют вершинам правильных вписанных  $N_j$ -угольников.

Таким образом, упругие константы взаимодействия координационных сфер оказываются между собой непосредственно взаимосвязаны, и включение взаимодействия с атомами третьей координационной сферы для удовлетворения «критическим» условиям требует изменения констант  $\kappa_1$  и  $\kappa_2$ . Можно сделать вывод, что при учете взаимодействия с минимально необходимым числом соседних атомов путем подбора соотношения упругих констант всегда есть возможность обеспечить отсутствие линейного члена в дисперсионном соотношении  $\omega(\mathbf{k})$ , что является характерным признаком изгибных мод с квадратичной дисперсией в рассматриваемой кристаллической решетке.

### 2.4.1. Точки симметрии в первой зоне Бриллюэна

Отдельный интерес представляет анализ формулы (41) в точках симметрии первой зоны Бриллюэна, отмеченных на рис. 2.

Для  $\Gamma$ -точки, для которой  $\mathbf{k} = 0$  и  $f(\mathbf{k}) = 3$ , отлична от нуля только частота оптической ветви,

$$\omega_{\Gamma O}^2 = 6(\Omega_1^2 + \Omega_3^2), \quad (47)$$

значение которой не зависит от влияния атомов второй координационной сферы.

В седловой точке  $M$ , которой соответствует волновой вектор

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2}{2} = \left( \frac{2\pi}{3a}, 0 \right), \quad (48)$$

$f(\mathbf{k}) = -1$  и частоты нормальных мод удовлетворяют соотношению

$$\omega^2 = 3(\Omega_1^2 + \Omega_3^2) + 8\Omega_2^2 \pm (\Omega_1^2 - 3\Omega_3^2). \quad (49)$$

При этом интересно, что частота оптической ветви

$$\omega_{MO}^2 = 2(2\Omega_1^2 + 4\Omega_2^2), \quad (50)$$

в этом случае не зависит от влияния атомов третьей координационной сферы, а частота акустической ветви равна

$$\omega_{MA}^2 = 2(\Omega_1^2 + 4\Omega_2^2 + 3\Omega_3^2). \quad (51)$$

Несколько иной вид приобретает закон дисперсии для точек Дирака  $K$  и  $K'$ , т. е. для точек

$$\mathbf{k} = \left( \pm \frac{2\pi}{3a}, \pm \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right), \quad (52)$$

а также для точек

$$\mathbf{k} = \left( 0, \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \right), \quad (53)$$

для которых  $f(\mathbf{k}) = -3/2$ ,

$$\omega_{KO,A}^2 = 3(\Omega_1^2 + \Omega_3^2 + 3\Omega_2^2), \quad (54)$$

т. е. частоты оптической и акустической ветвей, как и следовало ожидать, совпадают.

Важно отметить, что выражения (47), (50), (51), (54) в точности совпадают с формулами для частот в симметричных точках зоны Бриллюэна, полученными в работах [11, 14], где для упругих констант  $\kappa_1$ ,  $\kappa_2$  и  $\kappa_3$  были использованы соответственно обозначения  $-\alpha_z$ ,  $-\gamma_z$  и  $-\alpha'_z$ .

### 2.5. Обсуждение результатов

Итак, при «критическом» соотношении упругих констант низкочастотные изгибные фононы с линейным законом дисперсии не могут распространяться в графене, поскольку их модуль упругости и скорость звука стремятся к нулю. Им на смену приходят изгибные моды с более сложным законом дисперсии [15], который вблизи «критического» состояния может быть представлен в виде (32)

$$\omega^2(k) = \alpha k^2 + \beta k^4, \quad (55)$$

где  $\alpha \sim (\kappa_1 + \kappa_2/6)$ , а  $\beta \sim 1$ . В точке перехода в режим изгибных мод  $\alpha = 0$  и скорость звука  $v_s$  при  $k \rightarrow 0$  обращается в нуль (34).

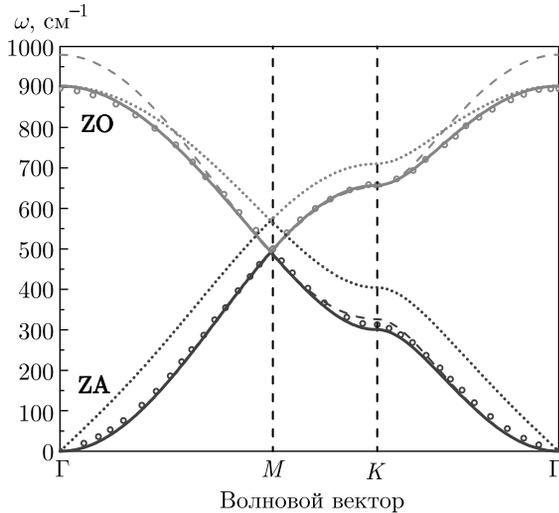
Чтобы обеспечить возможность анализа результатов в абсолютных значениях, перепишем формулу (41) для дисперсионной зависимости в более удобном виде:

$$\begin{aligned} \omega^2 = \Omega_1^2 \left\{ 3 \left( 1 + \tilde{\Omega}_3^2 \right) + 2\tilde{\Omega}_2^2(3 - f(\mathbf{k})) \pm \right. \\ \pm \left[ (3 + 2f(\mathbf{k})) + \tilde{\Omega}_3^4 \left( 1 + 4 \cos^2(\sqrt{3}k_y) + \right. \right. \\ \left. \left. + 4 \cos(\sqrt{3}k_y) \cos(3k_x) \right) + \right. \\ \left. + \tilde{\Omega}_3^2 \left( 2 \cos(3k_x) + 2 \cos(\sqrt{3}k_y) + \right. \right. \\ \left. \left. + 8 \cos(\sqrt{3}k_y) \cos\left(\frac{3}{2}k_x\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right) + \right. \right. \\ \left. \left. + 2f(\mathbf{k}) \right]^{1/2} \right\}. \quad (56) \end{aligned}$$

Такая форма записи позволяет использовать частоту  $\Omega_1$  как свободный параметр, а для безразмерных приведенных частот  $\tilde{\Omega}_2$  и  $\tilde{\Omega}_3$  в случае их «критического» соотношения по-прежнему выполняются условия их взаимосвязи (45).

Нами была поставлена задача выяснить, позволяет ли используемый подход воспроизвести результаты численных расчетов других авторов, основанных на более сложных моделях, а также определить, взаимодействие с каким минимальным количеством атомов для этого необходимо учесть.

На рис. 4 для сравнения приведены результаты, полученные в работе Фальковского [11] для изгибных фононных мод с учетом взаимодействия с атомами трех ближайших координационных сфер в рамках векторной модели Борна – фон Кармана,



**Рис. 4.** Фононная дисперсия в графене для изгибных мод с учетом взаимодействия с атомами двух (штриховые линии) и трех (сплошные линии) ближайших координационных сфер при «критическом» соотношении упругих констант. Пунктирными линиями представлены дисперсионные кривые при соотношении констант взаимодействия отличном от «критического». Кружками приведены результаты расчета из работы [11]

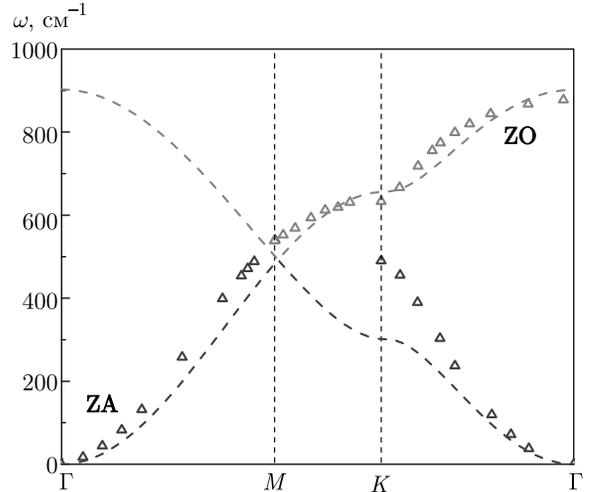
где при проведении расчетов был использован набор упругих констант, обеспечивающий воспроизведение отличной от нуля скорости акустических изгибных волн в графене в длинноволновом пределе,

$$v_s = a(-0.75\alpha_z - 3\alpha'_z - 4.5\gamma_z)^{1/2}.$$

Частоты закона дисперсии, полученные в [11], показаны кружками красного и синего цвета соответственно для оптической (ZO) и акустической (ZA) мод. Тонкими штриховыми линиями показаны результаты расчета по формуле (56), соответствующие учету взаимодействия только с двумя ближайшими координационными сферами, т. е. при  $\tilde{\Omega}_2^2 = -1/6$  и  $\tilde{\Omega}_3^2 = 0$ ,  $\Omega_1 = 400 \text{ см}^{-1}$ . На графике видно, что, несмотря на хорошее согласие с результатами [11] для волновых векторов в окрестностях точек K и M, наблюдается заметное расхождение для частот оптической ветви при малых k. На этом же графике сплошными линиями соответствующего цвета также показаны дисперсионные кривые, полученные с учетом взаимодействия с тремя ближайшими координационными сферами при соотношении упругих констант,

$$\tilde{\Omega}_2^2 = -\frac{1}{6} + 0.04 = -0.12667,$$

$$\tilde{\Omega}_3^2 = -\frac{3}{2}\tilde{\Omega}_2^2 - \frac{1}{4} = -0.06, \quad \Omega_1 = 380 \text{ см}^{-1}.$$



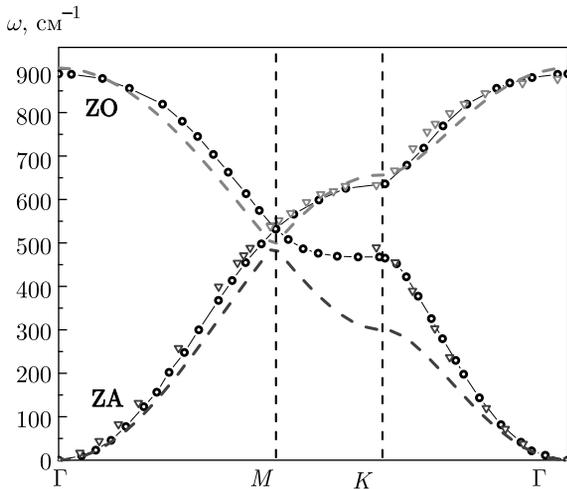
**Рис. 5.** Сравнение экспериментальных данных фононной дисперсии в графите [8] с результатами расчета по формуле (56)

Значения констант были подобраны таким образом, чтобы одновременно удовлетворить «критическим» соотношениям и при этом добиться возможно лучшего согласия с результатами [11] во всем диапазоне волновых векторов.

Из полученных графиков следует, что дополнительный учет взаимодействия с атомами из третьей координационной сферы приводит к лучшему согласию для оптической ветви в области малых значений волнового вектора, практически не изменяя дисперсионную зависимость на краях зоны Бриллюэна. При этом влияние второй координационной сферы является существенно более заметным. На рис. 4 пунктирными линиями представлены дисперсионные кривые, учитывающие взаимодействие с атомами из трех координационных сфер, при  $\tilde{\Omega}_2^2 = -0.0633$ , т. е. вдвое меньшем по абсолютной величине по сравнению с «критическим» значением. Из графика следует, что в области малых k дисперсионная зависимость приобретает не квадратичный, а линейный характер, а также заметно возрастают частоты обеих фононных ветвей в окрестности точек K и M.

Представляет интерес сравнение полученных результатов с экспериментальными данными. К сожалению, достоверные экспериментальные результаты непосредственно по графену отсутствуют, но остается возможность использовать, например, данные, полученные из эксперимента по упругому рассеянию рентгеновских лучей в графите [8].

На рис. 5 сравниваются результаты эксперимента [8] и нашего численного расчета по форму-



**Рис. 6.** Сравнение экспериментальных данных фононной дисперсии в графите [8] (треугольники), численных расчетов в приближении DFT-LDA [9, 16] (черные кружки) и результатов, полученных на основе формулы (56) (штриховые линии)

ле (56) с учетом взаимодействия с тремя ближайшими координационными сферами. При вычислениях использовались те же значения упругих констант  $\tilde{\Omega}_2^2 = -0.12667$ ,  $\tilde{\Omega}_3^2 = -0.06$  и  $\Omega_1 = 380 \text{ см}^{-1}$ , которые обеспечили наилучшее согласие с данными из работы [11], соответствующие кривые изображены штриховыми линиями на рис. 4. Из графика следует, что наблюдается достаточно хорошее согласие результатов для ZA-моды на участке  $\Gamma-K$ , а также для ZO-моды на участках  $\Gamma-M-K$ . В то же время, присутствует заметное расхождение для акустической фононной ветви на участке  $M-\Gamma$ , которое может быть объяснено влиянием взаимодействия между соседними слоями графита. Величина этого взаимодействия согласно оценке, сделанной в работе [11], составляет около  $130 \text{ см}^{-1}$ , что по порядку величины согласуется с расхождением между вычисленным значением частоты акустической ветви в точке  $M$ ,  $\omega_{MA}$ , и соответствующей частотой в графите.

Теоретические расчеты дисперсии фононов также проводились в ряде работ с использованием методов функционала плотности [9, 16] и с использованием эффективных потенциалов межатомного взаимодействия [17]. На рис. 6 для сравнения представлены результаты расчетов нескольких авторов [9, 16], а также экспериментальные данные [8] и наши кривые, полученные при «критических» параметрах, обеспечивших согласие с результатами из статьи [11].

Из сравнения графиков видно, что как наши расчеты, так и результаты [11] демонстрируют качественное согласие с экспериментальными результатами и расчетами, использующими приближение локальной плотности для учета электрон-фононного взаимодействия в графите. В то же время, по-прежнему наблюдается численное расхождение для части спектра акустической ветви. Можно предположить, что хорошее согласие между экспериментом и расчетными данными [9, 16] обеспечивалось в первую очередь тем, что значения силовых констант в этих работах специально подбирались таким образом, чтобы добиться наилучшего воспроизведения экспериментальных дисперсионных зависимостей в графите, в то время как в нашей работе выбор параметров определялся, исходя из требования квадратичного закона дисперсии для акустической ветви в длинноволновом пределе. Кроме того, по сравнению с упомянутыми работами, мы не учитывали влияния соседей из четвертой координационной сферы, а также роль электрон-фононного взаимодействия. Таким образом, в целом наша модель дает хорошее качественное описание дисперсионной зависимости для изгибных фононных мод в графене и наглядно демонстрирует, что дополнительный учет взаимодействия с более дальними соседями в его кристаллической решетке может кардинально менять характер фононного спектра.

### 3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, на основе проведенного анализа в рамках простой мы показали, что физической причиной аномальной квадратичной дисперсии изгибных акустических волн в графене является близость упругих констант второй и третьей конфигурационных сфер к «критическому» соотношению (44), что возможно только при отрицательных значениях этих констант и достаточной их абсолютной величине. Определяющую роль в изменении закона дисперсии играет взаимодействие с атомами второй координационной сферы, в то время как более дальние соседи вносят только сравнительно незначительные количественные поправки. При этом дополнительный учет взаимодействия с соседними атомами даже только из второй конфигурационной сферы качественно меняет характер спектра колебательных мод в решетке графена по сравнению с результатами при взаимодействии только с самыми ближайшими соседями. Мы пока не можем сделать окончательный

вывод о дисперсионной зависимости изгибных мод в графене, характер которой зависит от реального соотношения упругих констант, которые могут быть определены или непосредственно из экспериментальных данных или на основе теоретических расчетов *ab initio*. Однако сравнение с результатами экспериментальных измерений дает основание считать, что в низкочастотной области дисперсионная зависимость близка к параболической, и, таким образом, мы находимся либо в «критической» ситуации, либо очень близко к ней.

**Благодарности.** Авторы выражают искреннюю благодарность Ю. М. Гальперину за продуктивное обсуждение результатов работы и полезные замечания.

## ЛИТЕРАТУРА

1. В. И. Балабанов, *Нанотехнологии. Наука будущего*, Эксмо, Москва (2009).
2. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., *Science* **306**, 666 (2004).
3. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., *Nature* **438**, 197 (2005).
4. M. I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions*, Cambridge University Press, NY (2012).
5. M. I. Katsnelson, *The Physics of Graphene*, Cambridge University Press, NY (2020).
6. L. J. Karssemeijer and A. Fasolino, *Surf. Sci* **605**, 1611 (2011).
7. Hanyu Zhu, Jun Yi, Ming-Yang Li et al., *Science* **359**, 579 (2018).
8. M. Mohr, J. Maultzsch et al., *Phys. Rev. B* **76**, 035439 (2007).
9. L. Wirtz and A. Rubio, *Solid State Comm.* **131**, 141 (2004).
10. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (1987).
11. Л. А. Фальковский, *ЖЭТФ* **142**, 560 (2012).
12. И. О. Райков, Д. А. Колюх, А. Н. Ипатов, Д. А. Паршин, *ФТТ* **11**, 1866 (2020).
13. L. A. Falkovsky, *ЖЭТФ* **132**, 446 (2007).
14. L. A. Falkovsky, *Phys. Lett. A* **372**, 5189 (2008).
15. Е. С. Сыркин, С. Б. Феодосьев, К. В. Кравченко и др., *ФНТ* **35**, 208 (2009).
16. O. Dubay and G. Kresse, *Phys. Rev. B* **67**, 035401 (2003).
17. V. K. Tewary and B. Yang, *Phys. Rev. B* **79**, 075442 (2009).
18. R. Saito, G. Dresselhaus and M. S. Dresselhaus, *Physical and Chemical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press, UK (2003).
19. Г. Л. Беленький, Э. Ю. Салаев, Р. А. Сулейманов, *УФН* **155**, 89 (1988).
20. П. В. Павлов, А. В. Хохлов, *Физика твердого тела*, Высшая школа, Москва (2000).
21. А. М. Косевич, *Основы механики кристаллической решетки*, Наука, Москва (1972).
22. Д. А. Колюх, Я. М. Бельтюков, Д. А. Паршин, *ФТТ* **60**, 369 (2018).

# ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВА ГЕЙСЛЕРА $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$

*Е. И. Шредер*<sup>a</sup>, *А. В. Лукоянов*<sup>a,b\*</sup>, *А. А. Махнев*<sup>a</sup>, *Ю. И. Кузьмин*<sup>a</sup>,  
*Шубра Даш*<sup>c\*\*</sup>, *Аджит К. Патра*<sup>c\*\*</sup>, *М. Васундхара*<sup>d\*\*</sup>

<sup>a</sup> *Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук  
620108, Екатеринбург, Россия*

<sup>b</sup> *Уральский федеральный университет  
620002, Екатеринбург, Россия*

<sup>c</sup> *Central University of Rajasthan  
NH-8, Bandrasindri 305817, Rajasthan, India*

<sup>d</sup> *Polymers and Functional Materials Department, CSIR-Indian Institution of Chemical Technology  
Tarnaka-500007, Hyderabad, Telangana, India*

Поступила в редакцию 6 апреля 2021 г.,  
после переработки 27 мая 2021 г.  
Принята к публикации 27 мая 2021 г.

Выполнены теоретические расчеты электронной структуры и измерение оптических свойств сплава Гейслера  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ . Оптимизированная кристаллическая структура типа  $\beta$ -Mn, основанная на теории функционала плотности, представлена для  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ . Обнаружено аномальное для металлов поведение оптической проводимости сплава в инфракрасной области спектра, а именно, отсутствие друдевского вклада и высокий уровень межзонного поглощения. Такие особенности оптического спектра указывают на сложную структуру зонного спектра и высокую плотность состояний в окрестности и на уровне Ферми. Особенности на кривой оптической проводимости соответствуют определенным межзонным переходам электронов.

DOI: 10.31857/S0044451021100114

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Сплавы Гейслера на основе марганца привлекают большое внимание благодаря разнообразным и сложным магнитным фазовым диаграммам и возможным улучшенным термоэлектрическим свойствам [1]. В этой серии сплавов Гейслера антиструктурные дефекты и отклонения от стехиометрии могут привести к улучшению необходимых характеристик, что делает их перспективными для многофункциональных приложений. Недавно сплавы Гейслера  $Mn_2MeZ$  ( $Me$  — переходный металл,  $Z$  — элемент III–V групп) привлекли внимание как перспективные материалы для спинтроники, поскольку, как сообщается, обладают бесщелевой спино-

вой плотностью состояний полупроводникового типа. Система сплавов  $Mn_2MeAl$  ( $Me = Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni$ ) демонстрирует сильный ферромагнетизм или компенсированный ферримагнетизм с возможностью фазовых переходов с изменением магнитной структуры [2], обсуждаются изменения электронной структуры, включая состояния полуметаллического ферромагнетика и спинового бесщелевого полупроводника.

Среди большого семейства сплавов Гейслера материалы, содержащие переходные металлы Mn и Fe, представляют интерес благодаря их химическому подобию, которое допускает богатую и сложную магнитную фазовую диаграмму [3, 4]. Более того, с точки зрения рентабельности, доступность и отсутствие редкоземельных элементов в составе, сплавы на основе Mn и Fe, являются многообещающими кандидатами для разработки новых сплавов Гейслера. В нашей предыдущей работе [5] для сплава Гейслера  $Mn_2FeAl$  было показано, что картина плот-

\* E-mail: lukoyanov@imp.uran.ru

\*\* Shubhra Dash, Ajit K. Patra, M. Vasundhara

ности состояний  $N(E)$  существенно различается для структур типа  $L2_1$ , X и  $\beta$ -Mn.

В настоящей работе мы сообщаем результаты изучения кристаллической и электронной структур через исследование оптических свойств сплава Гейслера  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ . Цель этой работы провести структурную оптимизацию и расчеты электронной структуры, а также получить информацию об электронной структуре из экспериментального изучения оптических свойств данного сплава Гейслера и дать их интерпретацию на основе теоретических расчетов.

## 2. МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Поликристаллический образец сплава  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$  был приготовлен традиционным методом дуговой плавки с последующим отжигом, как сообщалось в нашей ранней работе [5]. Переплавка была повторена несколько раз для обеспечения лучшей однородности. Полученный слиток был отожжен в вакууме в течение 3 дней при температуре  $1000^\circ C$ , охлажден до  $650^\circ C$  и вновь отожжен в течение 3 дней, а затем следовало медленное охлаждение со скоростью  $5^\circ C/мин$ . Образец в виде порошка был проанализирован на рентгеновском дифрактометре PANalytical, Empyrean, Нидерланды, в  $K_\alpha$ -излучении Cu при комнатной температуре. Химический состав образца определен с помощью рентгеновской энерго-дисперсионной спектроскопии (EDX) на сканирующем электронном микроскопе (JEOL-SEM 5601v, Токио, Япония), найдено, что он находится в рамках номинального состава.

Зеркальные поверхности для оптических исследований были получены шлифованием образцов на микропорошках карбида бора разной дисперсности и полированием на окиси хрома. Действительная  $\epsilon_1(\omega)$  и мнимая  $\epsilon_2(\omega)$  части диэлектрической проницаемости измерены эллисометрическим методом Битти при комнатной температуре на воздухе в спектральной области 0.1–5 эВ (0.25–13 мкм). Точность измерений составила 2–5 % в ультрафиолетовой, видимой и инфракрасной (ИК) областях спектра. Оптическая проводимость равна  $\sigma(\omega) = \epsilon_2\omega/4\pi$ , где  $\omega$  — циклическая частота световой волны. Электронная структура сплава Гейслера была рассчитана в компьютерном пакете программ Quantum ESPRESSO (QE) [6] с обменно-корреляционным потенциалом в приближении обобщенной градиентной поправки (GGA) в версии Педью–Бурке–Эрнзенхофа (PBE). Волновые функ-

ции разложены по плоским волнам. В расчетах мы использовали те же стандартные ультрамягкие псевдопотенциалы из библиотеки QE, что и в работе [5]. В наших расчетах для достижения требуемой сходимости в цикле самосогласования использован предел энергии 60 Ry для плоских волн. Интегрирование в обратном пространстве проведено по сетке из  $\mathbf{k}$ -точек  $8 \times 8 \times 8$ , аналогично [5]. Код постобработки QE epsilon.x [6] использован для вычисления действительной и мнимой частей диэлектрического тензора совместно с плотностью состояний, исходя из вычисленных собственных значений и собственных векторов. В расчетах этого кода берутся межзонные переходы, т. е. вертикальные переходы, при которых сохраняется импульс электрона  $\mathbf{k}$ .

## 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Уточнение данных рентгеновской дифракции (XRD) методом Ритвельда представлено на рис. 1. Измеренная полная картина XRD структуры типа  $\beta$ -Mn (пространственная группа  $P4_132$ ) может быть проиндексирована как кубическая элементарная ячейка. Подобные наблюдения ранее сообщались для соединения  $Fe_{1.5}Pd_{0.5}Mo_3N$  [7] и сплава  $Mn_2FeAl$ , полученного дуговой или индукционной плавкой [5, 8]. Не обнаружено никаких следов какой-либо второй фазы, что указывало на то, что сплав однофазный. Уточнение экспериментальных данных по Ритвельду с использованием пакета FULLPROF было выполнено в рамках простран-

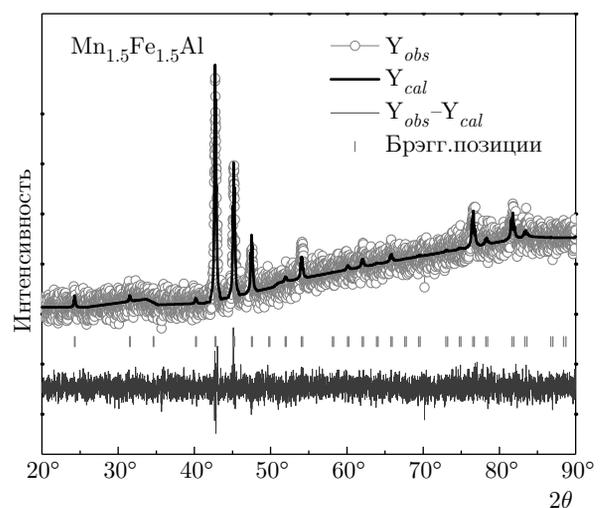


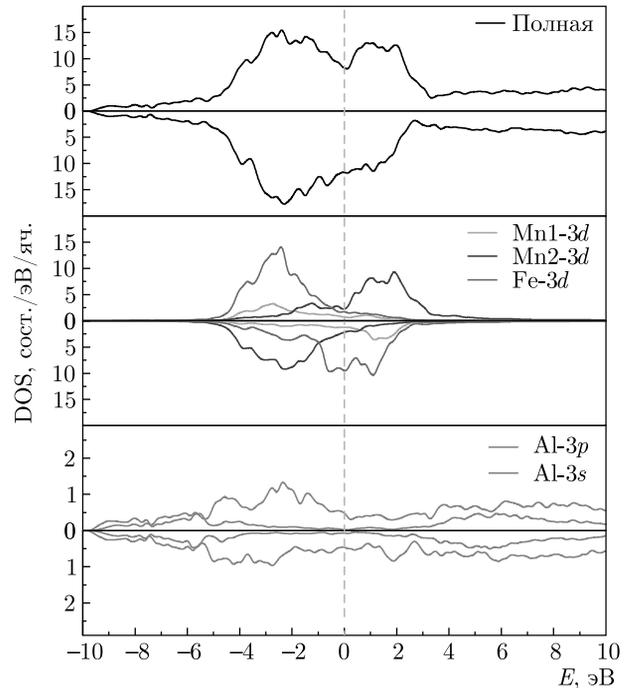
Рис. 1. (В цвете онлайн) Рентгенограмма сплава  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$  при комнатной температуре вместе с данными уточнения Ритвельда

**Таблица.** Рассчитанные в данной работе оптимизированные координаты ионов в  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$

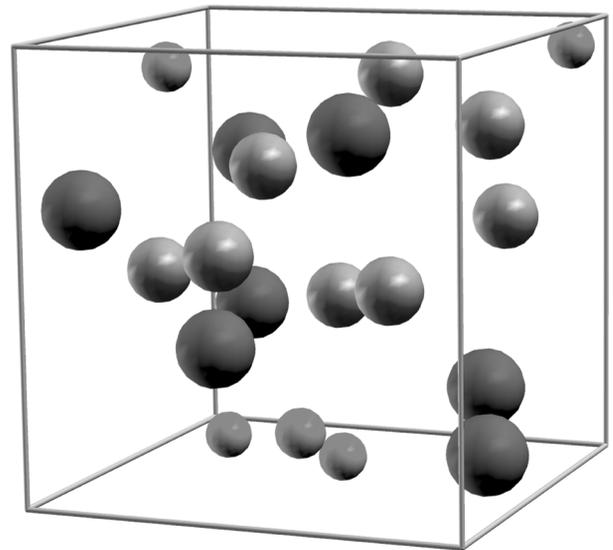
Ион	$x$	$y$	$z$
Al	0.0717	0.0690	0.0744
Fe	0.3213	0.1920	-0.1896
Fe	-0.2105	0.3139	0.1697
Fe	0.1925	-0.1908	0.3208
Fe	-0.3228	-0.3178	-0.3145
Mn1	-0.4426	0.4427	-0.0631
Mn1	0.4435	-0.0635	-0.4275
Al	-0.0669	-0.4486	0.4231
Fe	-0.3055	0.0349	-0.1100
Fe	-0.1239	-0.2934	0.0433
Al	0.0481	-0.1244	-0.2960
Fe	0.3750	-0.1956	-0.0451
Al	-0.0518	0.3677	-0.1974
Al	-0.1972	-0.0411	0.3668
Mn2	0.4557	0.1134	0.1973
Mn2	0.2035	0.4601	0.1171
Mn2	0.1459	0.2032	0.4609
Mn2	-0.4526	-0.3671	0.2928
Mn2	0.2975	-0.4480	-0.3670
Mn2	-0.3810	0.2934	-0.4559

ственной группы  $P4_132$  с выбором функций псевдо-Фойгта и полиномиальных функций соответственно для определения формы пика и уточнения фона. Уточненный параметр решетки  $a = 6.34(4) \text{ \AA}$ .

При вычислениях электронной структуры было использовано экспериментальное значение параметра решетки для оптимизированных позиций атомов. Оптимизированные координаты ионов в сплаве  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ , вычисленные в работе, приведены в таблице. Кривые плотности состояний (DOS) и изображение кристаллической структуры, полученные в программном пакете XCrysDen ((X-Window) Crystalline Structures and Densities) [9], приведены на рис. 2 и 3. Была использована структура типа  $\beta$ -Mn близкого по составу сплава  $Mn_2FeAl$  [5]



**Рис. 2.** (В цвете онлайн) Полная и частичная плотности состояний сплава Гейслера  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$



**Рис. 3.** (В цвете онлайн) Оптимизированная кристаллическая структура  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ , где Al показан маленькими зелеными сферами, Fe — большими красными сферами, Mn — серыми сферами

с  $12d$ -позициями, занятыми атомами 3 Al, 3 Fe, 6 Mn, и  $8c$ , занятыми атомами 2 Al, 4 Fe, 2 Mn. Рассчитанный полный магнитный момент определен как  $1.76 \mu_B$ /форм. ед. Возникающее в результате магнитное упорядочение в этих конфигурациях

состоит из ферро- и антиферромагнитно расположенных атомов Mn, антиферромагнитно упорядоченных в основном в позициях 8с. Средний магнитный момент определен соответственно как 3.1 (Mn2) и 2.2 (Mn1), 0.7 (Fe) и 0.2 (Al)  $\mu_B$ . В результате они дают разные вклады в плотность состояний и результирующий магнитный момент. Для  $Mn_2FeAl$  расчеты электронной структуры [5] привели к той же структуре и типу упорядочения со средним магнитным моментом на атомах Mn, Fe и Al соответственно как 3.1, 1.1 и  $0.2\mu_B$  с полным магнитным моментом  $4.4\mu_B$ /форм. ед. Разница полного магнитного момента сплавов  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$  и  $Mn_2FeAl$  [5] обусловлена разным числом ионов Mn и Fe в ячейке, ионы Fe и Mn1 упорядочены антиферромагнитно ионам Mn2. Таким образом,  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$  оказался ферромагнетиком с более низким полным магнитным моментом в сравнении с  $Mn_2FeAl$  (все данные для  $Mn_2FeAl$  взяты из работы [5]).

На рис. 2 приведены кривые плотности состояний (DOS) сплава. Нужно отметить существенную разницу картин плотности  $3d$ -состояний атомов Mn2, Fe, Mn1 для зон со спином вверх и вниз. В результате магнитные моменты атомов Fe, Mn1 направлены в одну сторону, атомов Mn2 — в противоположную. Таким образом, мы видим ферромагнетик. Плотность состояний на уровне Ферми для обеих спиновых подсистем достаточно высокая. В сравнении со сплавом  $Mn_2FeAl$  с той же кристаллической структурой [5] обе проекции спина более симметричны, поскольку наиболее спин-поляризованные состояния ионов Mn2 в  $Mn_2FeAl$ , менее интенсивные в  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ , частично замещены ионами Fe. С другой стороны, большее число ионов Fe со спиновой поляризацией дает дополнительные электронные состояния в занятой части со спином «вверх» и свободной части со спином «вниз» в сравнении с  $Mn_2FeAl$ . Для спинов «вверх» вклад в плотность состояний происходит от  $3d$ -состояний атомов Mn2, Fe, Mn1. Для спинов «вниз»  $3d$ -состояния атомов Fe дают основной вклад. Плотность  $3p$ - $3s$ -состояний Al низкая и равномерно распределена по широкой области энергий.

Оптические свойства металлов определяются комплексной диэлектрической проницаемостью  $\epsilon = \epsilon_1 - i\epsilon_2$  [10]. В ИК-области спектра основную роль в формировании оптических свойств играет механизм внутризонного ускорения электронов полем световой волны, так называемый вклад Друде. Вклад этого механизма определяется параметрами электронов проводимости: плазменной частотой  $\Omega$  и частотой релаксации  $\gamma$ , и убывает

пропорционально квадрату частоты падающего света  $\omega^2$ . Для кубических кристаллов  $\Omega^2$  связана с потоком скорости электронов через поверхность Ферми. Частота релаксации  $\gamma$  включает все механизмы рассеяния электронов. Отрицательные значения действительной части диэлектрической проницаемости  $\epsilon_1$  в ИК-области спектра является оптическим критерием металлического типа проводимости.

В видимой и ультрафиолетовой областях спектра основным является механизм квантового поглощения света с переходом электронов с занятого уровня на свободный, т.е. межзонное поглощение, дающее информацию об электронном энергетическом спектре. Вклад межзонного поглощения  $\epsilon_2^i(\omega)$  определяется выражением [10]

$$\epsilon_2^i(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{3m^2 \omega^2} \sum_{ij} \int \frac{2}{(2\pi)^3} [f(E_{ik}) - f(E_{jk})] \times \frac{|M_{ij}(\mathbf{k})|^2 dS}{|\nabla_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{ij}|}. \quad (1)$$

Здесь  $f(E_{ik})$ ,  $f(E_{jk})$  — функция распределения электронов,  $|M_{ij}(\mathbf{k})|$  — вероятность перехода,

$$\hbar \omega_{ij} = E_j(\mathbf{k}) - E_i(\mathbf{k}) \quad (2)$$

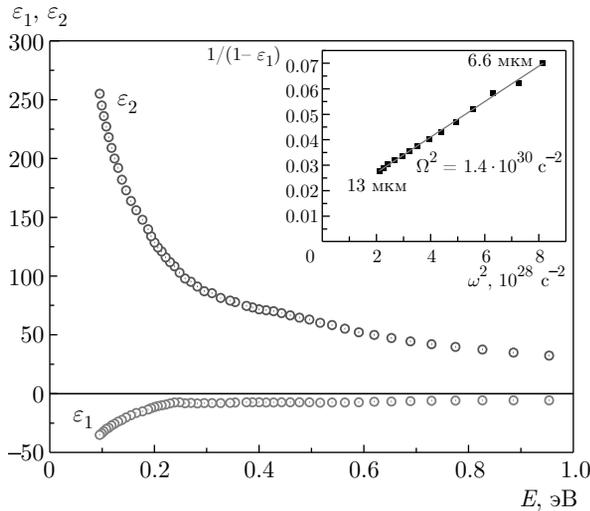
— разность энергий между свободной и занятой зонами,

$$\nabla_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{ij} = \nabla_{\mathbf{k}} [E_j(\mathbf{k}) - E_i(\mathbf{k})] \quad (3)$$

— градиент разности энергий. Комплексная диэлектрическая проницаемость представляет сумму вкладов от этих механизмов, которые могут сосуществовать в некоторой области энергий.

Дисперсия действительной  $\epsilon_1$  и мнимой  $\epsilon_2$  части диэлектрической проницаемости представлена на рис. 4. В ИК-области спектра наблюдается монотонное увеличение  $\epsilon_2$  и  $|\epsilon_1|$  с уменьшением энергии падающего света вплоть до границы исследованного интервала. Это указывает на металлический характер зависимости данных параметров. Однако абсолютные значения невелики, значительно ниже тех, которые характерны для хороших металлов, и указывает на то, что исследуемый сплав является плохим металлом.

Можно отметить резкое увеличение  $|\epsilon_1|$  при энергиях  $E < 0.25$  эВ. По-видимому, именно в этой области становится заметным вклад внутризонных переходов. Попытаемся оценить величину  $\Omega^2$  из анализа зависимости  $1/\epsilon_1 = f(\omega^2)$  в ИК-области спектра, которая в длинноволновой области



**Рис. 4.** (В цвете онлайн) Дисперсия действительной  $\epsilon_1$  и мнимой  $\epsilon_2$  частей диэлектрической проницаемости сплава  $\text{Mn}_{1.5}\text{Fe}_{1.5}\text{Al}$ . На вставке показана зависимость  $1/\epsilon_1 = f(\omega^2)$  в области 6.6–13 мкм

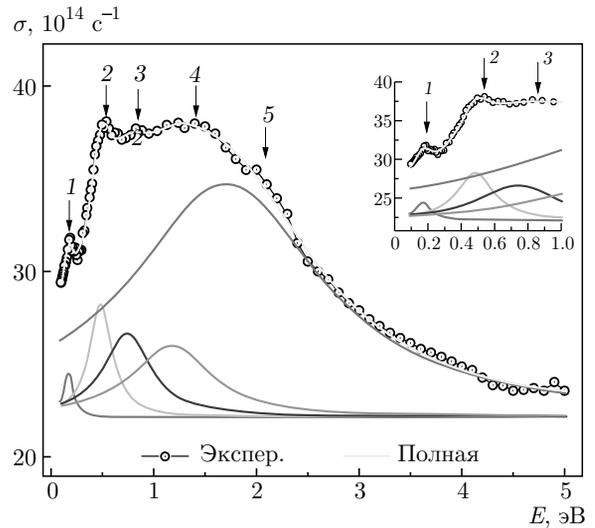
6.6–13 мкм (0.95–0.19 эВ) описывается прямой линией, см. вставку на рис. 4. Наклон прямой соответствует отношению  $1/\Omega^2$  и дает возможность оценить квадрат плазменной частоты электронов проводимости как  $\Omega^2 \sim 1.4 \cdot 10^{30} \text{ c}^{-2}$ .

Для кубических кристаллов квадрат плазменной частоты  $\Omega^2$  определяется скоростью электронов на поверхности Ферми, которая, в свою очередь, связана с плотностью состояний на уровне Ферми [10]:

$$\Omega^2 = \frac{e^2}{3\pi^2\hbar} \int v dS_F, N(E_F) = \frac{1}{4\pi^3\hbar} \int \frac{dS_F}{v_s}. \quad (4)$$

Здесь  $v$  — абсолютная величина зонной скорости электрона,  $v_s$  — по полосе  $s$  [10]. Согласно зонным расчетам, на уровне Ферми отмечена высокая плотность состояний, образованная  $d$ -состояниями атомов Mn и Fe (рис. 2). Поэтому естественно ожидать низкие значения квадрата плазменной частоты  $\Omega^2$  и связанной с ней эффективной концентрации свободных носителей  $N_{eff} = \Omega^2 m/4^2$  ( $e$ ,  $m$  — заряд и масса свободного электрона). Установлено, что  $N_{eff} \sim 4.4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ , и это значение на 1–2 порядка ниже значений, характерных для хороших металлов.

Основной особенностью спектра оптического поглощения сплава  $\text{Mn}_{1.5}\text{Fe}_{1.5}\text{Al}$  является отсутствие друдевского подъема на кривой  $\sigma(\omega)$ , вплоть до границы исследованного диапазона (рис. 5). Вместе с данными по диэлектрической проницаемости (рис. 4) мы можем рассматривать исследуемый сплав как плохой металл [10]. Спектр оптической



**Рис. 5.** (В цвете онлайн) Дисперсия оптической проводимости  $\sigma(\omega)$  сплава  $\text{Mn}_{1.5}\text{Fe}_{1.5}\text{Al}$ . На вставке дан крупный ИК-план. Цветные линии — это разложение кривой  $\sigma(\omega)$  на лоренцевы пики

проводимости представляет полосу поглощения, где можно выделить пики при энергиях 0.18, 0.54, 0.83, 1.4 эВ, «плечо» при 1.9–2.3 эВ. Затем интенсивность поглощения медленно уменьшается до уровня  $\sigma \sim 24 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$ . Поскольку кривая оптической проводимости имеет несколько пиков, выполним ее разложение на лоренцевские пики (цветные линии на рис. 5). Разложение показало, что зона поглощения может быть представлена суммой вкладов 5 осцилляторов.

Следует отметить отсутствие друдевского подъема на кривой  $\sigma(\omega)$ , что аномально для металлов и сплавов. Аномальное поведение  $\sigma(\omega)$  ранее было отмечено для некоторых сплавов Гейслера со структурой  $L2_1$ , например,  $\text{Fe}_2\text{VAl}$ ,  $\text{Mn}_{1.8}\text{Co}_{1.2}\text{Al}$ ,  $\text{Co}_2\text{MnAl}$ , и было связано с наличием энергетической щели в зонном спектре для одной или обеих спиновых подсистем [11–14]. Однако для сплава  $\text{Mn}_{1.5}\text{Fe}_{1.5}\text{Al}$  ситуация другая. Зонные расчеты, проведенные для структуры  $\beta$ -Mn, показали высокую плотность состояний как на уровне Ферми, так и в его окрестности (3–4 эВ) в обеих спиновых подсистемах.

Анализ особенностей межзонного поглощения проведем на основе вычисления зонного спектра и плотности состояний  $N(E)$  сплава  $\text{Mn}_{1.5}\text{Fe}_{1.5}\text{Al}$ , см. рис. 2. Дисперсия оптической проводимости  $\sigma(\omega)$  определяется реальной картиной электронного спектра материала, так что представляет интерес сравнить экспериментальную зависимость с теоретическими кривыми, полученными из  $E(k)$  в моде-

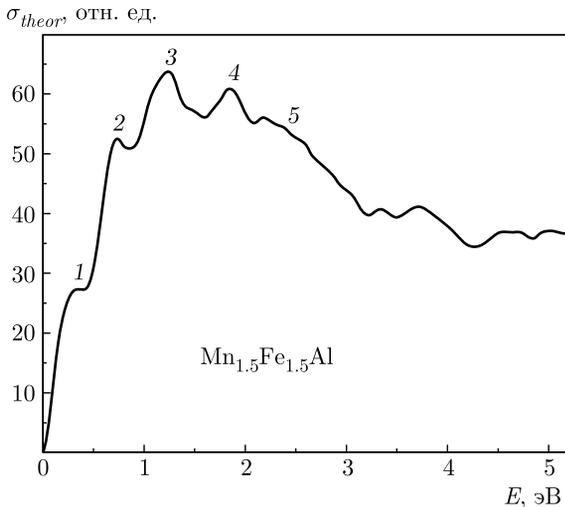


Рис. 6. Расчетный спектр межзонной оптической проводимости сплава  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$

ли прямых переходов. Расчетный спектр межзонной части оптической проводимости приведен на рис. 6.

В согласии с экспериментом, основные особенности спектра оптической проводимости ясно проявились в вычислениях, см. рис. 5 и 6. Следует отметить, что экспериментальная и теоретическая кривые слегка отличаются по ширине, энергетическому положению и интенсивности пиков поглощения в исследованной спектральной области. Согласно зонным расчетам, плотность состояний на уровне Ферми в обеих спиновых подсистемах довольно высокая, рис. 2. Расчетные кривые межзонной оптической проводимости  $\sigma(\omega)$  предсказывают наличие довольно высокого низкоэнергетического вклада. На основе расчетов и с учетом распределения парциальной плотности состояний можно заключить следующее. Переходы с участием  $3d$ -состояния Fe со спином вниз формируют пики 1, 2 и 3, см. рис. 5. При более высоких энергиях становится заметным вклад от переходов с участием  $3d$ -состояний Mn2, Mn1 и Fe в обеих спиновых подсистемах: пики 3, 4, «плечо» 5. Вклад от межзонных переходов с участием  $s$ - и  $p$ -состояний незначителен из-за малости их парциальных плотностей состояний.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведены расчеты электронной структуры и изучение оптических свойств сплава Гейслера  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ . Оптимизированная кристаллическая структура типа  $\beta$ -Mn представлена для  $Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$ . Для электронной структуры

$Mn_{1.5}Fe_{1.5}Al$  в структуре  $\beta$ -Mn мы получили металлический тип плотности состояний с более низкой плотностью для одной спиновой проекции, соответствующей ферромагнитному упорядочению магнитных моментов Mn. Установлено, что некоторые ионы Mn образуют антиферромагнитное упорядочение с другими магнитными моментами Mn и Fe подобно ранее изученному  $Mn_2FeAl$ . Анализ дисперсии диэлектрической проницаемости в ИК-области спектра указывает на низкие значения эффективной концентрации носителей заряда. Это позволяет охарактеризовать исследуемый сплав как плохой металл. Обнаружено anomalous поведение оптической проводимости сплава в ИК-области спектра, а именно, отсутствие друдевского вклада и высокий уровень межзонного поглощения. Спектр оптической проводимости имеет сложную частотную зависимость. Особенности на кривой сопоставлены с определенными межзонными переходами электронов. Полученная картина зонного спектра позволяет нам качественно объяснить особенности спектра оптического поглощения и дисперсию диэлектрической проницаемости.

**Благодарности.** Авторы благодарят В. Е. Шилова за помощь с обработкой плотностей состояний.

**Финансирование.** Представленное исследование выполнено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 19-52-45008 и ДНТ Нью Дели, Индия (проект INT/RUS/RFBR/379). Авторы подтверждают выполнение государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема «Электрон», № АААА-А18-118020190098-5) (расчет теоретической проводимости). М. Васундхара подтверждает поддержку, оказанную Департаментом K&IM of CSIR-Индийский институт Химических Технологий (ICT/Pubs./2021/065).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. T. Graf, S. S. P. Parkin, and C. Felser, IEEE Trans. Magn. **47**, 367 (2011).
2. В. В. Марченков, В. Ю. Ирхин, Ю. А. Первозчикова, П. Б. Терентьев, А. А. Семянникова, Е. Б. Марченкова, М. Эйстерер, ЖЭТФ **155**, 1083 (2019).
3. L. Wollmann, S. Chadov, J. Kübler, and C. Felser, Phys. Rev. B. **90**, 214420 (2014).

4. Z. J. Yang, Q. H. Gao, H. N. Xiong, J. X. Shao, X. W. Wang, and Z. J. Xu, *Sci. Rep.* **7**, 16522 (2017).
5. Shubhra Dash, A. V. Lukoyanov, Nancy et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **513**, 167205 (2020).
6. P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme et al., *J. Phys.: Condens. Matter.* **29**, 465901 (2017).
7. T. J. Prior, D. Nguyen-Manh, V. J. Couper, and P. D. Battle, *J. Phys.: Condens. Matter.* **16**, 2273 (2004).
8. I. Gavrikov, M. Seredina, M. Zheleznyy et al., *J. Magn. Magn. Mater.* **478**, 55 (2019).
9. A. Kokalj, *J. Mol. Graph. Model.* **17**, 176 (1999).
10. A. V. Sokolov, *Optical Properties of Metals*, Blackie and Son Limited, London and Glasgow (1965).
11. E. I. Shreder, A. D. Svyazhin, and A. A. Makhnev, *Opt. Spectr.* **119**, 969 (2015).
12. E. I. Shreder, A. A. Makhnev, A. V. Lukoyanov, and K. G. Suresh, *Phys. Met. Metallogr.* **118**, 965 (2017).
13. E. I. Shreder, A. A. Makhnev, A. V. Lukoyanov, and V. V. Marchenkov, *Phys. Met. Metallogr.* **119**, 1068 (2018).
14. E. I. Shreder, M. M. Kirillova, and V. P. Dyakina, *Phys. Met. Metallogr.* **81**, 406 (1996).

# ПОТЕНЦИАЛЬНОЕ ПРОТЕКАНИЕ СВЕРХТЕКУЧЕГО $^3\text{He}$ ЧЕРЕЗ НЕМАТИЧЕСКИЙ АЭРОГЕЛЬ СФЕРИЧЕСКОЙ ФОРМЫ

*Е. В. Суrowцев\**

*Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук  
119334, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 26 июня 2021 г.,  
после переработки 26 июня 2021 г.  
Принята к публикации 29 июня 2021 г.

Рассматривается потенциальное протекание сверхтекучего  $^3\text{He}$  через нематический аэрогель сферической формы. Особенностью рассматриваемой системы является то, что сверхтекучие фазы внутри и снаружи аэрогеля могут быть разными. В частности, в работе рассмотрены случаи, когда внутри аэрогеля реализуется полярная фаза сверхтекучего  $^3\text{He}$ , а снаружи аэрогеля существуют либо В-фаза, либо А-фаза сверхтекучего  $^3\text{He}$ . При условии, что параметр порядка системы является непрерывной функцией пространственной координаты без особых точек и линий на поверхности аэрогеля, а также при условии отсутствия джозефсоновских токов через поверхность аэрогеля получены граничные условия на фазу параметра порядка на поверхности аэрогеля, необходимые для гидродинамического описания течения. При помощи полученных граничных условий найден тензор присоединенной массы потенциального движения жидкости для рассматриваемых случаев. Проведено сравнение с имеющимися экспериментальными данными.

DOI: 10.31857/S0044451021100126

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Использование различных типов аэрогелей в экспериментах со сверхтекучим  $^3\text{He}$  позволило наблюдать сверхтекучие состояния, невозможные в чистом  $^3\text{He}$ . В последние годы наибольший интерес представляет изучение свойств сверхтекучего  $^3\text{He}$  в так называемом нематическом аэрогеле, который представляет собой набор сонаправленных нитей диаметром порядка 5–10 нм со средним расстоянием между нитями порядка 100 нм. Ввиду высокой пористости рассматриваемых структур сверхтекучесть  $^3\text{He}$ , заполняющего аэрогель, сохраняется. Однако из-за анизотропии рассеяния квазичастиц на примесных нитях, изменяется симметрия сверхтекучего состояния. В частности, при использовании нафена, особого типа нематического аэрогеля с высокой степенью анизотропии, в экспериментах по ядерному магнитному резонансу удалось наблюдать переход в полярную фазу сверхтекучего  $^3\text{He}$  [1, 2]. Переход в полярную фазу удалось также обнаружить в

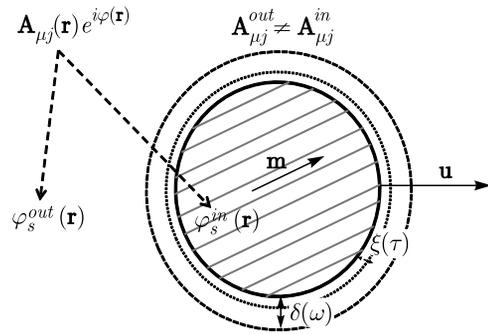
недавних экспериментах с колеблющейся в  $^3\text{He}$  проволочкой, к которой был прикреплен нематический аэрогель [3]. При рассматриваемом фазовом переходе наблюдалось возникновение дополнительной моды колебаний системы, а также изменение температурной зависимости основной моды (механической) в области существования полярной фазы. Дополнительная мода колебаний связана, по всей видимости, со совместным колебанием нитей аэрогеля и нормальной компоненты сверхтекучего  $^3\text{He}$  относительно сверхтекучей части жидкости. Данные колебания аналогичны второму звуку в сверхтекучей системе с той лишь разницей, что в данном случае возвращающая сила в основном связана с упругостью аэрогеля, а не с градиентом температуры. Из экспериментальных данных по температурной зависимости частот двух колебательных мод следует их сильная связь в области температур вблизи перехода в полярную фазу. Однако в дальнейшем мы не будем рассматривать взаимодействие двух мод колебаний, а сконцентрируемся лишь на изучении влияния потенциального течения сверхтекучей жидкости вокруг аэрогеля на частоту механических колебаний системы.

В простейшей модели одномерного незатухающего осциллятора с заданной жесткостью квадрат

\* E-mail: e.v.surovtsev@gmail.com

частоты колебаний обратно пропорционален полной массе системы:  $\omega_0^2 \sim 1/M_0$ . В нашем случае полная масса складывается из массы проволоочки, массы аэрогеля и массы жидкости, которая движется вместе с аэрогелем и проволоочкой. Массу жидкости, которая увлекается при колебаниях, можно условно разделить на две части: первая часть связана с потенциальным (безвихревым) потоком сверхтекучей и нормальной компоненты жидкости, а вторая возникает из-за вязкости нормальной компоненты жидкости [4]. Первый вклад в массу движущейся жидкости можно оценить как  $\rho a^3$ , где  $\rho$  — плотность жидкости,  $a$  — характерный размер аэрогеля, а второй вклад оценивается соответственно как  $\sim \rho_n \delta S$ , где  $\rho_n$  — характерное значение плотности нормальной компоненты  $^3\text{He}$ ,  $S$  — площадь поверхности аэрогеля,  $\delta \sim \sqrt{\eta/(\omega \rho_n)}$  — зависящая от частоты колебаний вязкая глубина проникновения,  $\eta$  — вязкость  $^3\text{He}$ ,  $\omega$  — частота колебаний. Далее мы будем предполагать, что колебания происходят с достаточно большой частотой, чтобы можно было считать характерные размеры аэрогеля,  $a$ , много большими вязкой глубины проникновения  $\delta(\omega)$ , т. е.  $\delta \ll a$ . Данное условие позволяет пренебречь вкладом в массу движущейся жидкости, связанным с ее вязкостью. Поэтому именно вклад от потенциального движения мы в дальнейшем будем называть присоединенной массой, и он вычисляется в рамках данной работы.

Задача о вычислении присоединенной массы, возникающей при движении образцов аэрогеля в сверхтекучей жидкости, была впервые рассмотрена в работах [5, 6]. В статье Габаи и др. [5] решалась задача для скалярного параметра порядка (сверхтекучий  $^4\text{He}$ ). Авторы заметили, что при условии непрерывности фазы параметра порядка на границе аэрогеля задача о протекании сверхтекучей жидкости решается аналогично поиску напряженности электрического поля вокруг диэлектрического тела [7]. Другой подход, который использовался для описания частоты колебаний аэрогеля в сверхтекучем  $^3\text{He}$  при сверхнизких температурах, был предложен в работе Брусарди и др. [6]. Основная разница между двумя подходами при описании протекания сверхтекучей жидкости сквозь аэрогель заключается в граничных условиях, которые накладываются на фазовую часть параметра порядка на границе аэрогеля, при том что условие сохранения нормальной компоненты плотности массового тока в обоих случаях выполняется. В статье [6] функция фазы параметра порядка имеет разрыв на поверхности аэрогеля. Таким образом, неявно предполагается,



**Рис. 1.** Геометрия задачи: нематический аэрогель сферической формы с внутренней осью анизотропии, направленной вдоль вектора  $\mathbf{m}$ , движется со скоростью  $\mathbf{u}(t)$  в сверхтекучем  $^3\text{He}$ . Форма параметра порядка внутри и снаружи аэрогеля различается. Изменение формы параметра порядка происходит на длине когерентности сверхтекучего  $^3\text{He}$  —  $\xi(\tau)$  вблизи поверхности аэрогеля. При потенциальном течении сверхтекучий ток внутри и снаружи аэрогеля определяется функцией  $\varphi_s(\mathbf{r})$ . Для решения задачи необходимо установить граничное условие на функцию  $\varphi_s(\mathbf{r})$  на поверхности аэрогеля.  $\delta(\omega)$  — глубина вязкого проникновения, которая определяет область, где происходит вязкое течение нормальной компоненты жидкости. Предполагаются следующие соотношения между параметрами задачи:  $\xi(\tau) \ll \delta(\omega) \ll a$

ется, что на границе аэрогеля существует система вихрей, обеспечивающая сброс фазы на границе.

В настоящей работе рассмотрена простая модель протекания сверхтекучего  $^3\text{He}$  через нематический аэрогель, основанная на предположении, что параметр порядка системы является непрерывной функцией пространственной координаты (рис. 1). В отличие от подхода Габаи и др. [5] сверхтекучие состояния снаружи и внутри аэрогеля могут быть разными, поэтому определение функции фазы параметра порядка требует уточнения. Снаружи аэрогеля в зависимости от температуры и давления могут реализовываться объемные либо А-фаза, либо В-фаза сверхтекучего  $^3\text{He}$ . В то же время мы будем считать, что внутри аэрогеля реализуется только полярная фаза, орбитальная часть параметра порядка которой фиксируется осью анизотропии аэрогеля. На границе аэрогеля в слое толщиной порядка температурной длины когерентности сверхтекучего  $^3\text{He}$  ( $\xi(\tau)$ ) амплитуды параметров порядка наружного сверхтекучего состояния и внутреннего состояния подавляются, что обеспечивает пространственное согласование между ними. В работе качественно исследовано влияние подавления параметра порядка на границе аэрогеля на возникающие эффективные граничные условия на фазу параметра порядка

на поверхности аэрогеля в предположении, что длина когерентности гораздо меньше размеров аэрогеля. Другими словами, граничные условия получены с точностью до  $\xi(\tau)/a$ .

Данная статья организована следующим образом: в первой части статьи из уравнений Гинзбурга–Ландау получено уравнение, определяющее сверхтекучий поток массы, а также выписаны решения уравнения для случая трех рассматриваемых в работе сверхтекучих состояний. После этого получено граничное условие для функции фазы параметра порядка на поверхности аэрогеля. При помощи полученного граничного условия найден тензор присоединенной массы для двух возможных наружных сверхтекучих состояний. Наконец, в последней части статьи проводится сравнение влияния присоединенной массы на частоту собственных колебаний системы с имеющимися экспериментальными данными.

## 2. УРАВНЕНИЕ СВЕРХТЕКУЧЕГО ПОТОКА

Уравнение, описывающее сверхтекучий поток проще всего получить из уравнений Гинзбурга–Ландау для сверхтекучего  $^3\text{He}$ . В сверхтекучем  $^3\text{He}$  реализуется триплетное спаривание с равным единице орбитальным моментом. Как следствие, параметром порядка системы является комплексная матрица  $3 \times 3$  —  $A_{\mu j}$ , где греческие буквы в индексах соответствуют орбитальной части параметра порядка, а латинские соответственно его спиновой части. Уравнения Гинзбурга–Ландау для сверхтекучего  $^3\text{He}$  имеют стандартный вид:

$$\frac{\partial \delta F^{(2)}}{\partial A_{\mu j}^*} + \frac{\partial \delta F^{(4)}}{\partial A_{\mu j}^*} - (K_1 \nabla_p \nabla_p A_{\mu j} + (K_2 + K_3) \nabla_j \nabla_p A_{\mu p}) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \delta F^{(2)}}{\partial A_{\mu j}} + \frac{\partial \delta F^{(4)}}{\partial A_{\mu j}} - (K_1 \nabla_p \nabla_p A_{\mu j}^* + (K_2 + K_3) \nabla_j \nabla_p A_{\mu p}^*) = 0, \quad (2)$$

где  $F^{(2)}$ ,  $F^{(4)}$  — члены соответственно второго и четвертого порядков, а  $K_i$  — феноменологические константы, возникающие в функционале Гинзбурга–Ландау перед градиентными членами. Комбинируя выписанные уравнения, легко можно получить следующее равенство:

$$(K_1 A_{\mu j}^* \nabla_p \nabla_p A_{\mu j} + (K_2 + K_3) A_{\mu j}^* \nabla_j \nabla_p A_{\mu p}) - \text{c.c.} = 0. \quad (3)$$

Заметим, что уравнение (3) можно переписать в другом виде:

$$\nabla_i (j_s)_i = 0, \quad (4)$$

где мы ввели  $\mathbf{j}_s$  — плотность сверхтекучего потока массы, которая дается известным выражением [8]

$$(j_s)_i \sim -i [(K_1 A_{\mu j}^* \nabla_i A_{\mu j} + K_2 A_{\mu j}^* \nabla_j A_{\mu i} + K_3 A_{\mu i}^* \nabla_j A_{\mu j}) - \text{c.c.}]. \quad (5)$$

Полученное уравнение можно трактовать как условие несжимаемости сверхтекучей компоненты в рассматриваемом пределе.

При помощи определения (5) можно легко записать выражения, определяющие сверхтекучие массовые токи в различных сверхтекучих состояниях. Параметр порядка полярной фазы (состояния) можно записать в следующем виде:

$$A_{\mu j} = \Delta_P \cdot e^{i\varphi} d_\mu m_j,$$

где  $\Delta_P$  — амплитуда параметра порядка,  $d_\mu$ ,  $m_j$  — действительные единичные векторы соответственно в спиновом и орбитальном пространствах,  $\varphi$  — фаза параметра порядка. Орбитальный вектор  $\mathbf{m}$  направлен вдоль оси анизотропии аэрогеля (двукратное вырождение по направлению связано с тем, что аэрогель нематический). Из определения (5) получим выражение для плотности сверхтекучего массового потока в полярной фазе:

$$(j_s^P)_i = \rho_{ij}^P \frac{\hbar}{2m_{\text{He}^3}} \nabla_j \varphi, \quad (6)$$

где тензор сверхтекучей плотности полярной фазы определяется выражением

$$\rho_{ij}^P = (\rho_{\parallel}^P - \rho_{\perp}^P) m_i m_j + \rho_{\perp}^P \delta_{ij}, \quad (7)$$

здесь  $\rho_{\parallel}$  — сверхтекучая плотность в направлении, параллельном оси анизотропии аэрогеля. Следует отметить, что в так называемом пределе слабой связи, который хорошо описывает термодинамические свойства системы при нулевом давлении, справедливо следующее соотношение:  $K_1 = K_2 = K_3$ . Соответственно в данном пределе существует следующая связь между главными значениями тензора сверхтекучей плотности полярной фазы:

$$\rho_{\parallel}^P = 3\rho_{\perp}^P = 3\rho_s^P.$$

В дальнейшем мы будем использовать данный предел и для других сверхтекучих состояний, чтобы

упростить вычисления. Также, мы будем использовать соотношение

$$\frac{\hbar}{2m_{3\text{He}}} = 1,$$

при котором сверхтекучая скорость будет выражаться через градиент фазы параметра порядка  $(v_s)_i = \nabla_i \varphi$ . В случае полярной фазы с не зависящим от координат орбитальным вектором  $\mathbf{m}$  уравнение, определяющее сверхтекучий поток (4), сводится к

$$(\rho_s^P)_{ij} \nabla_i \nabla_j \varphi = 0. \quad (8)$$

Даже более простое выражение для сверхтекучего тока может быть записано для случая В-фазы, параметр порядка которой равен

$$A_{\mu j} = \Delta_B \cdot e^{i\varphi} R_{\mu j},$$

где  $R_{\mu j}$  — произвольная ортогональная матрица. Тогда выражение для тока будет просто  $\rho_s^B \nabla_i \varphi$ , где  $\rho_s^B$  — сверхтекучая плотность В-фазы. Рассмотренные два случая достаточно просты в силу того, что сверхтекучий поток массы определяется в них только градиентом фазы параметра порядка.

Более интересное выражение для сверхтекучего тока получается для случая А-фазы, которое в пределе слабой связи имеет следующий вид [8]:

$$(j_s^A)_i = \rho_s^A (2\delta_{ij} - l_i l_j) (v_s^A)_j - \rho_s^A \left( \frac{1}{2} \delta_{ij} - l_i l_j \right) e_{jkt} \nabla_k l_t. \quad (9)$$

Последний член в выражении (9) показывает, что даже в отсутствие градиента фазы параметра порядка сверхтекучий ток может существовать в некоторых неоднородных текстурах вектора  $\mathbf{l}$ . Однако в дальнейшем мы будем рассматривать только такие текстуры, в которых  $e_{ijk} \nabla_j l_k = 0$ , т. е. сверхтекучий поток будет чисто потенциальным.

В качестве примера сверхтекучего тока через границу раздела двух сверхтекучих состояний рассмотрим ток через границу между полярной и В-фазами. В рассматриваемой области пространства параметр порядка можно искать в виде суперпозиции двух решений однородных уравнений Гинзбурга – Ландау:

$$A_{\mu j} = \left[ e^{i\varphi^P} \Delta_P d_\mu m_j + e^{i\varphi^B} \Delta_B R_{\mu j} \right], \quad (10)$$

где все параметры за исключением параметров из спинового подпространства являются функциями

пространственной координаты. Спиновая степень свободы никак не связана с границей раздела двух состояний, если только не рассматривать слабое спин-орбитальное взаимодействие. Форма параметра порядка в приграничной области может быть более сложной, однако для качественного описания данный анзац кажется вполне удовлетворительным. Заданная выше форма параметра порядка приводит к следующему выражению для сверхтекучего потока массы:

$$(j_s)_i \sim 5\Delta_B^2 \nabla_i \varphi^B + \Delta_P^2 (\delta_{ij} + 2m_i m_j) \nabla_j \varphi^P + \Delta_B \Delta_P (\nabla_j \varphi^B + \nabla_j \varphi^P) (\delta_{ij} R_{\mu k} d_\mu m_k + R_{\mu j} d_\mu m_i + R_{\mu i} d_\mu m_j) \cos(\varphi^B - \varphi^P) + (\Delta_P \nabla_j \Delta_B - \Delta_B \nabla_j \Delta_P) (\delta_{ij} R_{\mu k} d_\mu m_k + R_{\mu j} d_\mu m_i + R_{\mu i} d_\mu m_j) \sin(\varphi^B - \varphi^P) + \Delta_B \Delta_P \{ (\nabla_i R_{\mu j}) d_\mu m_j + (\nabla_j R_{\mu j}) d_\mu m_i + (\nabla_j R_{\mu i}) d_\mu m_j - R_{\mu j} d_\mu \nabla_i m_j - R_{\mu j} d_\mu \nabla_j m_i - R_{\mu i} d_\mu \nabla_j m_j \} \sin(\varphi^B - \varphi^P). \quad (11)$$

Первые два члена определяют сверхтекучий ток в пределах соответственно В-фазы и полярной фазы, а последние два, пропорциональные  $\sin(\varphi^B - \varphi^P)$ , соответствуют джозефсоновским токам через границу раздела состояний. Наконец, член, пропорциональный  $\cos(\varphi^B - \varphi^P)$ , также возникает благодаря интерференции двух состояний. Таким образом, из вида выражения для сверхтекучего тока следуют условия отсутствия тока через границу:  $\varphi^B = \varphi^P = \text{const}$  или  $\varphi^B = \varphi^P + \pi = \text{const}$ . Глобальный минимум соответствуют одному из условий и может быть найден при решении уравнений Гинзбурга – Ландау в приграничной области.

Можно рассмотреть два существенно различающихся случая сверхтекучего протекания через границу аэрогеля. Первый случай соответствует отсутствию джозефсоновских токов через границу, т. е.  $\varphi^B - \varphi^P = \pi n$ ,  $n \in Z$  и, как следствие,  $\nabla_i \varphi^B = \nabla_i \varphi^P$ . Таким образом, в этом случае сверхтекучий ток определяется выражением

$$(j_s)_i \sim [5\Delta_B^2 \delta_{ij} + \Delta_P^2 (\delta_{ij} + 2m_i m_j)] \nabla_j \varphi \pm 2\Delta_B \Delta_P (\delta_{ij} R_{\mu k} d_\mu m_k + R_{\mu j} d_\mu m_i + R_{\mu i} d_\mu m_j) \nabla_j \varphi. \quad (12)$$

При помощи написанного выражения, а также из условия постоянства нормальной к границе компоненты сверхтекучего тока, можно приближенно вычислить дополнительную разницу фаз между состояниями, набегающую на границе раздела из-за изме-

нения амплитуд параметра порядка (поверхностными токами в этом случае необходимо пренебречь).

Рассмотрим теперь кратко случай протекания через границу джозефсоновских токов. В присутствии сверхтекучих токов в объеме вокруг образца аэрогеля изменение фазы происходит на масштабах порядка размера аэрогеля, в то время как амплитуда параметра порядка существенно меняется на длине когерентности на границе раздела двух состояний. Таким образом, в случае ненулевой разницы фаз двух состояний порядка  $\pi/2$  джозефсоновские токи могут давать главный вклад в ток через границу. Качественно, джозефсоновский сверхтекучий ток через границу можно аппроксимировать с помощью обычного выражения:

$$(j_s)_i \sim \frac{\Delta_B^0 \Delta_P^0}{\lambda} \sin(\varphi^B - \varphi^P) n_i, \quad (13)$$

где  $n_i$  — нормаль к поверхности аэрогеля, а  $\lambda$  имеет размерность длины и  $\lambda \sim \xi(\tau)$ . Следует отметить, что написанное выражение может описывать как токи, которые возбуждаются движением аэрогеля (нестационарный эффект), так и токи, которые могут возникнуть из-за постоянной разности фаз в покоящемся состоянии аэрогеля (стационарный эффект). Однако в последнем случае из-за того, что на противоположных концах аэрогеля направление тока меняется (разность фаз постоянна), происходит нескомпенсированное втекание или вытекание сверхтекучей жидкости в (из) аэрогель, что приведет к разнице давлений и возбуждению собственных колебаний аэрогеля с изменением его объема. При этом из-за сильной вязкости нормальной компоненты такие колебания будут сопровождаться затуханием, что в итоге приведет к их полному затуханию и выравниванию фаз сверхтекучих состояний внутри и снаружи аэрогеля. Условие возможности пренебрежения нестационарными джозефсоновскими токами требует отдельного рассмотрения.

В двухжидкостной гидродинамике плотность полного массового тока определяется выражением

$$j_i = (\rho_n)_{ij} (v_n)_j + (\rho_s)_{ij} (v_s)_j,$$

где  $\mathbf{v}_n$  — скорость нормальной компоненты жидкости,

$$(\rho_n)_{ij} + (\rho_s)_{ij} = \rho \delta_{ij},$$

$\rho$  — полная плотность <sup>3</sup>He и  $(v_s)_i$  — сверхтекучая скорость, введенные ранее. В результате, если возможны два типа движения, то сверхтекучий ток в этом случае должен быть переопределен следующим образом:

$$(j_s)_i = \rho_{ij}^s [(v_s)_j - (v_n)_j].$$

В новых обозначениях уравнение сохранения массы имеет вид

$$\partial_t \rho + \nabla_i (\rho (v_n)_i + (j_s)_i) = 0. \quad (14)$$

В пределе несжимаемой жидкости  $\rho = \text{const}$  из него следует, что

$$\nabla_i (v_n)_i = 0. \quad (15)$$

Существуют два характерных масштаба, определяющих изменения нормальной компоненты скорости  $\mathbf{v}_n$ . На больших расстояниях от поверхности тела  $r \gg \delta$  и при достаточно малых амплитудах движения  $\text{rot } \mathbf{v}_n \approx 0$ , поэтому решение для нормальной скорости можно искать в форме потенциального потока:  $(v_n)_i = \nabla_i \varphi_n$  [4]. В области вблизи поверхности аэрогеля  $r \sim \delta$  необходимо учитывать вязкость нормальной компоненты <sup>3</sup>He. В то же время заметим, что ввиду  $\delta \gg \xi(\tau)$  зависимость тензора сверхтекучей плотности от координаты может быть связана исключительно с текстурой параметра порядка, характерный масштаб изменения которой определяется размерами аэрогеля  $a \gg \delta$ . Исходя из этого, можно считать что  $(\rho^s)_{ij} \approx \text{const}$  и уравнение сверхтекучего потока в этой области сводится к

$$\begin{aligned} \nabla_i ((\rho^s)_{ij} [(v_s)_j - (v_n)_j]) &\approx \nabla_i (\rho^s)_{ij} (v_s)_j - \\ (\rho^s)_{ij} \nabla_i (v_n)_i &= \nabla_i (\rho^s)_{ij} (v_s)_j = 0. \end{aligned}$$

Таким образом, в рассматриваемой области уравнение сверхтекучего потока можно решать независимо по отношению к нормальной компоненте жидкости.

### 2.1. В-фаза

Для случая В-фазы уравнения потоков принимают простейший вид — такой же, как и для случая идеальной жидкости:

$$\begin{aligned} \Delta \varphi_s &= 0, \\ \Delta \varphi_n &= 0, \quad r \gg \delta. \end{aligned} \quad (16)$$

Другими словами, можно рассматривать две независимые идеальные жидкости с различными плотностями  $\rho_n$  и  $\rho_s$ . Поскольку в рассматриваемой геометрии В-фаза находится снаружи аэрогеля, необходимо искать решение с убывающей на бесконечности фазой:

$$\varphi_{s,n}(\mathbf{r}) = \frac{(\mathbf{A}_{s,n})_i r_i}{r^3}, \quad (17)$$

где  $\mathbf{A}_{s,n}$  — постоянные векторы [4]. Написанное выражение является асимптотикой решения на больших расстояниях и определяет самую медленную

возможную убывающую зависимость  $\varphi$  от расстояния  $\mathbf{r}$  для случая несжимаемой жидкости. Для сферического тела выписанное решение можно использовать вплоть до поверхности тела. В общем случае постоянные векторы  $\mathbf{A}_{s,n}$  находятся из граничных условий на поверхности тела и зависят от его формы. Из выражений для фазы легко получить убывающие на бесконечности зависимости двух скоростей в виде

$$(v_{s,n}^B)_i = \frac{(A_{s,n})_i}{r^3} - \frac{3r_i((A_{s,n})_j r_j)}{r^5}. \quad (18)$$

Для сверхтекучего типа движения найденное решение справедливо для расстояний от поверхности порядка  $r \gg \xi(\tau)$ , где можно считать  $\rho_s$  постоянной. Для нормальной скорости ситуация немного сложнее, и вблизи поверхности  $\mathbf{r}$  необходимо решать уравнение Стокса с эффективной плотностью  $\rho_n$ .

### 2.2. А-фаза

Как пример того, что задача может быть решена для случая А-фазы, рассмотрим сферическое тело, которое движется в сверхтекучем  $^3\text{He}$ . Предположим, что в системе реализуется текстура с вектором  $l$ , перпендикулярным поверхности шара, т. е. так называемая текстура типа «ежа»:  $l_i(\mathbf{r}) = n_i = r_i/r$ . Очевидно, что для такой текстуры не возникает сверхтекучих токов, связанных с пространственным изменением направления вектора  $l$ . Таким образом, выражение для сверхтекучего тока в этом случае будет следующим:

$$(j_s^A)_i = \rho_s^A (2\delta_{ij} - n_i n_j) \nabla_j \varphi, \quad r \gg \delta, \quad (19)$$

где  $\varphi = \varphi_s - \varphi_n$ . После подстановки данного выражения в уравнение сверхтекучего потока получим следующее:

$$\Delta\varphi - \frac{n_j \nabla_j \varphi}{r} - \frac{1}{2} n_i n_j \nabla_i \nabla_j \varphi = 0. \quad (20)$$

Будем искать убывающее на бесконечности решение в виде

$$\varphi = \frac{A_i r_i}{r^\gamma}, \quad \gamma \geq 3, \quad (21)$$

которое приводит к уравнению для  $\gamma$ :

$$(\gamma^2 - 3\gamma - 2) \frac{A_i r_i}{r^{\gamma+2}} = 0.$$

Поскольку по предположению  $A_i$  — это постоянный вектор, то подходящее решение уравнения для  $\gamma$  будет

$$\gamma = \frac{3}{2} + \frac{\sqrt{17}}{2} \approx 3.56.$$

Решение для «нормальной» части фазы находится аналогично случаю В-фазы:

$$\varphi_n = \frac{(A_n)_i r_i}{r^3}.$$

Поэтому для «сверхтекучей» части фазы получается выражение

$$\varphi_s^A = \frac{A_i r_i}{r^\gamma} - \frac{(A_n)_i r_i}{r^3}. \quad (22)$$

### 2.3. Полярная фаза

В пределе слабой связи уравнение сверхтекучего потока для полярной фазы запишется в виде

$$\rho_s^P (\delta_{ij} + 2m_i m_j) \nabla_i [\nabla_j \varphi_s^P - (v_n^P)_j] = 0. \quad (23)$$

Поскольку по предположению вязкая глубина проникновения  $\delta$  много больше среднего расстояния между нитями, образующими нематический аэрогель, скорость нормальной компоненты  $\mathbf{v}_n$  внутри аэрогеля должна совпадать со скоростью движения аэрогеля  $\mathbf{u}$ . Для рассматриваемой геометрии задачи необходимо искать решение для  $\varphi_s$  которое не расходитсся при  $r = 0$ . Исходя из этого, мы будем искать решение в виде

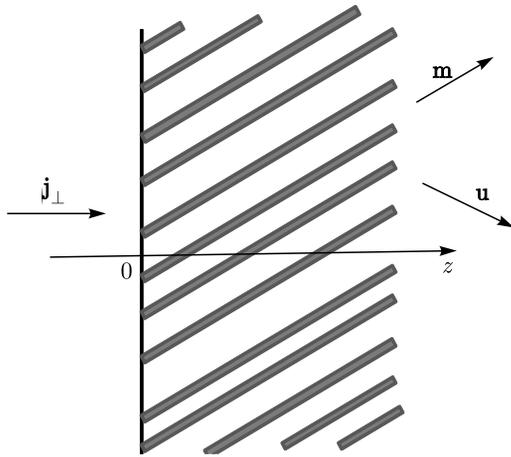
$$\varphi_s = (r_i (v_s^{in})_i) + b \left( \delta_{ij} - \frac{5}{3} m_i m_j \right) r_i r_j, \quad (24)$$

с неизвестной константой  $b$  и постоянной скоростью  $\mathbf{v}_s^{in}$ . Для несжимаемой жидкости второй член в выражении можно опустить, так как он приводит к конечному значению потока через любую замкнутую поверхность, который не может быть скомпенсирован противотоком нормальной компоненты ввиду ее жесткой связи с нитями аэрогеля. В таком приближении сверхтекучая скорость внутри аэрогеля будет постоянной величиной:

$$(v_s^P)_i = (v_s^{in})_i. \quad (25)$$

### 3. ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

При выводе граничных условий мы будем рассматривать предел, в котором можно пренебречь джозефсоновскими токами через границу аэрогеля. Как следствие, в задаче остается лишь одна фазовая переменная как функция от пространственной координаты. В дальнейшем мы будем предполагать, что кинетическая энергия сверхтекучего движения много меньше энергии конденсации, и поэтому задача может быть решена последовательно в два этапа.



**Рис. 2.** В пределе  $a \gg \xi(\tau)$  можно рассматривать одномерную задачу о протекании сверхтекучего тока через границу раздела двух сверхтекучих состояний. Плотность тока в направлении, перпендикулярном границе аэрогеля, считается постоянной

На первом шаге можно найти изменение параметра порядка на границе аэрогеля, считая, что ток через границу отсутствует. Затем найденное решение для амплитуд параметра порядка можно подставить в уравнение сверхтекучего потока. В пределе  $a \gg \xi(\tau)$  можно ограничиться рассмотрением одномерной задачи, в которой уравнение потока может быть проинтегрировано, откуда можно найти изменение фазы на границе аэрогеля.

Мы начнем с рассмотрения простого случая аэрогеля сферической формы, который движется сквозь сверхтекучий <sup>3</sup>He с постоянной скоростью  $\mathbf{u}$  (рис. 2). Для начала предположим, что снаружи аэрогеля ( $z < 0$ ) находится В-фаза. Как было показано ранее, в области координат, удовлетворяющих условиям  $(r - R) = z < 0$  и  $(r - R) \gg \xi(\tau)$ , фаза имеет вид  $\mathbf{A}\mathbf{r}/r^3$ . Для достаточно малых расстояний  $R \gg |r - R| \gg \xi(\tau)$  мы можем разложить данную функцию до членов, линейных по  $z$ :

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{A} \cdot \mathbf{R}}{R^3} + 2 \frac{\mathbf{A} \cdot \mathbf{n}}{R^3} z, \quad z < 0, \quad (26)$$

здесь  $\mathbf{n}$  — это внутренняя нормаль к поверхности. Аналогично для области  $z > 0$  можно записать

$$\varphi(\mathbf{r}) = \mathbf{v}_s^{in} \cdot \mathbf{R} + \mathbf{v}_s^{in} \cdot \mathbf{n} z, \quad z > 0. \quad (27)$$

Такая же форма решения может быть получена после интегрирования уравнения потока в предположении постоянства тока через границу аэрогеля

$$(\mathbf{j}_s \cdot \mathbf{n}) = \text{const} = \rho_s^B [(\mathbf{v}_s^B - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n}]:$$

$$(j_s)_i n_i \sim [5\Delta_B^2 + \Delta_P^2(1+2(m_i n_i)^2)](\partial_z \varphi - u_z) \pm 2\Delta_B \Delta_P (R_{\mu k} d_\mu m_k + 2R_{\mu j} d_\mu m_i n_j)(\partial_z \varphi - u_z) = (\rho_s)_{zz}(\partial_z \varphi - u_z). \quad (28)$$

Пусть

$$\varphi(z) = [\mathbf{v}_s^B \cdot \mathbf{n}]z + \chi(z),$$

тогда для  $\chi(z)$  имеем

$$\chi(z) = (\mathbf{v}_s^B - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} \int_{-\infty}^z \frac{(\rho_s)_{zz}(z') - \rho_s^B}{(\rho_s)_{zz}(z')} dz'. \quad (29)$$

Асимптотика выражения для  $\chi(z)$  при  $z \gg \xi(\tau)$  имеет вид

$$\chi(z) = \alpha + [(\mathbf{v}_s^B - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n}] \frac{\rho_s^B - (\rho_s^P)_{zz}}{(\rho_s^P)_{zz}} z, \quad (30)$$

где  $\alpha$  определяется выражением

$$\alpha = [(\mathbf{v}_s^B - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n}] \left( \int_{-\infty}^0 \frac{\rho_{zz}(z') - \rho_s^B}{\rho_{zz}(z')} dz' + \int_0^{+\infty} \frac{\rho_{zz}(z') - \rho_s^P}{\rho_{zz}(z')} dz' \right). \quad (31)$$

Сравнивая полученный результат с разложениями (26), (27), мы приходим к граничному условию вида

$$\frac{\mathbf{A} \cdot \mathbf{R}}{R^3} - \mathbf{v}_s^{in} \cdot \mathbf{R} = \alpha. \quad (32)$$

Поскольку по предположению  $\rho_{zz}(z)$  не имеет особых точек на поверхности аэрогеля, можно оценить  $\alpha$  как  $[(\mathbf{v}_s^B - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n}]\xi(\tau)$ . Таким образом, если изменение фазы на размере аэрогеля много больше изменения фазы на границе, то в нулевом приближении по  $\xi(\tau)/R \ll 1$  граничное условие упрощаются до

$$\frac{\mathbf{A} \cdot \mathbf{R}}{R^3} = \mathbf{v}_s^{in} \cdot \mathbf{R}, \quad (33)$$

и в таком виде будет использоваться в дальнейшем. Очевидно, что с заданной точностью написанное условие будет справедливо для тела любой формы, если  $\xi(\tau) \ll a$ , где  $a$  — характерный радиус кривизны поверхности тела:

$$\varphi_s^P = \varphi_s^B, \quad r \in S. \quad (34)$$

Более того, если сверхтекучий ток является чисто потенциальным (т.е. на поверхности отсутствуют токи, связанные с текстурой параметра порядка),

то в рассмотренном доказательстве снаружи и внутри аэрогеля можно использовать параметр порядка произвольной формы и результат при этом не изменится:

$$\varphi_s^{in} = \varphi_s^{out}, \quad r \in S. \quad (35)$$

Именно данное граничное условие использовалось в работе Габая и др. [5] для случая скалярного параметра порядка [5].

Запишем теперь граничное условие для скорости нормального движения:

$$\mathbf{v}_n \cdot \mathbf{n} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, \quad r \in S. \quad (36)$$

Данное условие отражает тот факт, что через границу аэрогеля не течет тепловой поток. Поскольку скорость движения аэрогеля  $\mathbf{u}$  является постоянным вектором, а внутри аэрогеля по предположению  $\mathbf{v}_n = \mathbf{u}$ , в отсутствие проскальзывания нормальной компоненты жидкости из условия (36) следует, что  $\mathbf{v}_n = \mathbf{u}$  на всей границе аэрогеля. Таким образом, полный набор граничных условий, которые используются далее, выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \varphi_s^{in} &= \varphi_s^{out}, \quad r \in S, \\ \mathbf{v}_n &= \mathbf{u}, \quad r \in S, \end{aligned} \quad (37)$$

$$\mathbf{j}^{in} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{j}^{out} \cdot \mathbf{n}, \quad r \in S. \quad (38)$$

#### 4. ДВИЖЕНИЕ АЭРОГЕЛЯ В В-ФАЗЕ

Как и ранее, мы начнем решение задачи со случая, когда снаружи аэрогеля находится В-фаза. Условие сохранения тока через поверхность (37) можно переписать, используя выражение для тензора сверхтекучей плотности полярной фазы (7), решения для сверхтекучих скоростей внутри и снаружи аэрогеля (18), (25), а также тот факт, что на границе аэрогеля  $\mathbf{v}_n = \mathbf{u}$ :

$$\begin{aligned} \rho_s^P (\delta_{ij} + 2m_i m_j) [(v_s^{in})_j - u_j] n_i &= \\ = \rho_s^B \left( \frac{(A_s)_i}{R^3} - \frac{3n_i ((A_s)_j n_j)}{R^3} - u_i \right) n_i. \end{aligned} \quad (39)$$

Из непрерывности на границе аэрогеля функции фазы следует, что  $(A_s)_i = (v_s^{in})_i R^3$ , после чего получим выражение

$$\begin{aligned} ([\rho_s^P + 2\rho_s^B] \delta_{ij} + 2\rho_s^P m_i m_j) (v_s^j)^{in} &= \\ = ([\rho_s^P - \rho_s^B] \delta_{ij} + 2\rho_s^P m_i m_j) u_j. \end{aligned} \quad (40)$$

После простых выкладок можно записать ответ для сверхтекучей скорости внутри аэрогеля:

$$\begin{aligned} (v_s^{in})_i &= \left( \frac{\rho_s^P - \rho_s^B}{\rho_s^P + 2\rho_s^B} \delta_{ij} + \right. \\ &\left. + \frac{6\rho_s^P \rho_s^B}{(\rho_s^P + 2\rho_s^B)(2\rho_s^B + 3\rho_s^P)} m_i m_j \right) u_j. \end{aligned} \quad (41)$$

Матрица, связывающая скорость  $\mathbf{u}$  со сверхтекучей скоростью  $\mathbf{v}_s^{in}$ , имеет два главных значения:

$$\frac{3}{2} \frac{\rho_s^P}{\rho_s^P + 2\rho_s^B} - \frac{1}{2}, \quad \mathbf{u} \perp \mathbf{m}, \quad (42)$$

$$\frac{3}{2} \frac{3\rho_s^P}{3\rho_s^P + 2\rho_s^B} - \frac{1}{2}, \quad \mathbf{u} \parallel \mathbf{m}. \quad (43)$$

Как видно из написанного выражения, в случае  $\rho^P = 0$  мы получим хорошо известное выражение для поля скоростей вокруг непроницаемого шарика, движущегося в идеальной жидкости.

Кинетическая энергия жидкости, увлекаемой движением шара, содержит следующие члены:

$$\begin{aligned} E &= \frac{(\rho_n^P)_{ij} u_i u_j}{2} V_0 + \frac{(\rho_s^P)_{ij} (v_s^{in})_i (v_s^{in})_j}{2} V_0 + \\ &+ \frac{\rho_n^B u_i u_i}{2} \frac{V_0}{2} + \frac{\rho_s^B (v_s^{in})_i (v_s^{in})_i}{2} 2V_0, \end{aligned} \quad (44)$$

здесь  $V_0$  — объем тела. Первый член — это кинетическая энергия нормальной части жидкости, которая движется вместе с аэрогелем внутри его объема. Второй член — это энергия противотока сверхтекучей компоненты через аэрогель. Третий член — это энергия потенциального течения нормальной компоненты вокруг шара. Наконец, последний член возникает из-за потенциального течения сверхтекучей компоненты в наружной области и получается после простого интегрирования:

$$\int_{r>R} \frac{\rho_s^B (v_s^{in})_i (v_s^{in})_i}{2} d^3 r.$$

Удобно переписать выражение для энергии в виде

$$\begin{aligned} E &= \frac{3}{4} \rho u^2 V_0 - \frac{1}{2} [2(\rho_s^P)_{ij} + \rho_s^B \delta_{ij}] u_i u_j \frac{V_0}{2} + \\ &+ \frac{1}{2} [(\rho_s^P)_{ij} + 2\rho_s^B \delta_{ij}] (v_s^{in})_i (v_s^{in})_j V_0, \end{aligned} \quad (45)$$

где мы выделили член, описывающий не зависящую от температуры энергию потенциального движения жидкости для нормальной фазы  $^3\text{He}$ . Подстановка выражения для  $v_s^{in}$  из (41) в (45) позволяет получить энергию как квадратичную форму по  $u_i$ :

$$E = \frac{M_{ij}^{ad} u_i u_j}{2}, \quad (46)$$

где  $M_{ij}^{at}$  — это тензор присоединенной массы жидкости в отсутствие вязкости,

$$M_{ij}^{ad} = \frac{3}{2}\rho V_0 \left( \delta_{ij} - 3 \frac{\rho_s^P \rho_s^B}{\rho(\rho_s^P + 2\rho_s^B)} \times \left[ \delta_{ij} + \frac{4\rho_s^B}{3\rho_s^P + 2\rho_s^B} m_i m_j \right] \right). \quad (47)$$

Согласно выражениям (46) и (47) энергия потенциального движения вокруг и через аэрогель является квадратичной функцией от косинуса угла между направлением скорости движения аэрогеля  $\mathbf{u}$  и осью анизотропии аэрогеля (совпадает с направлением вектора  $\mathbf{m}$ ). В отсутствие сверхтекучести <sup>3</sup>He внутри аэрогеля выражение для присоединенной массы упрощается до  $3\rho V_0/2$ , что совпадает с ответом для непроницаемого шарика, движущего в идеальной жидкости, с учетом того, что масса шарика увеличивается на  $\rho V_0$  за счет массы жидкости внутри него. Выражение (47) может быть обобщено на случай аэрогеля эллиптической формы (см. Приложение):

$$M_{ij}^{ad} = (1 + \alpha)\rho V_0 \times \left( \delta_{ij} - (1 + \alpha) \frac{\rho_s^P \rho_s^B}{\rho(\rho_s^B + \alpha\rho_s^P)} \times \left[ \delta_{ij} + \frac{2\rho_s^B}{\rho_s^B + 3\alpha\rho_s^P} m_i m_j \right] \right), \quad (48)$$

где  $\alpha$  — «размагничивающий» фактор тела в направлении потока ( $\alpha = 1/2$  для шарика).

В дальнейшем мы разделим тензор присоединенной массы на два члена:

$$M_{ij}^{ad} = \frac{3}{2}\rho V_0 \delta_{ij} - \delta M_{ij}^{B-P},$$

где последний член возникает только в присутствии сверхтекучести внутри аэрогеля,  $\delta M_{ij}^{B-P} > 0$ .

### 5. ДВИЖЕНИЕ АЭРОГЕЛЯ В А-ФАЗЕ

Перейдем теперь к рассмотрению случая, когда снаружи аэрогеля находится А-фаза. Напомним, что мы рассматриваем случай текстуры вектора  $\mathbf{l}$  типа «ежа», для того чтобы исключить из рассмотрения сверхтекучие токи, связанные со вторым членом в выражении (9). Помимо этого, необходимо отметить, что рассматриваемые скорости потока должны быть малы, для того чтобы не происходила переориентация вектора  $\mathbf{l}$  на границе аэрогеля.

Решение для потенциального потока нормальной части жидкости вокруг аэрогеля находится аналогично случаю В-фазы. Из определения функции  $\varphi$  ее сверхтекучая часть выражается как

$$\varphi_s = \frac{A_i r_i}{r^\beta} - \frac{u_i r_i}{r^3} \frac{R^3}{2}, \quad (49)$$

где было использовано, что

$$\varphi_n = -\frac{u_i r_i}{r^3} \frac{R^3}{2}.$$

Строго говоря, выписанное выражение имеет смысл лишь в области  $|r - R| \gg \delta$ , но мы расширим область применимости выражения вплоть до поверхности аэрогеля, предполагая, что  $\delta \ll a$ . Для рассматриваемого случая граничные условия можно переписать в виде

$$\frac{A_i R_i}{R^\beta} - \frac{u_i R_i}{2} = (v_s^{in})_i R_i, \quad (50)$$

$$\rho_s^P (\delta_{ij} + 2m_i m_j) [(v_s^{in})_j - u_j] n_i = \rho_s^A \left( \frac{(A)_i}{R^\beta} - \frac{\beta n_i ((A)_j n_j)}{R^\beta} \right) n_i, \quad (51)$$

где было использовано, что  $(\rho_s^A)_{ij} n_j = \rho_s^A n_i$  (см. (9)). Комбинируя выписанные равенства, можно выразить сверхтекучую скорость внутри аэрогеля  $\mathbf{v}_s^{in}$  через  $\mathbf{u}$ :

$$(v_s^{in})_i = \left( \frac{\rho_s^P - (\beta - 1)\rho_s^A/2}{\rho_s^P + (\beta - 1)\rho_s^A} \delta_{ij} + \frac{3(\beta - 1)\rho_s^P \rho_s^A}{(\rho_s^P + (\beta - 1)\rho_s^A)(3\rho_s^P + (\beta - 1)\rho_s^A)} m_i m_j \right) u_j. \quad (52)$$

Если  $\mathbf{m} \parallel \mathbf{u}$  или  $\mathbf{m} \perp \mathbf{u}$ , то выражения для  $\mathbf{v}_s^{in}$  достаточно просты:

$$\mathbf{v}_s^{in} = \left( \frac{3}{2} \frac{3\rho_s^P}{3\rho_s^P + (\beta - 1)\rho_s^A} - \frac{1}{2} \right) \mathbf{u}, \quad \mathbf{m} \parallel \mathbf{u}, \quad (53)$$

$$\mathbf{v}_s^{in} = \left( \frac{3}{2} \frac{\rho_s^P}{\rho_s^P + (\beta - 1)\rho_s^A} - \frac{1}{2} \right) \mathbf{u}, \quad \mathbf{m} \perp \mathbf{u}. \quad (54)$$

Отметим, что полученные выражения отличаются от случая, когда снаружи аэрогеля существует В-фаза (42), (43). Как и ранее, запишем выражение для кинетической энергии жидкости в виде

$$E = \frac{(\rho_n^P)_{ij} u_i u_j}{2} V_0 + \frac{(\rho_s^P)_{ij} (v_s^{in})_i (v_s^{in})_j}{2} V_0 + \int_{r>R} \frac{(\rho_n^A)_{ij} (v_n^{out})_i (v_n^{out})_j}{2} d^3 r + \int_{r>R} \frac{(\rho_s^A)_{ij} (v_s^{out})_i (v_s^{out})_j}{2} d^3 r, \quad (55)$$

где

$$(v_n^{out})_i = \frac{(A_n)_i}{r^3} - 3 \frac{n_i(A_n)_j n_j}{r^3}, \quad (56)$$

$$(A_n)_i = -\frac{u_i}{2} R^3, \quad (57)$$

$$(v_s^{out})_i = \frac{(A)_i}{r^\beta} - \beta \frac{n_i(A)_j n_j}{r^\beta} + (v_n^{out})_i.$$

После простых, но длительных вычислений получим

$$M_{\parallel}^{ad} = \frac{3}{2} \rho V_0 \left( 1 - \frac{3\rho_s^P \rho_s^A (\rho_s^A (\beta - 1)(2\beta - 3)(\beta^2 + 3\beta + 4) - 3\rho_s^P (5\beta^3 - 6\beta^2 - 7\beta - 12))/2}{\beta(2\beta - 3)(3\rho_s^P + (\beta - 1)\rho_s^A)^2 \rho} \right), \quad (59)$$

$$M_{\perp}^{ad} = \frac{3}{2} \rho V_0 \left( 1 - \frac{\rho_s^P \rho_s^A \cdot \{ \rho_s^A (\beta - 1)(2\beta - 3)(\beta^2 + 3\beta + 4) - \rho_s^P (5\beta^3 - 6\beta^2 - 7\beta - 12) \} / 2}{\beta(2\beta - 3)(\rho_s^P + (\beta - 1)\rho_s^A)^2 \rho} \right). \quad (60)$$

Несмотря на громоздкость выражений, численное значение сверхтекучей части присоединенной массы в области температур, где  $2\rho_s^A \approx 3\rho_s^P \approx \rho_s^B$  совсем немного отличается от того, что было для случая внешней В-фазы. В частности, оценка отношения  $\delta M^{A-P} / \delta M^{B-P}$  получается следующей:

$$\delta M_{\parallel}^{A-P} / \delta M_{\parallel}^{B-P} \approx 0.84, \quad (61)$$

$$\delta M_{\perp}^{A-P} / \delta M_{\perp}^{B-P} \approx 0.93. \quad (62)$$

## 6. КОЛЕБАНИЯ АЭРОГЕЛЯ

В эксперименте [3] образец аэрогеля был прикреплен к тоненькой проволочке, через которую пропускался переменный электрический ток, который, в свою очередь, приводил к колебаниям системы, находящейся в постоянном магнитном поле. Оценка зависимости частоты собственных колебаний такой составной системы от сверхтекучей плотности  $^3\text{He}$  может быть проведена в рамках модели одномерного незатухающего осциллятора с заданной жесткостью  $K$ . В таком случае собственная частота системы дается выражением

$$\omega^2 = K/M,$$

где  $M$  — полная масса системы,

$$M = M_w + M_a + M_{ad}^0 - \delta M_{ad}^P, \quad (63)$$

здесь  $M_w$  — масса проволочки,  $M_a$  — масса аэрогеля,  $M_{ad}^0 = 3\rho V_0/2$  — масса присоединенной жидкости из-за потенциального обтекания шара (в нормальном состоянии  $^3\text{He}$  в пределе нулевой вязкости) плюс полная масса жидкости внутри аэрогеля,

$$E = \frac{3}{4} \rho u_i u_i V_0 + \frac{1}{2} (\rho_s^P)_{ij} [(v_s^{in})_i (v_s^{in})_j - u_i u_j] V_0 + \frac{\rho_s^A}{2} \left( \frac{\beta^2 - 2\beta + 5}{2\beta - 3} \left[ (v_s^{in})_i + \frac{u_i}{2} \right] \left[ (v_s^{in})_i + \frac{u_i}{2} \right] - 2 \frac{(1 + \beta)}{\beta} \left[ (v_s^{in})_i + \frac{u_i}{2} \right] u_i \right) V_0. \quad (58)$$

Из последнего выражения легко получить главные значения тензора присоединенной массы для рассматриваемого случая:

$\delta M^P$  — масса части сверхтекучей жидкости, которая не участвует в движении из-за частичного протекания сверхтекучей компоненты через аэрогель. Для дальнейшего анализа удобно ввести дополнительные обозначения [6]:

$$\omega_0^2 = \frac{K}{M_w + M_a}, \quad (64)$$

$$\omega_n^2 = \frac{K}{M_w + M_a + M_{ad}^0}, \quad (65)$$

где  $\omega_0$  — собственная частота системы в вакууме, а  $\omega_n$  — собственная частота системы с учетом присоединенной массы  $^3\text{He}$   $M_{ad}^0$ . Заметим, что здесь мы пренебрегли вязкостью системы, которая дает вклад как в инерционную массу системы, так и в затухание. При помощи новых обозначений можно переписать результат, выразив в явном виде  $\delta M^P$ :

$$\frac{\delta M^P}{M_{ad}^0} = \frac{\omega_n^2 / \omega^2 - 1}{\omega_n^2 / \omega_0^2 - 1}. \quad (66)$$

Левую часть формулы (66) можно вычислить при помощи соотношений (47), (48), (59), (60). Из нее можно оценить скачок собственной частоты колебаний системы при фазовом переходе снаружи аэрогеля из-за изменения функции потенциального обтекания. Полагая, что

$$1 - \delta M^{A-P} / \delta M^{B-P} \ll 1, \quad \frac{\omega_B - \omega_n}{\omega_n} \ll 1,$$

$$\frac{\omega_B - \omega_A}{\omega_B} \ll 1,$$

получим скачок частоты:

$$\omega_B - \omega_A \sim (\omega_A - \omega_n)(1 - \delta M^{A-P} / \delta M^{B-P}), \quad (67)$$

где  $\omega_A, \omega_B$  — частоты колебаний системы вблизи А–В перехода снаружи аэрогеля (соответственно выше и ниже точки перехода). Из эксперимента [3] известно, что при давлении 15.4 бар частота собственных колебаний системы в пределе нулевой вязкости равна  $f_n = \omega_n/2\pi \approx 566$  Гц (см. рис. 2 в [3]). К сожалению, из-за взаимодействия двух мод колебаний экспериментально оценить величину  $\omega_A$ , определенную выше, достаточно сложно, так как из-за данного взаимодействия происходит видимое уменьшение частоты основной моды. В области перехода в полярную фазу уменьшение частоты составляет порядка 20 Гц (при том же давлении, см. рис. 6 из [3]). Оценим величину  $f_A = \omega_A/2\pi$ , предполагая, что рассмотренный сдвиг частоты слабо зависит от температуры. Поскольку по определению величина  $\omega_A$  должна быть вычислена без учета эффекта вязкости, с учетом сдвига частоты из-за взаимодействия мод имеем  $f_a \approx (563 + 20) = 583$  Гц. Таким образом, используя соотношение (61), скачок частоты можно оценить примерно как 3 Гц, что не сильно противоречит экспериментальным данным.

## 7. ВЫВОДЫ

В настоящей статье представлен последовательный вывод граничных условий для фазового множителя параметра порядка при условии протекания сверхтекучего тока между двумя различными состояниями сверхтекучей жидкости с  $p$ -спариванием. Было показано, что в нулевом приближении по малому параметру  $\xi(\tau)/a$  фазу параметра порядка можно считать непрерывной функцией пространственной координаты. Данное утверждение справедливо только при условии пренебрежения джозефсоновскими токами через границу аэрогеля, а также при условии отсутствия текстурных сверхтекучих токов на границе аэрогеля. Можно привести также простую оценку влияния нестационарных джозефсоновских токов на полученные граничные условия. Выражение для данного тока можно записать в виде

$$\mathbf{j} \cdot \mathbf{n} = \frac{\Delta_B \Delta_P}{\lambda} (\varphi_s^B(\mathbf{r}) - \varphi_s^P(\mathbf{r})), \quad r \in S, \quad (68)$$

где мы предположили малость разницы фаз двух сверхтекучих состояний на границе аэрогеля. Как видно из написанного выражения, в состоянии покоя аэрогеля джозефсоновские токи должны исчезнуть, так как согласно полученным результатам фазы  $\varphi_s$  должны быть пропорциональны скорости

аэрогеля  $\mathbf{u}$ . Из вида выражения (68) при условии, что  $\lambda \sim \xi(\tau)$ , а также при помощи оценки для разности фаз двух состояний, полученной при выводе граничных условий, можно заключить, что нестационарные джозефсоновские токи имеют тот же порядок, что и токи, связанные с градиентом фазы. Поэтому для рассматриваемой в работе точности граничные условия измениться не должны. Таким образом, можно заключить, что для выполнения граничных условий помимо условия  $\xi(\tau)/a \ll 1$  необходимо, чтобы изменение фазы через границу было мало, т. е.  $u \ll \hbar/(m^3_{\text{He}} \xi(\tau))$ . К примеру, для нулевого давления и  $\tau = 0.001$  получается, что  $u \ll 1$  см/с.

Найденная температурная зависимость частоты механического резонанса системы возникает из-за соответствующей зависимости присоединенной массы от сверхтекучих плотностей наружного и внутреннего сверхтекучих состояний. Как следует из найденного соотношения, присоединенная масса мала, когда сверхтекучая плотность внутреннего состояния становится равной сверхтекучей плотности внешнего состояния. В этом случае сверхтекучая часть жидкости покоится и не участвует в потенциальном обтекании аэрогеля, поэтому в присоединенной массе системы остается лишь вклад нормальной компоненты жидкости. Этот вклад может быть разделен на две части — первый возникает из-за потенциального течения нормальной части жидкости в объеме порядка размеров аэрогеля, а второй из-за влияния вязкости в маленьком объеме  $\delta S$  вблизи поверхности аэрогеля. Для экспериментальных условий [3] (в области температур и частот колебаний имеет место неравенство  $\delta \ll a$ ), второй вклад гораздо меньше первого. К сожалению, экспериментально полученная температурная зависимость частоты оказалась более быстрой, чем это следует из теоретической модели, рассмотренной в статье. Одно из возможных объяснений наблюдаемого расхождения может быть связано с одновременным возбуждением второй моды колебаний, в которой происходят совместные колебания нитей аэрогеля и  $^3\text{He}$  внутри него. Эффективное отталкивание двух мод колебаний может быть причиной более сильной температурной зависимости механической ветви колебаний. Можно предположить, что в случае колебаний аэрогеля в направлении, перпендикулярном оси анизотропии аэрогеля, вторая мода колебаний не будет возбуждаться в силу сильной анизотропии тензора упругости нематического аэрогеля, и в таком случае рассмотренная теоретическая модель будет лучше описывать экспериментальные данные.

**Благодарности.** Автор признателен И. А. Фомину, В. В. Дмитриеву и А. А. Солдатову за полезные обсуждения результатов работы.

**Финансирование.** Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-12-00384).

### 8. ПРИЛОЖЕНИЕ

Для случая, когда снаружи аэрогеля существует В-фаза, полученный результат может быть обобщен для тела эллиптической формы в предположении, что аэрогель движется вдоль одной из главных осей эллипсоида. Основная идея заключается в том, что задача аналогична задаче о диэлектрическом теле в однородном электрическом поле. В нашей задаче  $A_i$  можно поставить в соответствие дипольный момент из задачи о диэлектрическом теле. Поскольку дипольный момент тела инвариантен относительно галилеевского преобразования, мы можем использовать хорошо известный результат из [4], в котором необходимо заменить диэлектрические проницаемости на тензоры сверхтекучей плотности наружного и внутреннего состояний системы. В итоге имеем

$$(A_s)_i = \frac{V_0}{4\pi} \frac{1 + \alpha}{\rho_s^B + \alpha\rho_s^P} \times \left( [\rho_s^P - \rho_s^B] \delta_{ij} + \frac{2(1 + \alpha)\rho_s^P \rho_s^B}{\rho_s^B + 3\alpha\rho_s^P} m_i m_j \right) u_j, \quad (69)$$

где  $\alpha$  — «размагничивающий» фактор тела в направлении потока ( $\alpha = 1/2$  для шара),  $V_0$  — объем тела.

Получим теперь выражение для тензора присоединенной массы эллиптического аэрогеля. Первые три члена в (44) остаются такими же, а последний может быть вычислен следующим образом [4]:

$$\frac{\rho_s^B}{2} \int_{V/V_0} (v_s^{out}(\mathbf{r}))^2 d^3r = \frac{\rho_s^B}{2} (-4\pi A_i u_i - V_0 u_i u_i) + \frac{\rho_s^B}{2} \int_{S_0} (\varphi + u_i r_i) ((v_s^{out})_j - u_j) df_j, \quad (70)$$

где  $df = -\mathbf{n}r^2 d\Omega$  — ориентированный элемент поверхности тела. При помощи граничных условий интеграл можно переписать в виде

$$-\frac{(\rho_s^P)_{jk}}{2} \int_{S_0} ((v_s^{in})_i r_i + u_i r_i) ((v_s^{in})_k - u_k) dn_j r^2 d\Omega, \quad (71)$$

и после несложных преобразований получим

$$-\frac{(\rho_s^P)_{jk}}{2} V_0 [(v_s^{in})_i (v_s^{in})_k - u_i u_k]. \quad (72)$$

Итоговое выражение для кинетической энергии запишем как

$$E = (1 + \alpha) \frac{\rho u_i u_i}{2} V_0 - \frac{(1 + \alpha)^2 \rho_s^P \rho_s^B}{\rho_s^B + \alpha\rho_s^P} \times \left( \delta_{ij} + \frac{2\rho_s^B}{\rho_s^B + 3\alpha\rho_s^P} m_i m_j \right) u_i u_j. \quad (73)$$

Таким образом, получается следующий вид тензора присоединенной массы для нематического аэрогеля эллиптической формы:

$$M_{ij}^{ad} = (1 + \alpha) \rho V_0 \left( \delta_{ij} - (1 + \alpha) \frac{\rho_s^P \rho_s^B}{\rho(\rho_s^B + \alpha\rho_s^P)} \times \left[ \delta_{ij} + \frac{2\rho_s^B}{\rho_s^B + 3\alpha\rho_s^P} m_i m_j \right] \right). \quad (74)$$

### ЛИТЕРАТУРА

1. K. Aoyama and R. Ikeda, Phys. Rev. B **73**, 060504(R) (2006).
2. V. V. Dmitriev, A. A. Senin, A. A. Soldatov, and A. N. Yudin, Phys. Rev. Lett. **115**, 165304 (2015).
3. В. В. Дмитриев, М. С. Кутузов, А. А. Солдатов, Е. В. Суровцев, А. Н. Юдин, Письма в ЖЭТФ **112**, 820 (2020).
4. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Гидродинамика*, Наука, Москва (2005).
5. C. Gabay, P. E. Wolf, and L. Puech, Physica B **284** (2000).
6. P. Brussaard, S. N. Fisher, A. M. Guenault, A. J. Hale, N. Mulders, and G. R. Pickett, Phys. Rev. Lett. **86**, 4580 (2001).
7. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (2005).
8. D. Vollhardt and P. Wölfle, *The Superfluid Phases of  $^3\text{He}$* , Taylor and Francis, London (1990).

# ТРАНСПОРТ ЗАРЯДА В АМОРФНОМ НИТРИДЕ КРЕМНИЯ

Ю. Н. Новиков<sup>a\*</sup>, В. А. Гриценко<sup>a,b,c</sup>

<sup>a</sup> *Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук  
630090, Новосибирск, Россия*

<sup>b</sup> *Новосибирский государственный университет  
630090, Новосибирск, Россия*

<sup>c</sup> *Новосибирский государственный технический университет  
630073, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 28 апреля 2021 г.,  
после переработки 26 мая 2021 г.  
Принята к публикации 26 мая 2021 г.

В широком диапазоне электрических полей и температур экспериментально рассмотрен перенос заряда в аморфном нитриде кремния ( $\text{Si}_3\text{N}_4$ ). Экспериментальные результаты сравниваются с численными расчетами. Для описания ионизации глубоких центров (ловушек) в  $\text{Si}_3\text{N}_4$  использовались эффект Френкеля с учетом термически облегченного туннелирования и многофононный механизм. Показано, что эффект Френкеля с учетом термически облегченного туннелирования формально описывает эксперимент, но в расчетах при этом необходимо использовать аномально малый частотный фактор ( $10^9 \text{ с}^{-1}$ ) и большую эффективную туннельную массу ( $3m_0$ ). Удовлетворительное согласие эксперимента с расчетом получено при использовании теории многофононной ионизации ловушек со следующими параметрами:  $W_T^{e,h} = 1.6 \text{ эВ}$ ,  $W_{opt}^{e,h} = 3.2 \text{ эВ}$ ,  $W_{ph}^{e,h} = 0.064 \text{ эВ}$ ,  $m_{e,h}^* = 0.6m_0$  и  $N^{e,h} = 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , что соответствует термической энергии, оптической энергии, энергии фонона, эффективной туннельной массе и концентрации электронных и дырочных ловушек.

DOI: 10.31857/S0044451021100138

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Диэлектрические пленки широко используются в кремниевых приборах [1]. Большинство аморфных диэлектриков, таких как  $\text{Si}_3\text{N}_4$  [1–4], BN [5],  $\text{Al}_2\text{O}_3$  [6],  $\text{GeO}_2$  [7] и др., имеет высокую плотность (более  $10^{18} \text{ см}^{-3}$ ) глубоких центров (ловушек). В сильных электрических полях ( $10^6$ – $10^7 \text{ В/см}$ ) из контактов в диэлектрик инжектируются неравновесные электроны и дырки, которые захватываются на ловушки. Перенос заряда (ток утечки) в электрическом поле в диэлектриках происходит при помощи ловушек. Аморфный нитрид кремния обладает эффектом памяти [1, 8], который заключается в локализации электронов и дырок на ловушках с гигантским временем удержания (более 10 лет при 300 К). Эффект памяти в  $\text{Si}_3\text{N}_4$  используется для хранения за-

ряда в современных трехмерных приборах флэш-памяти терабитного масштаба [8].

Ток утечки диэлектрических пленок экспоненциально возрастает с ростом электрического поля (закон Пула) [9]. Для объяснения экспоненциальной зависимости тока от электрического поля Френкель предложил простую наглядную модель, основанную на ионизации кулоновских ловушек в электрическом поле [10, 11]. Эффект Френкеля широко применяется для объяснения ионизации ловушек в  $\text{Si}_3\text{N}_4$  [2–4]. Как правило, перенос заряда в полупроводниках интерпретируется с использованием теории многофононной ионизации ловушек [12–14]. В последнее время теория многофононной ионизации ловушек применяется для описания переноса заряда в различных диэлектриках (BN [5],  $\text{Al}_2\text{O}_3$  [6],  $\text{GeO}_2$  [7],  $\text{HfO}_2$  [15] и др.).

Целью настоящей работы является экспериментальное изучение механизма переноса заряда в  $\text{Si}_3\text{N}_4$  в широком диапазоне температур (130–600 К) и электрических полей ( $2 \cdot 10^6$ – $7 \cdot 10^6 \text{ В/см}$ ). Экспериментальные результаты сопоставляются с чис-

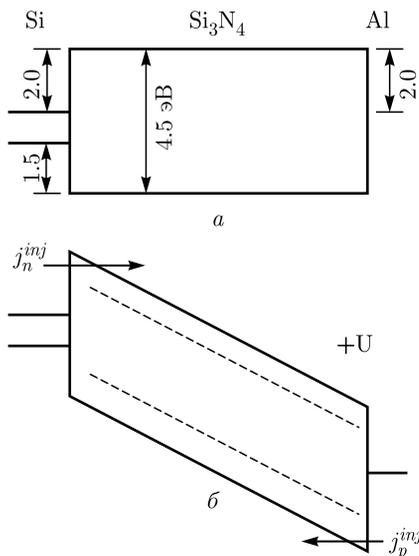
\* E-mail: nov@isp.nsc.ru

ленными расчетами. В расчетах используется биполярная модель проводимости, т. е. в переносе заряда учитываются электроны и дырки. Для описания вероятности ионизации ловушек использованы следующие модели: эффект Пула – Френкеля с учетом термически облегченного туннелирования (thermally assisted tunneling, TAT) и многофононный механизм ионизации ловушек. Для описания многофононного механизма ионизации ловушек используется модель из работы [12] и модель, предложенная Карпусом в работе [14] для высоких электрических полей.

## 2. ОБРАЗЦЫ, МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА И РАСЧЕТА

Аморфный Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> толщиной 92 нм выращен на подложке *n*-Si методом пиролиза смеси силана и аммиака в потоке водорода при 850 °С. На поверхность Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> через маску были осаждены контакты из Al площадью 5 · 10<sup>-3</sup> см<sup>2</sup>. Измерение температурных зависимостей структур *n*-Si/Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/Al (при фиксированном потенциале на Al-электроде) проводились в криостате в диапазоне температур 130–600 К. Скоростью изменения температуры составляла около 20 К/мин.

Энергетическая диаграмма структуры Si/Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/Al показана на рис. 1 без приложен-



**Рис. 1.** Энергетическая диаграмма структуры Si/Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/Al: *a* — без приложенного электрического поля; *b* — при положительном потенциале на Al. Штрихами отмечены электронные и дырочные ловушки, стрелками — инжекционные токи

ного напряжения и при положительном потенциале на Al.

Для рассмотрения переноса заряда в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> использовалась одномерная двухзонная модель. Перезарядка ловушек описывалась с помощью статистики Шокли – Рида – Холла. Неоднородное электрическое поле в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> рассчитывалось с использованием уравнения Пуассона. С учетом сказанного выше уравнения для описания переноса заряда в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> имеют следующий вид:

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{e} \frac{\partial j_n(x, t)}{\partial x} - \sigma^e v n(x, t) (N^e - n_t(x, t)) + n_t(x, t) P^e(x, t) - \sigma_r^e v n(x, t) p_t(x, t), \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_t(x, t)}{\partial t} = \sigma^e v n(x, t) (N^e - n_t(x, t)) - n_t(x, t) P^e(x, t) - \sigma_r^h v n_t(x, t) p(x, t), \quad (2)$$

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{e} \frac{\partial j_p(x, t)}{\partial x} - \sigma^h v p(x, t) (N^h - p_t(x, t)) + p_t(x, t) P^h(x, t) - \sigma_r^h v p(x, t) n_t(x, t), \quad (3)$$

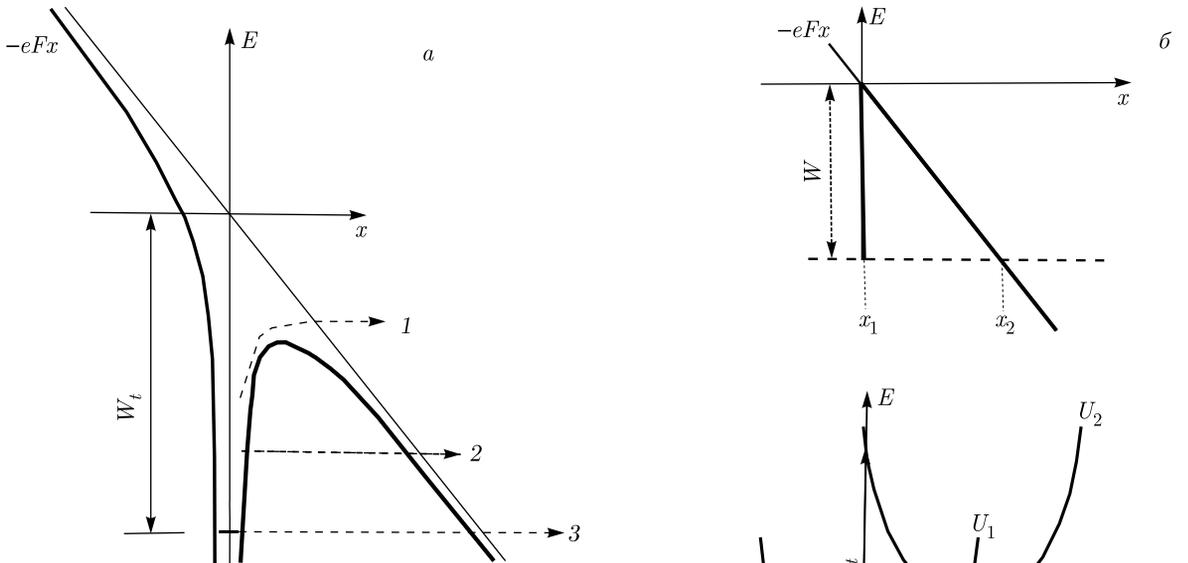
$$\frac{\partial p_t(x, t)}{\partial t} = \sigma^h v p(x, t) (N^h - p_t(x, t)) - p_t(x, t) P^h(x, t) - \sigma_r^e v p_t(x, t) n(x, t), \quad (4)$$

$$\frac{\partial F(x, t)}{\partial x} = -e \frac{n_t(x, t) + n(x, t) - p_t(x, t) - p(x, t)}{\varepsilon \varepsilon_0}, \quad (5)$$

где  $n$  и  $n_t$  — концентрации свободных и захваченных на ловушки электронов,  $p$  и  $p_t$  — концентрации свободных и захваченных дырок,  $P^{e,h}$  — темп ионизации при заданных величинах электрического поля ( $F$ ) и температуры ( $T$ ),  $N^{e,h}$  — концентрация пустых ловушек,  $\sigma^{e,h}$  — сечение захвата и  $\sigma_r^{e,h}$  — сечение рекомбинации между свободными и захваченными на ловушку носителями противоположного знака,  $\varepsilon = 7.5$  — низкочастотная диэлектрическая проницаемость Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> [2],  $\varepsilon_0$  — электрическая постоянная,  $e$  — заряд электрона,  $v$  — дрейфовая скорость. Дрейфовые скорости электронов и дырок связаны с плотностью тока соотношениями  $j_n(x) = en(x)v$  и  $j_p(x) = -ep(x)v$ .

В качестве граничных условий в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> для уравнения (5) используется величина прикладываемого к Al-контакту импульса внешнего напряжения  $U$ ; для уравнений (1)–(4) —

$$n_0(t) = \frac{j_n^{inj}}{ev}, \quad p_0(t) = \frac{j_p^{inj}}{ev},$$



**Рис. 2.** Энергетические диаграммы для двух моделей ионизации ловушек. *а)* Модель Френкеля с учетом ТАТ: 1 — эффект Френкеля; 2 — ТАТ; 3 — прямое туннелирование. *б)* Многофонный механизм ионизации: сверху — туннелирование электрона сквозь потенциал нулевого радиуса (нейтральная ловушка), внизу — адиабатические термы ( $U_1$  — ловушка с захваченным электроном,  $U_2$  — пустая ловушка,  $U_W$  — терм в сильном электрическом поле,  $Q$  — конфигурационная координата,  $W_{opt}$  — оптическая энергия,  $W_T$  — термическая энергия,  $W$  — энергия вылетевшего электрона,  $x_1$  и  $x_2$  — классические точки поворота)

где  $j_n^{inj}$  и  $j_p^{inj}$  — соответственно инжекционные токи электронов из Si-подложки и дырок из Al (рис. 1б), которые рассчитывались на основе механизма Фаулера – Нордгейма с учетом ТАТ [16]. В диэлектриках условно выделяют два вида проводимости: 1) контактно-ограниченную, которая в основном определяется величиной энергетического барьера на границе полупроводник(металл)/диэлектрик; 2) объемно-ограниченную проводимость, которая определяется ловушками (энергией ловушки, вероятностью ионизации, концентрацией, сечением захвата).

Для расчета вероятности ионизации ловушки использовалась модель Френкеля с учетом ТАТ (рис. 2а) и многофонный механизм ионизации (рис. 2б). Согласно эффекту Френкеля, вероятность ионизации ловушки определяется как [10, 11]

$$P_F = \nu \exp\left(-\frac{W_t - \beta\sqrt{F}}{kT}\right), \quad \beta = \sqrt{\frac{e^3}{\pi\epsilon_\infty\epsilon_0}}. \quad (6)$$

Здесь  $W_t$  — энергия ловушки,  $\beta$  — постоянная Френкеля,  $k$  — постоянная Больцмана,  $\epsilon_\infty = 4.0$  — вы-

сокочастотная диэлектрическая проницаемость [2],  $\nu$  — частотный фактор.

Кроме термической ионизации ловушки через верх кулоновского барьера (рис. 2а), рассмотренной в оригинальных работах Френкеля, мы учитываем механизм ТАТ [5], который помимо прямого туннелирования предусматривает туннелирование из некоторого возбужденного состояния  $W$ :

$$P_{TAT} = \frac{\nu}{kT} \int_0^{W_t - \beta\sqrt{F}} dW \times \exp\left(-\frac{W}{kT} - \frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{m^*(eV(x) - W)}\right), \quad (7)$$

$$V(x) = W_t - \frac{e}{4\pi\epsilon_\infty\epsilon_0 x} - Fx.$$

Здесь  $V(x)$  — кулоновский барьер,  $m^*$  — туннельная эффективная масса. Классические точки поворота рассчитывались по формуле

$$x_{1,2} = \frac{1}{2} \frac{W_t - W}{eF} \times \left( 1 \pm \left( \frac{eF}{\pi \varepsilon_\infty \varepsilon_0 (W_t - W)^2} \right)^{1/2} \right). \quad (8)$$

Темп ионизации по механизму Френкеля с учетом ТАТ рассчитывался по формуле

$$P_{F,ТАТ} = P_F + P_{ТАТ}. \quad (9)$$

Для вычисления вероятности ионизации ловушек также используется модель многофононной ионизации [12]. Следуя работе [12], мы предполагаем, что ловушка в незаполненном состоянии является нейтральной и представляет собой осциллятор, встроенный в решетку Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>. Ловушка может захватывать электрон и дырку. На рис. 2б (внизу) показана потенциальная энергия ядра, так называемая конфигурационная диаграмма. В этой модели ловушка представляет собой гармонический осциллятор с обобщенной координатой  $Q$  и частотой  $\omega$ . Захваченный электрон (дырка) имеют энергию, линейно зависящую от  $Q$ :

$$W = -\sqrt{2S} Q \hbar \omega + \text{const}, \quad (10)$$

где  $S$  — так называемая константа взаимодействия Хуанга–Риса; с величиной  $\hbar \omega$  связывается энергия фонона. Благодаря линейной зависимости от  $Q$ , система, состоящая из «ядра» с захваченным электроном, также является гармоническим осциллятором, энергетическая диаграмма которого сдвинута вниз. Во внешнем поле эта составная система может распадаться на пустое «ядро» и свободный носитель (процесс ионизации). Обычно после процесса ионизации конечным состоянием «ядра» является возбужденное состояние. Этот избыток энергии «ядро» тратит на то, чтобы вызвать другие моды колебаний решетки. В рамках этой модели вероятность ионизации ловушки дается выражением [12]

$$P_{ME} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \left[ \frac{nW_{ph}}{2kT} - S \text{cth} \frac{W_{ph}}{2kT} \right] \times I_n \left( \frac{S}{\text{sh}(W_{ph}/2kT)} \right) P_i(W_T + nW_{ph}), \quad (11)$$

$$P_i(W) = \frac{eF}{2\sqrt{2m^*W}} \exp \left( -\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m^*}}{\hbar eF} W^{3/2} \right),$$

$$S = \frac{W_{opt} - W_T}{W_T},$$

где  $W_T$  — термическая энергия ионизации ловушки,  $W_{opt}$  — оптическая энергия ионизации ловушки,  $W_{ph}$  — энергия фонона,  $I_n$  — функция Бесселя.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 3 приведены экспериментальные зависимости электрического тока от обратной температуры в координатах Аррениуса ( $\ln(j) - T^{-1}$ ) для разных величин потенциала на Al-электроде и их расчет с использованием эффекта Френкеля с ТАТ в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>. На рисунке видно, что ток слабо зависит от температуры при  $T < 200$  К. Слабая зависимость тока от температуры свидетельствует о туннельном механизме ионизации ловушек. С повышением температуры усиливается термостимулированный механизм ионизации ловушек. Наилучшее согласие эксперимента с расчетом было получено при следующих параметрах ловушек:

$$\nu = 10^9 \text{ с}^{-1}, \quad W_t^e = 1.5 \text{ эВ}, \quad m_e^* = 3m_0,$$

$$N^e = 8 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}, \quad \sigma^e = 5 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2,$$

$$\sigma_r^e = 5 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2, \quad W_t^h = 1.5 \text{ эВ}, \quad m_h^* = 3m_0,$$

$$N^h = 8 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}, \quad \sigma^h = 5 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2,$$

$$\sigma_r^h = 5 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2.$$

В оригинальной работе Френкеля [10] частотный фактор рассчитывался по формуле  $\nu = W_t/\hbar$ . В нашем случае он составляет величину  $\nu \approx 10^{15} \text{ с}^{-1}$ . В работе [16] была проведена оценка туннельных масс дырки и электрона в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>:  $m_{h,e} = 0.4m_0$ . Таким образом, эффект Френкеля с учетом ТАТ формально описывает эксперименты по переносу заряда в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>

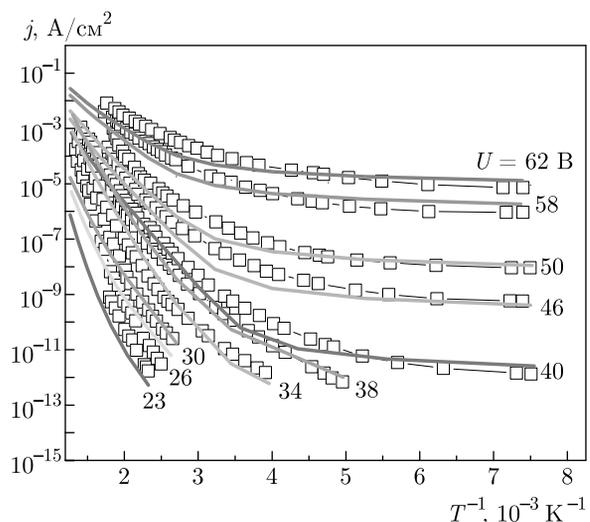
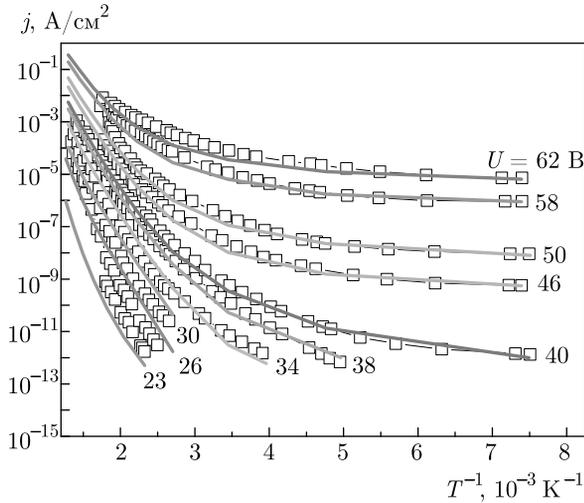


Рис. 3. (В цвете онлайн) Температурные зависимости тока в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> для разных величин потенциала на Al-электроде: квадраты — эксперимент; сплошные линии — расчет (модель Френкеля совместно с ТАТ)



**Рис. 4.** (В цвете онлайн) Температурные зависимости тока в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> для разных величин потенциала на Al-электроде: квадраты — эксперимент, сплошные линии — расчет (многофононный механизм ионизации ловушек, точная модель [12])

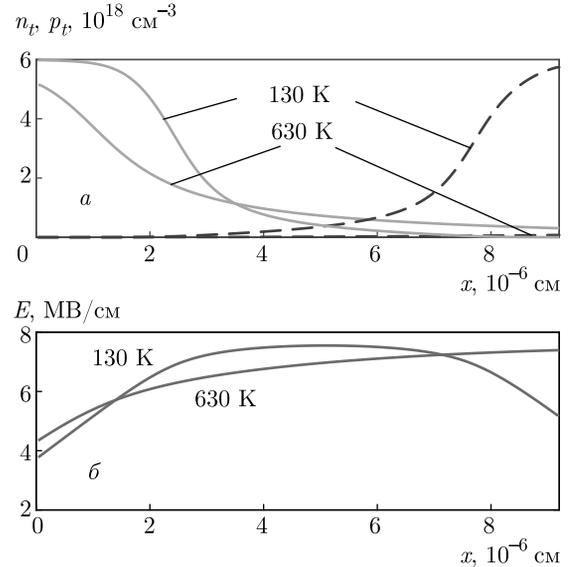
во всем диапазоне электрических полей и температур. При этом величина частотного фактора, применяемого в расчетах, составляет нефизично малую величину. Кроме того, теория ТАТ предсказывает аномально большую туннельную массу для электронов и дырок. Малая величина частотного фактора была получена при описании переноса заряда с использованием модели Френкеля в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> [3], BN [5], Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> [17].

На рис. 4 приведены экспериментальные зависимости электрического тока от обратной температуры для разных величин потенциала на Al-электроде, измеренные в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, и их расчет с помощью теории многофононной ионизации носителей [12]. В расчетах использовались следующие параметры ловушек:

$$\begin{aligned}
 W_T^e &= 1.6 \text{ эВ}, & W_{opt}^e &= 3.2 \text{ эВ}, & W_{ph}^e &= 0.064 \text{ эВ}, \\
 m_e^* &= 0.6m_0, & N^e &= 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}, & \sigma^e &= 5 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2, \\
 \sigma_r^e &= 5 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2, & W_T^h &= 1.6 \text{ эВ}, & W_{opt}^h &= 3.2 \text{ эВ}, \\
 W_{ph}^h &= 0.064 \text{ эВ}, & m_h^* &= 0.6m_0, & N^h &= 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}, \\
 \sigma^h &= 5 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2, & \sigma_r^h &= 5 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2.
 \end{aligned}$$

Расчет дает удовлетворительное согласие с экспериментом во всем диапазоне электрических полей и температур (рис. 4).

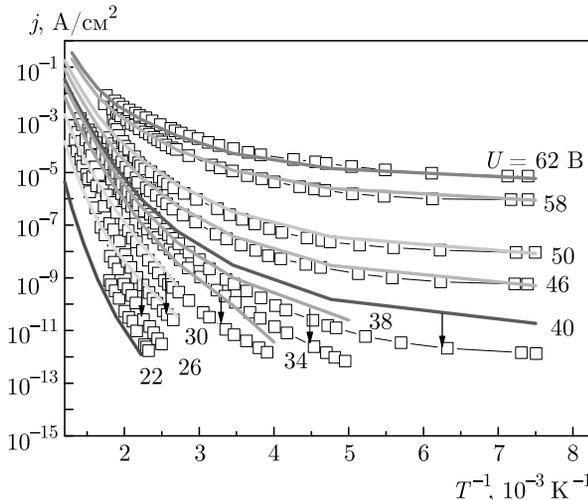
Анализ расчетов свидетельствует о том, что в сильных электрических полях ( $F > 3.7$  МВ/см,



**Рис. 5.** (В цвете онлайн) Расчет для Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> при фиксированном потенциале 62 В на Al-электроде для разных температур: *a* — распределение захваченных на ловушки электронов и дырок; *б* — распределение электрического поля. В расчетах использован многофононный механизм ионизации ловушек [12], как в случае рис. 4

$U > 38$  В) проводимость в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> является объемно-ограниченной. В слабых электрических полях ( $F < 2.5$  МВ/см,  $U < 26$  В) проводимость контактно-ограниченная. Диапазон электрических полей 2.5–3.7 МВ/см является переходной областью. Расчет показывает, что в слабых электрических полях (менее 2.5 МВ/см) захваченный заряд с концентрацией около  $10^{15}$  см<sup>-3</sup> распределен равномерно по всему образцу Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> при всех температурах. Электрическое поле, создаваемое таким малым зарядом, практически не меняет (не экранирует) внешнее поле, и оно остается постоянным по всей толщине образца Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>. По этой причине при заданном внешнем электрическом поле вероятность ионизации ловушек одинакова во всем образце Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> и изменяется только за счет изменения температуры.

В области электрических полей более 2.5 МВ/см захват инжектированных в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> носителей во всем диапазоне температур происходит преимущественно вблизи контактов (рис. 5*a*). С уменьшением температуры происходит уменьшение вероятности ионизации ловушек. Это приводит к увеличению концентрации захваченных носителей вблизи контактов, к усилению экранирования внешнего электрического поля и, как следствие, к уменьшению тока Фаулера–Нордгейма. На рис. 5*б* показано изменение распределения электрического поля в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> в



**Рис. 6.** (В цвете онлайн) Температурные зависимости тока в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> для разных потенциалов на Al-электроде: квадраты — эксперимент, сплошные линии — расчет (многофононный механизм ионизации ловушек, упрощенная модель [14]). Стрелки показывают, какой экспериментальной зависимости соответствует расчетная линия

зависимости от температуры при приложенном потенциале  $U = 62$  В на Al-контакте. На рисунке видно, что электрическое поле является неоднородным вблизи границы Si/Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, где оно меняется в диапазоне от 4.0 до 7.5 МВ/см.

Для сильных электрических полей в работах [13, 14] предложена упрощенная аналитическая формула расчета вероятности ионизации ловушки (без функции Бесселя):

$$P_K = \frac{F}{2\sqrt{2m^*W_{opt}}} \exp \left( -\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m^*}}{\hbar F} W_{opt}^{3/2} + b \frac{m^*\omega}{\hbar} \frac{W_{opt}^2}{F^2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2kT} \right), \quad (12)$$

$$b = \frac{4(W_{opt} - W_T)}{W_{opt}}, \quad \omega = \frac{W_{ph}}{\hbar}.$$

Минимальное электрическое поле  $F_{min}$ , необходимое для туннелирования электрона (дырки), определяются из соотношения [14]

$$F > \frac{\omega \sqrt{2m^*W_{opt}}}{e}, \quad (13)$$

где  $\omega$  — частота колебаний «ядра» ловушки, которая может быть оценена из выражения  $\omega \approx W_{ph}/\hbar$ . Оценка дает  $F_{min} = 4.3$  МВ/см ( $U = 40$  В). На рис. 6 представлены результаты расчета по этой модели с использованием следующих параметров:

$$W_T^e = 1.65 \text{ эВ}, \quad W_{opt}^e = 3.3 \text{ эВ}, \quad W_{ph}^e = 0.05 \text{ эВ},$$

$$m_e^* = 0.6m_0, \quad N^e = 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}, \quad \sigma^e = 5 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2,$$

$$\sigma_r^e = 5 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2, \quad W_T^h = 1.65 \text{ эВ}, \quad W_{opt}^h = 3.3 \text{ эВ},$$

$$W_{ph}^h = 0.05 \text{ эВ}, \quad m_h^* = 0.6m_0, \quad N^h = 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3},$$

$$\sigma^e = 5 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2, \quad \sigma_r^h = 5 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2.$$

Расчет демонстрирует хорошее согласие с экспериментом для электрических полей более 5 МВ/см (46 В). При более слабых электрических полях наблюдается расхождение эксперимента и расчета.

Рассмотрим возможную причину возникновения anomalно большой эффективной туннельной массы и малого частотного фактора при использовании эффекта Френкеля с учетом ТАТ в сравнении с многофононным механизмом ионизации. При использовании эффекта Френкеля с учетом ТАТ экспериментальные результаты соответствуют ловушке, энергия которой составляет  $W_t \approx 1.5$  эВ, т.е. электрон при ионизации ловушки туннелирует сквозь барьер с энергией менее 1.5 эВ (см. рис. 2а). В то же время электрон при многофононном механизме ионизации туннелирует сквозь барьер, величина которого изменяется в диапазоне от 0 до  $W_{opt}$  (см. рис. 2б) в зависимости от электрического поля и температуры. В частности, в режиме сильных электрических полей электрон туннелирует сквозь барьер с энергией  $W_{opt}$  (формула (12)), т.е. с энергией примерно 3.2 эВ. Аналогичный эффект наблюдался в SiO<sub>2</sub> в работе [18], где было показано, что ловушка для электрона имеет энергию около 3.0 эВ. Рассуждения для захваченной на ловушку дырки будут аналогичными.

Многофононный механизм ионизации ловушек в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> предполагает сильный поляронный эффект (большая разница между термической и оптической энергиями ионизации). Ранее поляронная модель электронных и дырочных ловушек в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> обсуждалась в работах [19, 20]. Согласно этой модели, захват электронов и дырок в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> осуществляется на минимальный кластер кремния: связь Si-Si. Поляронная модель предполагает, что Si-Si-связь или кремниевый кластер, состоящий из нескольких атомов кремния, является глубоким центром захвата для электронов (дырок) и рекомбинационным центром. Квантово-химическое моделирование Si-Si-связи в Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> качественно подтверждает эту гипотезу [21–23].

## 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе изучен механизм транспорта заряда в аморфном  $\text{Si}_3\text{N}_4$ . Результаты эксперимента (зависимости тока от температуры, измеренные при разных величинах потенциала на Al-контакте) сравнивались с расчетами. Модель на основе эффекта Френкеля с учетом ТАТ формально описывает экспериментальные результаты, но при этом в расчетах необходимо использовать аномально большую эффективную туннельную массу и нефизично малый частотный фактор. Многофононный механизм удовлетворительно описывает экспериментальные результаты при разумных физических параметрах ловушек. Упрощенная модель, основанная на многофононном механизме ионизации ловушек, также описывает экспериментальные результаты в режиме сильных электрических полей (более 4.3 МВ/см). Для электронных и дырочных ловушек использовались одинаковые параметры.

**Финансирование.** Изготовление образцов проводилось при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-29-03018), эксперименты — Российского научного фонда (грант № 19-19-00286), моделирование экспериментальных данных — в рамках государственного задания ИФП СО РАН (№ 0242-2021-0003).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Т. В. Перевалов, В. А. Гриценко, УФН **180**, 257 (2010).
2. S. Manzini, J. Appl. Phys. **62**, 3278 (1987).
3. H. Bachhofer, H. Reisinger, E. Bertagnolli et al., J. Appl. Phys. **89**, 2791 (2001).
4. S. M. Sze, J. Appl. Phys. **18**, 2951 (1967).
5. Yu. N. Novikov and V. A. Gritsenko, J. Non-Cryst. Sol. **544**, 120213 (2020).
6. Yu. N. Novikov, V. A. Gritsenko, and K. A. Nasyrov, Appl. Phys. Lett. **94**, 222904 (2009).
7. A. V. Shaposhnikov, T. V. Perevalov, V. A. Gritsenko et al., Appl. Phys. Lett. **100**, 243506 (2012).
8. B. Prince, *Vertical 3D Memory Technologies*, John Wiley & Sons, Chichester, United Kingdom (2014).
9. H. H. Pool, Phil. Mag. **34**, 112 (1916).
10. Я. И. Френкель, ЖЭТФ **8**, 1292 (1938).
11. J. Frenkel, Phys. Rev. B **54**, 647 (1938).
12. S. S. Makram-Ebeid and M. Lannoo, Phys. Rev. B **25**, 6406 (1982).
13. В. Н. Абакумов, В. И. Перель, И. Н. Ясиевич, *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках*, Изд-во ПИЯФ РАН, Санкт-Петербург (1997).
14. В. Карпус, Письма ЖЭТФ **44**, 334 (1986).
15. Yu. N. Novikov, J. Appl. Phys. **113**, 024109 (2013).
16. V. A. Gritsenko, E. E. Meerson, and Yu. N. Morokov, Phys. Rev. B **57**, R2081 (1998).
17. V. A. Gritsenko, T. V. Perevalov, V. A. Voronkovskii et al., ACS Appl. Mater. Interfaces **10**, 3769 (2018).
18. K. Yamabe and Y. Miura, J. Appl. Phys. **51**, 6258 (1980).
19. В. А. Гриценко, П. А. Пундур, ФТТ **28**, 3239 (1978).
20. P. A. Pundur, J. G. Shvalgin, and V. A. Gritsenko, Phys. Stat. Sol. (a) **94**, k701 (1986).
21. V. A. Gritsenko, H. Wong, J. B. Xu et al., J. Appl. Phys. **86**, 3234 (1999).
22. M. Petersen and Y. Roizin, Appl. Phys. Lett. **89**, 053511 (2006).
23. M.-E. Grillo and S. D. Elliott, Phys. Rev. B **83**, 085208 (2011).

# ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНОЙ ЖИДКОСТИ В МОНОСЛОЙНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ ДИХАЛЬКОГЕНИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

П. Л. Пех<sup>a\*</sup>, П. В. Ратников<sup>b\*\*</sup>, А. П. Силлин<sup>a,c\*\*\*</sup>

<sup>a</sup> Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук  
119991, Москва, Россия

<sup>b</sup> Институт общей физики им. А. М. Прохорова Российской академии наук  
119991, Москва, Россия

<sup>c</sup> Московский физико-технический институт  
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 30 апреля 2021 г.,  
после переработки 2 июня 2021 г.  
Принята к публикации 30 июня 2021 г.

В последние несколько лет интерес к мономолекулярным слоям дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ) был обусловлен их необычными электронными и оптическими свойствами, которые очень привлекательны для создания функциональных элементов нанoeлектроники нового поколения. Недавно появились экспериментальные доказательства образования высокотемпературной сильносвязанной электронно-дырочной жидкости (ЭДЖ) в монослоях ДПМ. Сильное связывание носителей тока обусловлено существенным уменьшением экранирования кулоновского взаимодействия в монослойных гетероструктурах. В настоящей работе рассмотрен фазовый переход газ–жидкость в системе электронов и дырок в квазидвумерных гетероструктурах на основе ДПМ и рассчитаны критические параметры такого перехода. Описан переход диэлектрик–металл и построена фазовая диаграмма для таких гетероструктур.

DOI: 10.31857/S004445102110014X

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Последние полтора десятка лет ознаменовались интенсивными исследованиями двумерного (2D) углеродного материала графена в качестве основы нанoeлектроники нового поколения [1]. Возникла обширная деятельность по изучению 2D-материалов, таких как монослои гексагонального нитрида бора, черного фосфора, дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ), а также многих других соединений [2]. Перспективным направлением этой деятельности стало создание и изучение вертикальных (ван-дер-ваальсовых) гетероструктур, в которых в заданной последовательности комбинируются различные 2D-материалы [3].

Особое место в проводимых ныне исследованиях 2D-материалов заняли мономолекулярные слои

ДПМ. Они имеют структуру сэндвича со слоем атомов переходного металла  $M$ , заключенного между слоями атомов халькогена  $X$ , и описываются химической формулой  $MX_2$ . Наиболее изученными представителями этого класса веществ являются соединения с атомами металла VI группы ( $M = Mo, W$ ) и  $S, Se, Te$  в качестве халькогена. Объемные слоистые ДПМ, такие как  $MoS_2, WS_2, MoSe_2, WSe_2$ , имеют непрямую энергетическую щель  $E_g \sim 1$  эВ [4, 5], а их мономолекулярные слои становятся прямозонными полупроводниками с  $E_g$  около 2 эВ [6].

В монослоях ДПМ можно добиться селективного по долинам возбуждения носителей тока циркулярно-поляризованной электромагнитной волной [7–11]. Это подтолкнуло исследователей к разработке приборов нанoeлектроники нового типа — долиноэлектроники, где наряду с переносом электрического заряда осуществлялся бы селективный перенос носителей тока с определенным долинным индексом [1, 12–14].

\* E-mail: pavel.pekh@phystech.edu

\*\* E-mail: ratnikov@lpi.ru

\*\*\* E-mail: a.p.silin@mail.ru

Оптические свойства мономолекулярных слоев ДПМ во многом определяются экситонами и трионами. Энергия связи экситона  $E_x$  в ДПМ составляет сотни мэВ, а триона — десятки мэВ [6]. Включение тонких слоев ДПМ в ван-дер-ваальсовы гетероструктуры позволяет наблюдать многочастичные эффекты в системах с большим временем жизни носителей тока. Благодаря этим обстоятельствам структуры на основе ДПМ считаются идеальными системами для исследования высокотемпературной электронно-дырочной жидкости (ЭДЖ).

Обычно [15–20] энергия одной электрон-дырочной ( $e-h$ ) пары в ЭДЖ  $|E_{EHL}| \gtrsim E_x$ , а критическая температура фазового перехода газ-жидкость  $T_c \sim 0.1 |E_{EHL}|$ . Поэтому можно ожидать, что в монослоях ДПМ будет наблюдаться ЭДЖ даже при комнатных температурах.

В 2019 году был опубликован ряд работ касательно ЭДЖ в монослоях ДПМ. Остановимся на них подробнее для освещения текущей ситуации.

Отметим статью [21], в которой изложены результаты наблюдения электронно-дырочной плазмы (ЭДП) в монослое  $\text{MoS}_2$ . Хотя в этой публикации не заявлялось о наблюдении ЭДЖ, были получены важные для дальнейшего исследования результаты. В частности, было продемонстрировано, что фотовозбуждение монослоя  $\text{MoS}_2$  приводит к переходу от прямой к непрямой энергетической щели, что способствует образованию ЭДЖ.

В работе [22] показано, что возрастание интенсивности непрерывного оптического возбуждения монослоя  $\text{MoS}_2$  в подщелевом режиме инициирует переход диэлектрического газа экситонов в металлическую ЭДП.

Была исследована высокотемпературная сильно-связанная ЭДЖ с  $T_c \simeq 500$  К в подвешенном монослое  $\text{MoS}_2$  [23]. Наблюдался фазовый переход первого рода газ-жидкость, характеризующийся критической плотностью и температурой. При одинаковом возбуждении ЭДЖ отличается от ЭДП большей плотностью носителей тока, а следовательно, и большей фотолюминесценцией. В эксперименте наблюдалось резкое скачкообразное увеличение фотолюминесценции, когда мощность накачки возрастала примерно до  $3 \text{ кВт/см}^2$ . Была продемонстрирована несжимаемость ЭДЖ: при дальнейшем возрастании мощности накачки площадь, занимаемая ЭДЖ, возрастала пропорционально числу рожденных  $e-h$ -пар, а плотность ЭДЖ сохранялась постоянной. В экспериментах наблюдалось возникновение люминесцентного кольца, обусловленного фо-

нонным ветром (см., например, обзор [18] и приведенные в нем ссылки).

В работе [24] при комнатной температуре была изучена ЭДЖ в ультратонких фотоячейках графен-тонкая (несколько монослоев) пленка  $\text{MoTe}_2$ -графен. Когда мощность возбуждающего лазера достигала  $P = 3$  мВт, плотность  $e-h$ -пар становилась настолько большой, что среднее расстояние между ними  $a_{xx} = 1-3$  нм было сопоставимо с боровским радиусом экситонов  $a_x = 2.3$  нм [25]. При этих условиях наблюдалась аннигиляция экситонов (переход диэлектрического экситонного газа в металлическую ЭДП). Затем при большем значении мощности лазера  $P_c = 6$  мВт ЭДП претерпевала переход газ-жидкость. Формирование 2D-капли ЭДЖ было доказано появлением характерной зависимости фототока от мощности возбуждающего лазера и динамикой фототока на пикосекундном масштабе. Подобное поведение наблюдалось при образовании капель ЭДЖ в традиционных полупроводниках (Si, Ge, GaAs и др.) при низких температурах [16, 17].

Теоретическая работа [26] посвящена расчету фазовой диаграммы ЭДЖ в подвешенном монослое  $\text{MoS}_2$ . Работа была мотивирована экспериментальными результатами, изложенными в статье [23]. Для расчета свойств ЭДЖ авторы работы [26] использовали потенциал, описывающий кулоновское взаимодействие носителей тока в пленках конечной толщины (потенциал Келдыша [27–29]), который хорошо себя зарекомендовал для объяснения значительного отклонения энергии нескольких первых экситонных уровней от ридберговской серии [6].

Согласно оценкам [26] переход металл-диэлектрик в  $\text{MoS}_2$  происходит в жидкой фазе при плотности выше критической для перехода газ-жидкость. Отметим, что ЭДП в ультратонкой пленке  $\text{MoTe}_2$  во многом подобна ЭДП в монослое  $\text{MoS}_2$ , поэтому вероятнее всего в обеих системах переход металл-диэлектрик предшествует переходу газ-жидкость.

По нашему мнению, такое качественное расхождение вызвано неоправданным использованием в расчетах ЭДЖ [26] потенциала Келдыша, что приводит к смещению критической точки в сторону меньших плотностей и температур. При расчете экситона и ЭДЖ главные вклады дают существенно различные диаграммы теории возмущений — соответственно лестничные и петлевые [30].

Влияние диэлектрического окружения, а также электронного легирования (когда плотности электронов и дырок не равны) на фазовую диаграмму ЭДЖ (переходы газ-жидкость и металл-диэлект-

рик) исследовались в работе [31] методом спектральных функций. Фазовая диаграмма ЭДЖ в легированных многодолинных полупроводниках рассматривалась ранее в работах [32–34].

В предыдущей нашей работе [30] было показано, что в монослойных гетероструктурах на основе ДПМ образование высокотемпературной сильносвязанной и сильносвязанной ЭДЖ обусловлено ослаблением экранирования кулоновского взаимодействия. Кулоновское взаимодействие носителей тока в монослойных пленках определяется полусуммой диэлектрических проницаемостей окружения (для образца на подложке это вакуум и подложка, а для подвешенного образца это вакуум). В обоих случаях эффективная диэлектрическая проницаемость существенно меньше, чем у пленок ДПМ. Вследствие этого образуется ЭДЖ с аномально большой энергией основного состояния  $|E_{EHL}|$ , составляющей доли электронвольт, и большой плотностью  $n_{EHL}$ . Например, для подвешенного монослоя  $\text{MoS}_2$  были получены экспериментальные значения  $|E_{EHL}| = 0.48$  эВ и  $n_{EHL} = 4 \cdot 10^{13}$  см $^{-2}$  [23].

Опираясь на свои предыдущие результаты, в настоящей статье мы исследуем фазовую диаграмму ЭДЖ в квазидвумерных гетероструктурах на основе ДПМ.

Возникновение ЭДЖ происходит путем фазового перехода первого рода, когда плотность носителей тока, свободных и/или связанных в экситоны, достигает некоторого зависящего от температуры критического значения  $n_G(T)$  плотности насыщенного пара [15]. При критической температуре  $T_c$  достигается критическая плотность  $e$ - $h$ -пар  $n_G(T_c) = n_c$ .

В настоящей работе мы исследуем переход металл-диэлектрик (переход Мотта), который происходит при плотности  $e$ - $h$ -пар  $n_{dm}(T)$ . Этот переход при увеличении плотности обычно предшествует переходу газ-жидкость ( $n_{dm}(T) < n_c$ ) и происходит в газовой фазе [15, 16].

Мы проведем поиск полупроводников, в пленках которых ЭДЖ будет характеризоваться наибольшей энергией связи и, следовательно, самой высокой критической температурой. Для этого мы рассмотрим модельные полупроводники с различным числом электронных и дырочных долин и неравными эффективными массами электронов и дырок.

## 2. МОДЕЛЬНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Мы описываем модельную квазидвумерную неравновесную  $e$ - $h$ -систему гамильтонианом [35, 36]

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}sk}^{\nu_e} \frac{1+\zeta}{2} \mathbf{p}^2 a_{\mathbf{p}sk}^\dagger a_{\mathbf{p}sk} + \sum_{\mathbf{p}sl}^{\nu_h} \frac{1-\zeta}{2} \mathbf{p}^2 b_{\mathbf{p}sl}^\dagger b_{\mathbf{p}sl} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{q}ss'} V(\mathbf{q}) \left\{ \sum_{kk'}^{\nu_e} a_{\mathbf{p}sk}^\dagger a_{\mathbf{p}'s'k'}^\dagger a_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}s'k'} a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}sk} + \sum_{ll'}^{\nu_h} b_{\mathbf{p}sl}^\dagger b_{\mathbf{p}'s'l'}^\dagger b_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}s'l'} b_{\mathbf{p}-\mathbf{q}sl} - 2 \sum_{kl}^{\nu_e\nu_h} a_{\mathbf{p}sk}^\dagger b_{\mathbf{p}'s'l}^\dagger b_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}s'l} a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}sk} \right\}. \quad (1)$$

Здесь  $a_{\mathbf{p}sk}$  ( $a_{\mathbf{p}sk}^\dagger$ ) и  $b_{\mathbf{p}sl}$  ( $b_{\mathbf{p}sl}^\dagger$ ) — фермиевские операторы уничтожения (рождения) электрона и дырки с квазиимпульсом  $\mathbf{p}$  и спином  $s$  соответственно в долинах  $k$  и  $l$ . Число электронных долин равно  $\nu_e$ , а число дырочных долин равно  $\nu_h$ . В общем случае  $\nu_e \neq \nu_h$ .

Нормировочная площадь слоя положена равной единице. Используется система единиц с постоянной Планка  $\hbar = 1$  и удвоенной приведенной массой  $2m = 1$  ( $m^{-1} = m_e^{-1} + m_h^{-1}$ ). В данной работе, наряду с отношением эффективных масс электрона и дырки  $\sigma = m_e/m_h$ , мы используем параметр  $\zeta = (1 - \sigma)/(1 + \sigma)$ .

В модельном гамильтониане (1) масса электрона (дырки) полагается одинаковой для всех долин и спиновых состояний. Следует отметить, что в монослоях ДПМ существует хотя и малая, но конечная разница в массах для верхней и нижней спиновых веток данной долины. Например, в расчетах, использующих теорию функционала плотности, для монослоя  $\text{MoS}_2$  получены эффективные массы электрона  $m_e^\uparrow = 0.520m_0$ ,  $m_e^\downarrow = 0.449m_0$  и дырки  $m_h^\uparrow = 0.537m_0$ ,  $m_h^\downarrow = 0.624m_0$  ( $\uparrow$  для спина вверх и  $\downarrow$  для спина вниз в точке  $K_+$ ;  $m_0$  — масса свободного электрона) [37]. Поскольку точность проводимых вычислений параметров ЭДЖ около 20 %, то учет такого небольшого различия в массах носителей тока привел бы лишь к более громоздким выражениям и едва заметному улучшению точности расчетов. При этом массы носителей тока, получаемые из экспериментальных данных, имеют значительную погрешность. Для монослоя  $\text{MoS}_2$   $m_e/m_0 = 0.67 \pm 0.08$  и  $m_h/m_0 = 0.6 \pm 0.08$  [38].

Отметим, что в монослоях ДПМ имеются также и непрямые оптические переходы с рождением электрона в долине  $\Lambda$ -точки (посередине отрезка  $\Gamma$ - $K$ ). Эта долина находится близко по энергии к долине  $K$ -точки. В частности, в  $\text{WSe}_2$  она лежит ниже примерно на 80 мэВ долины  $K$ -точки [39]. Однако эти переходы существенно более редкие, чем пря-

мые переходы в  $K$ -точке (необходимо участие фононов с большим волновым вектором около четверти зоны Бриллюэна). Поэтому число электронов в долине  $A$ -точки значительно меньше, чем в долине  $K$ -точки (вероятно, как минимум на два порядка). Учет электронов в долине  $A$ -точки был бы значительным превышением точности расчетов ЭДЖ, поэтому мы учитываем электроны только в долине  $K$ -точки.

В этой работе для учета взаимодействия в ЭДЖ мы используем обычный кулоновский 2D-потенциал  $V(\mathbf{q}) = 2\pi\tilde{e}^2/|\mathbf{q}|$ , а не потенциал Келдыша [26–30]

$$V(\mathbf{q}) = \frac{2\pi\tilde{e}^2}{|\mathbf{q}|(1+r_0|\mathbf{q}|)}, \quad (2)$$

где  $r_0 = d/2\delta$  — «длина экранирования»,  $d$  — толщина пленки,  $\delta = \varepsilon_{eff}/\varepsilon$ ,  $\varepsilon$  — диэлектрическая проницаемость материала пленки,  $\varepsilon_{eff} = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/2$  — эффективная диэлектрическая проницаемость сред, окружающих пленку (например,  $\varepsilon_1 = 1$  — диэлектрическая проницаемость вакуума,  $\varepsilon_2$  — диэлектрическая проницаемость подложки),  $\tilde{e}^2 = e^2/\varepsilon_{eff}$ . Применительно к системам с монослоями ДПМ величина  $r_0$  является подгоночным параметром, который был использован для расчета экситонов [6].

В предыдущей работе [30] мы рассчитали характеристики ЭДЖ с использованием обычного кулоновского 2D-потенциала и потенциала Келдыша в случае одинаковых кратностей вырождения электронов и дырок. Оказалось, что при помощи одного подгоночного параметра невозможно согласовать с экспериментальными обе рассчитываемые характеристики: энергию связи ЭДЖ и ее равновесную плотность. Следует отметить, что длина экранирования  $r_0$  очень мала (менее 1 Å) и потенциал Келдыша фактически совпадает с обычным потенциалом.

Мы уточнили свои расчеты энергии связи ЭДЖ в подвешенном монослое  $\text{MoS}_2$  с учетом разной кратности вырождения электронов  $g_e = 4$  (есть две долины и вырождение по спину) и дырок  $g_h = 2$  (есть две долины, но нет вырождения по спину в каждой долине). Для  $r_0 \approx 0.30$  Å энергия связи ЭДЖ совпадает с экспериментальной 480 мэВ [23], хотя расчетная равновесная плотность ЭДЖ  $2.4 \cdot 10^{13}$  см<sup>-2</sup> получается ниже экспериментальной. Дальнейший рост  $r_0$  приводит к уменьшению  $|E_{EHL}|$  и  $n_{EHL}$ . При  $r_0 \approx 0.66$  Å энергия связи ЭДЖ сравнивается с энергией связи экситона и при больших  $r_0$  ЭДЖ не образуется.

Расчет показал [40], что для экситона  $r_0 = 41.47$  Å. Такое расхождение может быть качест-

венно объяснено тем, что помимо различия в классе диаграмм [30] в  $r_0$  входят еще и разные диэлектрические проницаемости материала пленки: для экситона статическая  $\varepsilon_0$ , а для ЭДЖ высокочастотная  $\varepsilon_\infty$  [41]. Поскольку ДПМ являются полярными полупроводниками, в них может быть  $\varepsilon_0 \gg \varepsilon_\infty$ . В частности, для  $\text{MoS}_2$   $\varepsilon_0 = 14.29$  [40] и  $\varepsilon_\infty = 4.2$  [42].

При определении системы единиц также положим  $\tilde{e}^2 = 1$ . Тогда автоматически энергия связи и радиус 2D-экситона равны единице:  $E_x = 2me^4/\hbar^2 = 1$  и  $a_x = \hbar^2/2m\tilde{e}^2 = 1$ . Ниже подразумевается, что энергия и температура измеряются в  $E_x$ , а плотность  $e$ - $h$ -пар — в  $a_x^{-2}$ .

В двух следующих разделах мы сконцентрируемся на расчете энергии основного состояния ЭДЖ и ее термодинамике в монослое ДПМ, используя в том числе полученные ранее результаты для квазидвумерных систем [43–45].

### 3. ЭНЕРГИЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

Мы рассматриваем полупроводник, у которого число электронных и дырочных долин не обязательно равно. В дальнейшем без ограничения общности будем считать, что  $\nu_e \geq \nu_h$  (т.е. назовем носители тока с большим числом долин электронами). Импульсы  $q$  будем измерять в единицах  $q_F = q_F^e \leq q_F^h$ , где  $q_F^e$  и  $q_F^h$  — импульсы Ферми соответственно электронов и дырок,  $q_F^{e,h} = \sqrt{2\pi n/\nu_{e,h}}$ . Частоту  $\omega$  будем измерять в единицах  $q_F^2/2m$ . Мы вводим безразмерное расстояние между частицами  $r_s = \sqrt{\nu_e/\pi n}$ , где  $n$  — 2D-плотность носителей тока.

Здесь и далее мы полагаем, что и для электронов, и для дырок имеется вырождение по спину.

В ряде случаев спин-орбитальное расщепление валентной зоны в ДПМ весьма велико (например, в  $\text{MoS}_2$  оно равно 148 мэВ [26]), тогда вместо  $\nu_h$  следует использовать  $\nu_h/2$  (мы учитываем только верхние спиновые ветви валентной зоны).

При интенсивном фотовозбуждении пленки  $\text{MoTe}_2$  дырки стекаются в  $\Gamma$ -точку, поэтому  $\nu_h = 1$ , в то время как число электронных долин не меняется и  $\nu_e = 2$  [24].

Энергия основного состояния двумерной ЭДЖ, приходящаяся на одну  $e$ - $h$ -пару, равна [30, 35, 36]

$$E_{gs} = E_{kin} + E_{exch} + E_{corr}. \quad (3)$$

Первое слагаемое — кинетическая энергия ( $\varkappa = \nu_e/\nu_h$  и  $\varkappa \geq 1$ )

$$E_{kin} = \frac{1 + \varkappa\sigma}{1 + \sigma} r_s^{-2}. \quad (4)$$

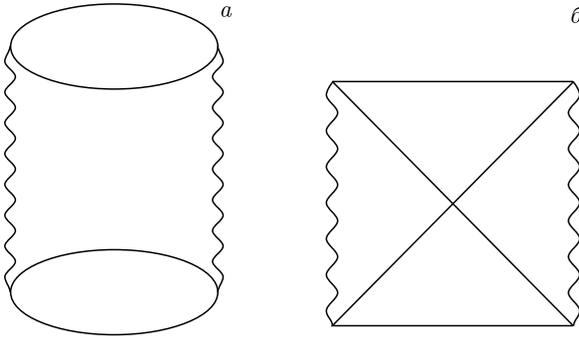


Рис. 1. Диаграммы второго порядка по взаимодействию, определяющие функцию  $I(q)$  при  $q \gg 1$ : а) прямая кольцевая диаграмма; б) обменная диаграмма

Второе слагаемое — обменная энергия

$$E_{exch} = -\frac{4\sqrt{2}}{3\pi} (1 + \sqrt{\varkappa}) r_s^{-1}. \quad (5)$$

Третье слагаемое — корреляционная энергия, которую представим в виде интеграла по передаваемому импульсу [30, 35, 36, 46, 47]

$$E_{corr} = \int_0^\infty I(q) dq. \quad (6)$$

При  $q \ll 1$  мы используем приближение хаотических фаз (ПХФ) [35, 36, 46, 47]. Функция  $I(q)$  при  $q \gg 1$  определяется суммой диаграмм второго порядка по взаимодействию (рис. 1). В промежуточной области функция  $I(q)$  аппроксимируется отрезком касательной [30, 35, 36].

Для произвольных значений  $\sigma$  и  $\varkappa$  разложение функции  $I(q)$  при малых  $q$  получается весьма громоздким. Для случая равных масс электрона и дырки ( $\sigma = 1$ ) и равного числа электронных и дырочных долин ( $\varkappa = 1$ ) оно приведено в нашей предыдущей работе [30].

Слагаемые в  $I(q)$  при  $q \ll 1$  с полуцелыми степенями  $q$  являются вкладом от 2D-плазмона:

$$\omega(q) = 2^{1/4}(\nu_e r_s q)^{1/2} + \frac{3}{2^{5/4}(\nu_e r_s)^{1/2}} \left( \frac{1}{\eta_e^3} + \frac{\varkappa}{\eta_h^3} \right) q^{3/2}. \quad (7)$$

Здесь  $\eta_e = m_e/m = 1 + \sigma$  и  $\eta_h = m_h/m = 1 + \sigma^{-1}$ .

Интересно отметить, что в отличие от трехмерного в двумерном случае существует также ветвь затухающих возбуждений

$$\omega_1(q) = \frac{2}{\eta_e} q - \frac{1}{\eta_e} q^2 + \frac{1}{\eta_e} \left( 1 + \frac{1}{\varkappa\sigma} \right)^2 q^3. \quad (8)$$

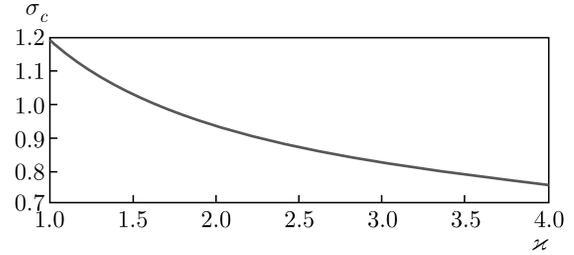


Рис. 2. (В цвете онлайн) Численный расчет  $\sigma_c(\varkappa)$

При выполнении неравенств

$$\begin{aligned} 1 + \varkappa\sigma &< \sigma\sqrt{\varkappa(1 + 2\varkappa\sigma)}, \\ 1 + \varkappa\sigma &> \frac{\sigma^2 \varkappa^{3/2}}{\sqrt{\sigma^2 \varkappa - 1}} \end{aligned} \quad (9)$$

возможны еще две ветви затухающих колебаний:

$$\begin{aligned} \omega_2(q) &= \frac{2(1 + \varkappa\sigma)}{\eta_e \sqrt{1 + 2\varkappa\sigma}} q - \frac{2\sqrt{2}\varkappa^3 \sigma^3 q^2}{\nu_e \eta_e^2 r_s (1 + 2\varkappa\sigma)^{3/2}} - \\ &- \frac{2(1 + \varkappa\sigma)}{\eta_e \sqrt{1 + 2\varkappa\sigma}} \left[ \frac{3\varkappa^6 \sigma^6}{\nu_e^2 \eta_e^2 r_s^2 (1 + 2\varkappa\sigma)^3} + \frac{1}{8} \right] q^3, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \omega_3(q) &= \frac{2\sqrt{\varkappa}}{\eta_h} q - \frac{1}{\eta_h} q^2 + \\ &+ \frac{1}{\eta_h \sqrt{\varkappa}} \left( 1 + \varkappa\sigma - \frac{\sigma^2 \varkappa^{3/2}}{\sqrt{\sigma^2 \varkappa - 1}} \right)^2 q^3. \end{aligned} \quad (11)$$

Мы предполагали, что реализуется наиболее частый случай  $\sigma\sqrt{\varkappa} > 1$  (для многих ДПМ  $\sigma = 0.73-1.12$  и при  $\nu_e \neq \nu_h$  отношение  $\varkappa \geq 2$ ).

Неравенства (9) выполняются при  $\sigma > \sigma_c(\varkappa)$ ,

$$\sigma_c(\varkappa) \approx \frac{1.032\varkappa^{3/4}}{\varkappa - 0.136}. \quad (12)$$

В частности,  $\sigma_c(2) = 0.931$ . График функции  $\sigma_c(\varkappa)$  представлен на рис. 2.

По-видимому, наличие дополнительных ветвей (8), (10), (11), которые отсутствуют в трехмерном случае, обеспечивает сильное связывание двумерной ЭДЖ.

Равновесная энергия ЭДЖ  $E_{EHL}$  является минимумом энергии основного состояния  $E_{gs}$

$$\left. \frac{\partial E_{gs}}{\partial n} \right|_{n_{EHL}} = 0, \quad E_{EHL} = E_{gs}(n_{EHL}),$$

где  $n_{EHL}$  — равновесная плотность ЭДЖ.

Уравнение для  $n_{EHL}$

$$\frac{1 + \varkappa\sigma}{1 + \sigma} \frac{\pi}{\nu_e} - \frac{2\sqrt{2}(1 + \sqrt{\varkappa})}{3\sqrt{\pi\nu_e n_{EHL}}} + \left. \frac{\partial E_{corr}}{\partial n} \right|_{n_{EHL}} = 0$$

очень громоздко и ради краткости мы его здесь не приводим. В случае равного числа электронных и дырочных долин для определения  $n_{EHL}$  и  $E_{EHL}$  можно использовать соответственно формулы (21) и (22) нашей работы [30].

#### 4. ТЕРМОДИНАМИКА МОНОСЛОЯ

Исходя из аналогии неравновесных носителей тока в полупроводниках с электронами и ионами в кристаллах, Келдыш высказал предположение [48], что при уменьшении температуры или увеличении плотности газа экситонов или экситонных молекул (биэкситонов) будет происходить сжижение этого газа в ЭДЖ — система будет претерпевать фазовый переход первого рода газ–жидкость. С конца 1960-х годов образование ЭДЖ наблюдалось во многих полупроводниках (см., например, [16–20] и приведенные там ссылки).

На плоскости  $(n, T)$  переходу газ–жидкость соответствует колокообразная кривая с критической точкой  $(n_c, T_c)$  в вершине. Эта кривая проходит через точки  $n = n_0$  и  $n = n_{EHL}$  при  $T = 0$ . Величина  $n_0$  определяется равенством  $|E_{EHL}| = E_x + E_D/2$ , где  $E_D$  — энергия диссоциации биэкситона [17]. Область левее ветви  $n_G$ , выходящей из точки  $(n_0, 0)$ , отвечает (би)экситонному диэлектрическому газу; правее ветви  $n_L$ , выходящей из точки  $(n_{EHL}, 0)$ , находится область ЭДЖ. Под «колоколом» находится неустойчивая область, в которой происходит расслоение на капли ЭДЖ с плотностью  $n_L$  и насыщенный пар экситонов или  $e$ - $h$ -пар с плотностью  $n_G$ .

Фазовая диаграмма также содержит вторую колокообразную кривую, которая соответствует экситонно-плазменному переходу (переходу металл–диэлектрик). Построение этой кривой при произвольных плотностях и температурах затруднительно и мы ограничимся лишь оценками в наиболее интересных областях. В классической области ( $T \gg E_F$ ,  $E_F$  — энергия Ферми  $e$ - $h$ -пар) эта кривая определяется реакцией образования экситона из свободных электрона и дырки. При повышении плотности при заданной температуре электроны и дырки связываются в экситоны. В квантовой области ( $T \ll E_F$ ) повышение плотности экситонов приводит к их диссоциации (происходит переход Мотта). Возможность перехода металл–диэлектрик в жидкой фазе обсуждалась в работах [49, 50].

В области  $T \sim E_x$  экситоны испытывают тепловую диссоциацию, поэтому переход экситонов в ЭДП существенно размывается и экситонные спек-

тры при подходе к  $n_c$  носят размытый (диффузный) характер [51]. Отметим, что в реальных гетероструктурах на основе монослоев ДПМ диссоциация экситонов происходит при заметно меньших температурах из-за энтропийного фактора [52].

Наиболее перспективными для наблюдения экситонно-плазменного перехода являются полупроводники, в которых из-за снятия вырождения зон уменьшается стабильность ЭДЖ и понижается  $T_c$ . Благодаря этому в таких полупроводниках при достаточно низких температурах можно реализовать близкие к  $n_c$  плотности экситонного газа. Например, в одноосно деформированном Ge было экспериментально обнаружено, что переход металл–диэлектрик происходит при  $r_s = 2 \pm 0.1$ . Это хорошо согласуется с оценкой  $r_s \approx 1.8$ , полученной при использовании диэлектрической экранировки экситонов [49].

Трехкомпонентная система (ЭДЖ, свободные экситоны и свободные носители тока) была рассмотрена в работах [53, 54].

Расчеты термодинамических свойств ЭДЖ в квазидвумерных системах были проведены ранее в работах [43–45]. Такие материалы, как монослои ДПМ и графен, являются 2D-кристаллами. Термодинамика  $e$ - $h$ -систем применима в равной степени как к квазидвумерным гетероструктурам, так и 2D-кристаллам. Однако для последних возникает сомнение в их устойчивости по отношению к колебаниям атомов поперек плоскости кристалла [55]. Кроме того, в процессе интенсивного фотовозбуждения может возникать локальный перегрев образца. Это может привести к локальной деформации кристаллической решетки и к плавлению 2D-кристалла [56–60]. Экспериментально наблюдаемая интенсивная фотолюминесценция позволяет сделать вывод о почти полном отсутствии дефектов в монослоях ДПМ. Безызлучательная рекомбинация носителей тока на дефектах привела бы к гашению люминесценции. Мы полагаем, что температура плавления существенно превышает критическую температуру перехода газ–жидкость  $T_c$ , а интенсивное фотовозбуждение 2D-кристалла может привести лишь к снятию долинного вырождения, которое наблюдалось, например, в ультратонкой пленке  $\text{MoTe}_2$  [24].

В рассматриваемых нами системах  $e$ - $h$ -пары в разных спиновых и долинных состояниях обладают различными временами жизни. Характерные для них времена релаксации лежат в пределах 10 фс [61], что значительно меньше времен их жизни. Поэтому мы предполагаем, что термодинамическое равновесие успевает установиться для всех носителей тока.

**Таблица 1.** Критическая точка перехода газ–жидкость и параметры двумерной ЭДЖ в монослоях ДПМ

$(\nu_e, \nu_h)$	(1, 1)	(2, 1)	(2, 2)	(4, 1)	(4, 4)
$n_c$	0.035	0.054	0.089	0.075	0.242
$T_c$	0.136	0.164	0.196	0.198	0.294
$n_{EHL}$	0.164	0.264	0.450	0.394	1.302
$ E_{EHL} $	1.090	1.340	1.661	1.606	2.545
$n_{EHL}/n_c$	4.686	4.889	5.056	5.253	5.379
$ E_{EHL} /T_c$	8.015	8.171	8.111	8.070	8.718

Химический потенциал ансамбля  $e$ – $h$ -пар в монослое ДПМ представим в виде [44, 45]

$$\mu(n, T) = T \ln \left[ \left( e^{\frac{2\pi n}{(1+\sigma)\nu_e T}} - 1 \right) \left( e^{\frac{2\pi n}{(1+\sigma)\nu_h T}} - 1 \right) \right] - \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{1}{\sqrt{\nu_e}} + \frac{1}{\sqrt{\nu_h}} \right) \sqrt{n} + \frac{\partial}{\partial n} (nE_{corr}). \quad (13)$$

Правая часть (13) представляет собой химический потенциал невзаимодействующих частиц  $\mu_{kin}$  (первое слагаемое) вместе с обменным  $\mu_{exch}$  и корреляционным  $\mu_{corr}$  вкладом (соответственно второе и третье слагаемые). Мы пренебрегли в (13) зависимостью  $\mu_{exch}$  и  $\mu_{corr}$  от температуры, поскольку температурные поправки к  $\mu_{exch}$  и  $\mu_{corr}$  взаимно сокращаются при  $T \ll E_F$ . Это находится в согласии с полученными ранее результатами для трехмерного случая [17, 62, 63].

Критическая точка  $(n_c, T_c)$  перехода газ–жидкость определяется двумя уравнениями:

$$\frac{\partial \mu}{\partial n} \Big|_{n=n_c, T=T_c} = \frac{\partial^2 \mu}{\partial n^2} \Big|_{n=n_c, T=T_c} = 0. \quad (14)$$

Для проверки наших методов исследования фазовой диаграммы ЭДЖ в монослоях ДПМ мы рассчитали характерное для перехода газ–жидкость вообще (см. примечание на с. 296 книги [64]) соотношение подобия  $T_c \simeq 0.1|E_{EHL}|$  [15], а также характерное для низкотемпературной ЭДЖ отношение критической плотности к равновесной  $n_c/n_{EHL} \simeq 0.2$  [17].

В табл. 1 приведены результаты численного решения уравнений (14) для  $\sigma = 1$ . Отметим, что для относительно небольшого числа долин отношение  $|E_{EHL}|/T_c$  почти не зависит от числа долин. Максимум этого отношения достигается при  $\nu_e = \nu_h = 4$ , что возможно для сплавов  $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_2$  с эквивалентными по энергии долинами  $\text{MoS}_2$  и  $\text{WS}_2$ .

Результаты численного расчета отношений  $n_{EHL}/n_c$  и  $|E_{EHL}|/T_c$  для различного числа долин представлены на рис. 3.

При  $\sigma = 1$  область  $\nu_e \approx \nu_h \gg 1$  (правый верхний угол на верхних панелях рис. 3) соответствует близким к максимальным  $n_{EHL}/n_c$  и  $|E_{EHL}|/T_c$ .

При  $\nu_e = 1, \nu_h \gtrsim 5$  или при  $\nu_h = 1, \nu_e \gtrsim 5$  отношение  $n_{EHL}/n_c$  близко к максимуму, а  $|E_{EHL}|/T_c$  стремится к минимуму. Это объясняется более быстрым нарастанием  $T_c$  по сравнению с  $|E_{EHL}|$  в этих областях.

При  $\sigma \neq 1$  (здесь взято  $\sigma = 0.8$ , см. нижнюю левую панель рис. 3) заметно изменяется  $n_{EHL}/n_c$ : минимум перемещается в область с большими  $\nu_e$  и малыми  $\nu_h$ ; максимумы остаются в области больших  $\nu_h$  и малых  $\nu_e$ ; при  $\nu_e \approx \nu_h \gg 1$  значения промежуточные. Интересно отметить, что подобной перестройки для более фундаментального отношения  $|E_{EHL}|/T_c$  не происходит – изменения возникают в основном в области  $\nu_e = 1, \nu_h \gtrsim 5$  (см. нижнюю правую панель рис. 3).

В пределе большого числа долин ( $\nu_e = \nu_h = \nu \rightarrow \infty$ ) корреляционная энергия в выражении (13) является степенной функцией плотности:

$$E_{corr} = -A(\sigma)n^\gamma. \quad (15)$$

Для 2D-систем показатель степени  $\gamma = 1/3$ . Функция  $A(\sigma)$  была нами определена в предыдущей нашей работе [30]. В частности,  $A(1) \approx 4.774$ .

В пределе  $\nu \rightarrow \infty$  можно пренебречь обменным вкладом как в энергию, так и в химический потенциал. При этом пара уравнений (14) сводится [15] к уравнению

$$z_c = (1 - \gamma) \times \frac{(\text{ch } z_c - \text{ch}(\zeta z_c)) (e^{z_c} - \text{ch}(\zeta z_c) - \zeta \text{sh}(\zeta z_c))}{(1 + \zeta^2) (\text{ch } z_c \text{ch}(\zeta z_c) - 1) - 2\zeta \text{sh } z_c \text{sh}(\zeta z_c)} \quad (16)$$

с неизвестным  $z_c = \pi n_c/\nu T_c$ . Здесь  $\zeta = (1 - \sigma)/(1 + \sigma)$ .

Критические параметры ЭДЖ выражаются через  $z_c$  формулами

$$n_c = \left[ \frac{\gamma(1 + \gamma)A\nu}{\pi} \times \frac{\text{ch } z_c - \text{ch}(\zeta z_c)}{e^{z_c} - \text{ch}(\zeta z_c) - \zeta \text{sh}(\zeta z_c)} \right]^{1/(1-\gamma)}, \quad (17)$$

$$T_c = \frac{\pi\nu^{\gamma/(1-\gamma)}}{z_c} \left[ \frac{\gamma(1 + \gamma)A}{\pi} \times \frac{\text{ch } z_c - \text{ch}(\zeta z_c)}{e^{z_c} - \text{ch}(\zeta z_c) - \zeta \text{sh}(\zeta z_c)} \right]^{1/(1-\gamma)}, \quad (18)$$

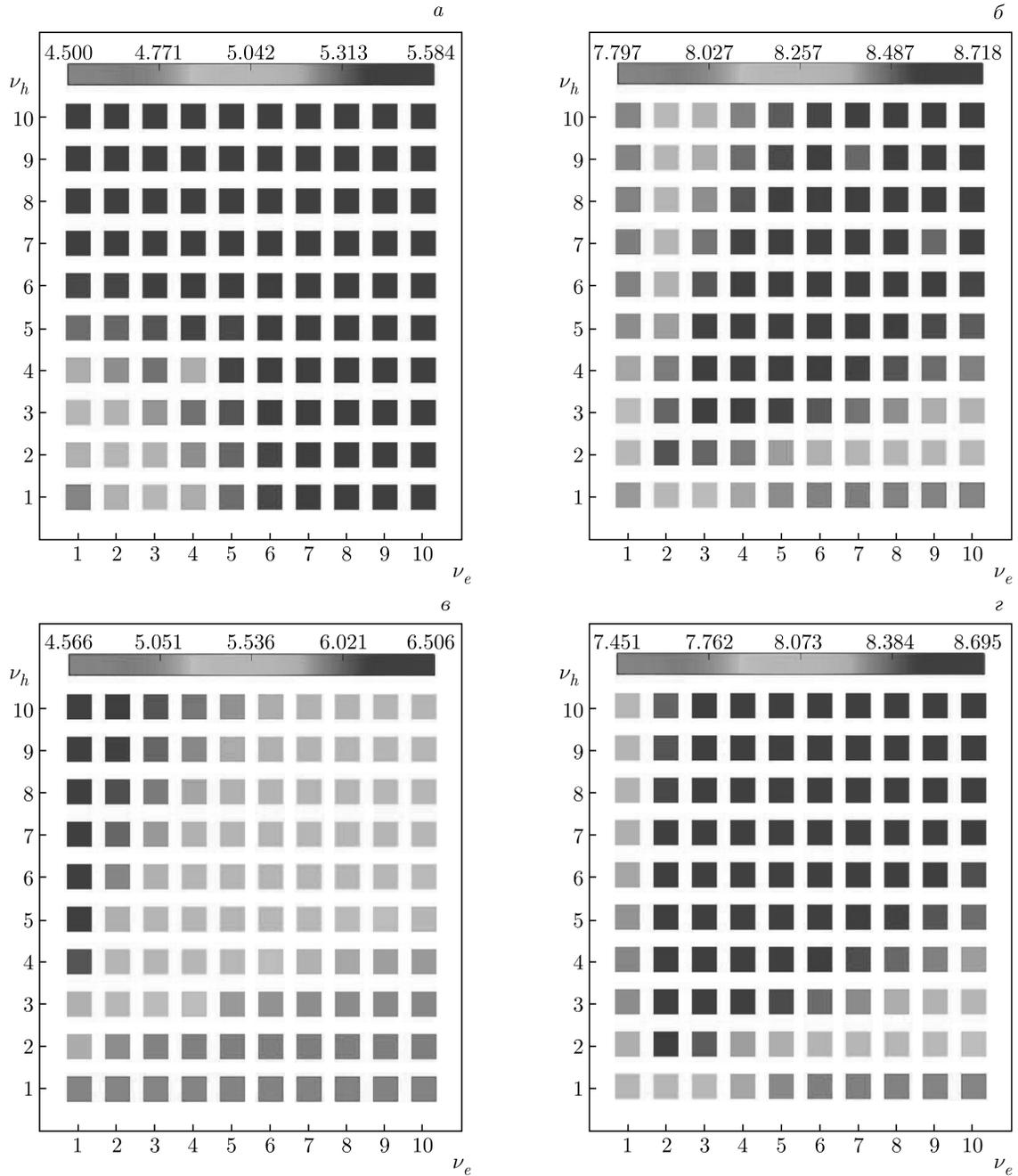


Рис. 3. (В цвете онлайн) Зависимость отношений  $n_{EHL}/n_c$  и  $|E_{EHL}|/T_c$  от числа электронных  $\nu_e$  и дырочных  $\nu_h$  долин: а –  $n_{EHL}/n_c$  при  $\sigma = 1$ ; б –  $|E_{EHL}|/T_c$  при  $\sigma = 1$ ; в –  $n_{EHL}/n_c$  при  $\sigma = 0.8$ ; г –  $|E_{EHL}|/T_c$  при  $\sigma = 0.8$

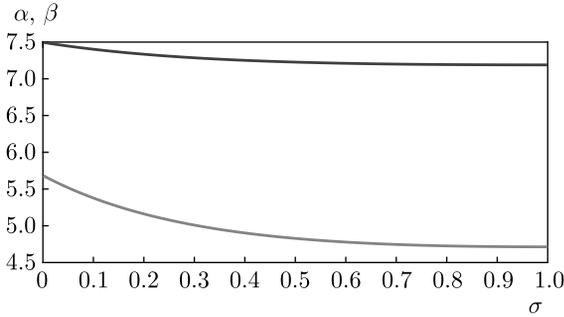
$$\mu_c = -T_c \left\{ \left( \frac{1}{\gamma} - 1 + \frac{1}{\gamma} \frac{\text{sh } z_c - \zeta \text{sh}(\zeta z_c)}{\text{ch } z_c - \text{ch}(\zeta z_c)} \right) z_c - \ln 2 - \ln(\text{ch } z_c - \text{ch}(\zeta z_c)) \right\}. \quad (19)$$

$$\frac{n_{EHL}}{n_c} = \left[ \frac{e^{z_c} - \text{ch}(\zeta z_c) - \zeta \text{sh}(\zeta z_c)}{(1 + \gamma)(\text{ch } z_c - \text{ch}(\zeta z_c))} \right]^{1/(1-\gamma)}, \quad (20)$$

$$\frac{|E_{EHL}|}{T_c} = \frac{1 - \gamma}{\gamma} z_c \left[ \frac{e^{z_c} - \text{ch}(\zeta z_c) - \zeta \text{sh}(\zeta z_c)}{(1 + \gamma)(\text{ch } z_c - \text{ch}(\zeta z_c))} \right]^{1/(1-\gamma)}, \quad (21)$$

Заметим, что в пределе  $\nu \rightarrow \infty$  отношения  $n_{EHL}/n_c$  и  $|E_{EHL}|/T_c$  не зависят от  $A$ :

и слабо зависят от  $\sigma$  (см. рис. 4).



**Рис. 4.** (В цвете онлайн) Численный расчет зависимости от  $\sigma$  отношений  $\alpha = n_{EHL}/n_c$  (красная кривая) и  $\beta = |E_{EHL}|/T_c$  (синяя кривая) при  $\nu \rightarrow \infty$

В частном случае  $\sigma = 1$  уравнение (16) значительно упрощается:

$$z_c = (1 - \gamma)(e^{z_c} - 1). \quad (22)$$

Для  $\gamma = 1/3$  оно имеет решение  $z_c = 0.7627$ , при этом  $n_{EHL}/n_c = 4.7133$  и  $|E_{EHL}|/T_c = 7.1896$ ,

$$n_c = \left[ \frac{\gamma(1 + \gamma)A\nu}{2\pi(1 - \gamma)} z_c e^{-z_c} \right]^{1/(1-\gamma)} \approx 0.077\nu^{3/2}, \quad (23)$$

$$T_c = \left( \frac{\nu z_c}{\pi} \right)^{\gamma/(1-\gamma)} \left[ \frac{\gamma(1 + \gamma)A}{2(1 - \gamma)} e^{-z_c} \right]^{1/(1-\gamma)} \approx 0.315\nu^{1/2}, \quad (24)$$

$$\mu_c = -2 \left\{ \frac{1 - \gamma}{\gamma} + \frac{z_c}{\gamma} - \ln \frac{z_c}{1 - \gamma} \right\} T_c \approx -8.307T_c. \quad (25)$$

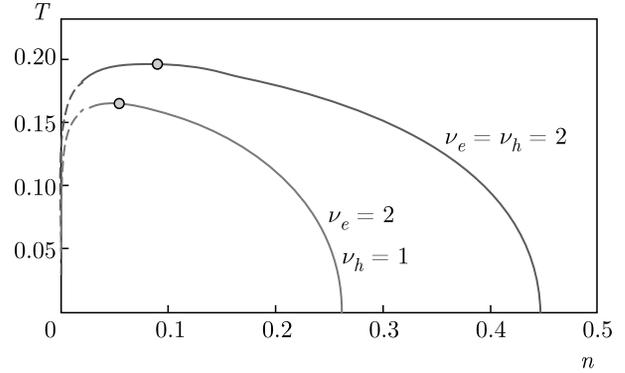
С хорошей точностью функция  $z_c(\sigma)$  получается разложением правой части (16) в ряд по  $z_c$  вплоть до членов третьего порядка:

$$z_c(\sigma) \approx \frac{3}{2(1 + \zeta^2)} \times \left[ \sqrt{1 + \frac{8\gamma}{3(1 - \gamma)}(1 + \zeta^2)} - 1 \right], \quad (26)$$

тогда

$$n_c \approx \left[ \frac{\gamma(1 - \gamma^2)A\nu}{2\pi} \left( 1 + \frac{1 + \zeta^2}{12} z_c^2 \right) \right]^{1/(1-\gamma)}, \quad (27)$$

$$T_c \approx \frac{\pi\nu^{\gamma/(1-\gamma)}}{z_c} \times \left[ \frac{\gamma(1 - \gamma^2)A}{2\pi} \left( 1 + \frac{1 + \zeta^2}{12} z_c^2 \right) \right]^{1/(1-\gamma)}, \quad (28)$$



**Рис. 5.** (В цвете онлайн) Численный расчет  $n_G(T)$  и  $n_L(T)$  для  $\nu_e = 2$  и  $\nu_h = 1$  (красная кривая) и  $\nu_e = \nu_h = 2$  (фиолетовая кривая) при  $\sigma = 1$ . Точками указаны критические точки перехода газ-жидкость. Штриховыми линиями выделены части кривых в области малых плотностей носителей тока, где ПХФ становится неприменимым

$$\mu_c \approx -T_c \left\{ \frac{2}{\gamma(1 - \gamma)} \left( 1 - \frac{1 + \zeta^2}{12} z_c^2 \right) - z_c - \ln \left[ (1 - \zeta^2) z_c^2 \left( 1 + \frac{1 + \zeta^2}{12} z_c^2 \right) \right] \right\}. \quad (29)$$

Для получения температурной зависимости плотности  $e$ - $h$ -пар в газовой  $n_G(T)$  и в жидкой  $n_L(T)$  фазах воспользуемся правилом Максвелла:

$$\int_{n_G}^{n_L} \mu(n, T) dn = \mu(T)(n_L - n_G), \quad (30)$$

где  $\mu(T) = \mu(n_G, T) = \mu(n_L, T)$ .

Набор пар точек  $n_G$  и  $n_L$  образует колоколообразную кривую на плоскости  $(n, T)$ . Две типичные кривые для монослоя ДПМ с  $\nu_e = 2$  и  $\nu_h = 1$  и  $\nu_e = \nu_h = 2$  в случае  $\sigma = 1$  представлены на рис. 5.

При  $\nu \gg 1$  находим с той же точностью, что и (26), температурные зависимости плотности  $e$ - $h$ -пар в газовой и в жидкой фазах и химического потенциала вблизи критической точки  $T_c - T \ll T_c$ :

$$n_c - n_G(T) = n_L(T) - n_c \approx \sqrt{\frac{6}{\gamma}} \left( 1 - \frac{1 + \zeta^2}{12\gamma} z_c^2 \right) n_c \left( \frac{T_c - T}{T_c} \right)^{1/2}, \quad (31)$$

$$\mu(T) - \mu_c = \left\{ 2 - \ln \left[ (1 - \zeta^2) z_c^2 \right] + \frac{1 + \zeta^2}{12} z_c^2 \right\} \times (T_c - T). \quad (32)$$

При низких температурах,  $T \ll T_c$ , плотность в газовой фазе экспоненциально мала:

$$n_G(T) \approx \frac{\nu T}{\pi\sqrt{1 - \zeta^2}} e^{-|\mu_0|/2T}, \quad (33)$$

где  $\mu_0 = \mu(n_{EHL}, T = 0) = E_{EHL}$ . В жидкой фазе она отклоняется от равновесной плотности ЭДЖ  $n_{EHL}$  квадратично по температуре:

$$n_L(T) = n_{EHL} \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{6(1-\zeta^2)} \left( \frac{1-\gamma}{2} \right)^{(1+\gamma)/(1-\gamma)} \times \right. \\ \left. \times (1+\gamma)^{2/(1-\gamma)} z_c^{2\gamma/(1-\gamma)} \left( 1 + \frac{1+\zeta^2}{6(1-\gamma)} z_c^2 \right) \times \right. \\ \left. \times \left( \frac{T}{T_c} \right)^2 \right\}. \quad (34)$$

Поправка к химическому потенциалу также квадратична по температуре:

$$\mu(T) = \mu_0 \left\{ 1 + \frac{\pi^2\gamma}{6(1-\zeta^2)} \left( \frac{1-\gamma}{2} \right)^{(1+\gamma)/(1-\gamma)} \times \right. \\ \left. \times (1+\gamma)^{2/(1-\gamma)} z_c^{2\gamma/(1-\gamma)} \left( 1 + \frac{1+\zeta^2}{6(1-\gamma)} z_c^2 \right) \times \right. \\ \left. \times \left( \frac{T}{T_c} \right)^2 \right\}. \quad (35)$$

Формулы (16)–(22) и (26)–(35) нами были выписаны для произвольного  $\gamma$  с той целью, что эти формулы нам понадобятся при рассмотрении трехмерных слоистых систем, когда  $\gamma = 1/4$ . Соответствующие формулы приведены в работе [15].

Монослой ДПМ, вообще говоря, представляет собой «трехслойную» систему, в которой между двумя слоями атомов халькогена вставлен слой атомов переходного металла. Поэтому может оказаться, что релевантное значение показателя степени в корреляционной энергии будет промежуточным между  $1/4$  и  $1/3$ .

В случае конечного числа долин можно подобрать эффективный показатель степени  $\gamma$  в выражении для корреляционной энергии (15), чтобы простые приближенные расчеты согласовались с точными. Для этого можно предложить два критерия: 1) по совпадению  $n_{EHL}/n_c$  с полученным из уравнения (20); 2) по совпадению  $|E_{EHL}|/T_c$  с полученным из уравнения (21).

Опираясь на данные табл. 1, для случая  $\sigma = 1$  мы провели расчеты эффективных значений  $\gamma$  по обоим критериям:  $\gamma_n$  по первому критерию,  $\gamma_T$  по второму (см. табл. 2).

Случай конечных  $\nu$  может сильно отличаться от предельного случая  $\nu \rightarrow \infty$ . В однодолинном полупроводнике, когда формула (15) для корреляционной энергии вряд ли работает,  $\gamma_n > 1/3$ . Совпадение  $\gamma_n$  и  $\gamma_T$  улучшается при увеличении числа долин.

**Таблица 2.** Значения эффективного показателя степени и константы в корреляционной энергии

$(\nu_e, \nu_h)$	(1, 1)	(2, 1)	(2, 2)	(4, 1)	(4, 4)
$\gamma_n$	0.341	0.320	0.305	0.291	0.281
$\gamma_T$	0.300	0.296	0.285	0.299	0.280
$A_n$	2.976	3.006	3.021	3.121	3.313
$A_T$	2.763	2.910	2.974	3.143	3.314

При  $\nu_e = \nu_h = 4$  число долин достаточно велико и  $\gamma_n \approx \gamma_T \approx 0.28$  и вопрос о выборе критерия несуществен. При этом эффективный показатель степени ближе к слоистому  $\gamma = 1/4$ , чем к  $1/3$ , что указывает на аналогию между многодолинными и многослойными системами.

В случае малого числа (одной или двух электронных (дырочных) долин) следует определиться с выбором критерия. Численные расчеты фазовых диаграмм для систем с  $\nu_e = 2, \nu_h = 1$  и  $\nu_e = \nu_h = 2$  с использованием выражения (15) продемонстрировали лучшее согласие с рассчитанными ранее кривыми (см. рис. 5) для эффективного показателя степени  $\gamma_T$ . Таким образом, по нашему мнению, второй критерий является более точным.

Полученные результаты для эффективного показателя степени  $\gamma$  могут быть использованы при расчете обменно-корреляционного вклада в методе функционала плотности [65–68].

### 5. ПЕРЕХОД МЕТАЛЛ–ДИЭЛЕКТРИК В МОНОСЛОЕ

Во Введении мы указали на качественное расхождение между теоретической работой [26] и экспериментом [24]. В эксперименте при увеличении возбуждения переход металл–диэлектрик предшествовал переходу газ–жидкость, т. е. переход металл–диэлектрик происходил в газовой фазе, а теоретические расчеты предсказывали, что этот переход происходит в жидкой фазе. Мы отметили, что указанное расхождение возникло из-за неоправданного использования потенциала Келдыша при вычислении энергии основного состояния ЭДЖ.

В качестве критерия возникновения перехода металл–диэлектрик в работе [26] было взято равенство  $|\delta E_g| = E_x$ , где  $\delta E_g$  – перенормировка запрещенной зоны,  $E_g = E_g^{(0)} + \delta E_g$  ( $E_g^{(0)}$  – затравочная величина запрещенной зоны),  $\delta E_g = \mu_{exch} + \mu_{corr}$ . Качест-

венно это соответствует «наползанию» дна зоны проводимости при увеличении плотности  $e$ - $h$ -пар на уровень экситона, если его положение считать неизменным. По нашему мнению такой критерий некорректен, потому что не учитывает экранировку кулоновского взаимодействия при большой плотности  $e$ - $h$ -пар. Мы «подходим» к переходу металл-диэлектрик со стороны низких плотностей. Перенормировкой запрещенной зоны в этой области плотностей можно пренебречь ввиду того, что в диэлектрической (экситонной) фазе плотность свободных  $e$ - $h$ -пар мала.

Мы используем в качестве критерия перехода металл-диэлектрик обращение в нуль энергии основного состояния (энергии связи) экситона

$$E_{exc}(n_{dm}) = 0. \quad (36)$$

Здесь  $n_{dm}$  — плотность этого перехода.

Для нахождения зависимости  $E_{exc}(n)$  мы решаем уравнение Шредингера вариационным методом в импульсном представлении

$$\frac{p^2}{2m}\psi(\mathbf{p}) - \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} V(\mathbf{q})\psi(\mathbf{q} - \mathbf{p}) = E_{exc}\psi(\mathbf{p}) \quad (37)$$

( $m$  — приведенная масса электрона и дырки).

Экранированный кулоновский потенциал при большой плотности  $e$ - $h$ -пар [44, 45, 69]

$$V(\mathbf{q}) = \frac{V_0(\mathbf{q})}{1 + f(\mathbf{q})V_0(\mathbf{q})\Pi_0(\mathbf{q})}, \quad (38)$$

где исходное неэкранированное кулоновское взаимодействие  $V_0(\mathbf{q})$  берется в виде потенциала Келдыша (2),  $\Pi_0(\mathbf{q})$  — статический двумерный поляризационный оператор электронов и дырок:

$$\Pi_0(\mathbf{q}) = \nu_e \Pi_0^e(\mathbf{q}) + \nu_h \Pi_0^h(\mathbf{q}), \quad (39)$$

$$\Pi_0^{e,h}(\mathbf{q}) = \frac{m_{e,h}}{\pi} \times \left\{ 1 - \sqrt{1 - \left(\frac{2q_F^{e,h}}{q}\right)^2} \theta\left(q - 2q_F^{e,h}\right) \right\}.$$

Здесь  $\theta(x)$  — функция Хевисайда,

$$\theta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ 1, & x > 0. \end{cases}$$

Поляризационный оператор берется в статическом пределе, поскольку нас интересует обращение в нуль энергии связи экситона.  $\Pi_0(\mathbf{q})$  отличается от

использованного в работах [44, 69] тем, что в выражении для  $\Pi_0(\mathbf{q})$  учтено наличие нескольких долин ( $\nu_e$  электронных и  $\nu_h$  дырочных).

Функция  $f(\mathbf{q})$  — поправка Хаббарда к ПХФ, учитывающая вклад обменных диаграмм при больших передаваемых импульсах [44, 69, 70]. В случае равного числа долин  $\nu_e = \nu_h = \nu \geq 1$

$$f(\mathbf{q}) = 1 - \frac{1}{4\nu} \frac{q}{q + q_F}. \quad (40)$$

Здесь учтено, что число обменных диаграмм растет линейно по  $\nu$ , в то время как число кольцевых диаграмм растет квадратично по  $\nu$ . Поэтому относительный вклад первых уменьшается как  $1/\nu$ .

В случае  $\nu_e \neq \nu_h$  импульсы Ферми электронов и дырок разные и удобно взять их среднее геометрическое  $\bar{q}_F = \sqrt{q_F^e q_F^h}$ , тогда

$$f(\mathbf{q}) = 1 - \frac{1}{2(\nu_e + \nu_h)} \frac{q}{q + \bar{q}_F}. \quad (41)$$

Пробная волновая функция выбирается в виде фурье-образа экспоненциально убывающей волновой функции двумерного экситона ( $a$  — вариационный параметр):

$$\psi(\mathbf{p}) = \frac{\sqrt{8\pi}a^2}{(a^2 + p^2)^{3/2}}. \quad (42)$$

Сначала мы проверили правильность вариационных расчетов на случае нулевой плотности носителей тока ( $n = 0$ ). В табл. 3 собраны расчетные и экспериментальные данные по энергии связи экситонов для восьми гетероструктур.

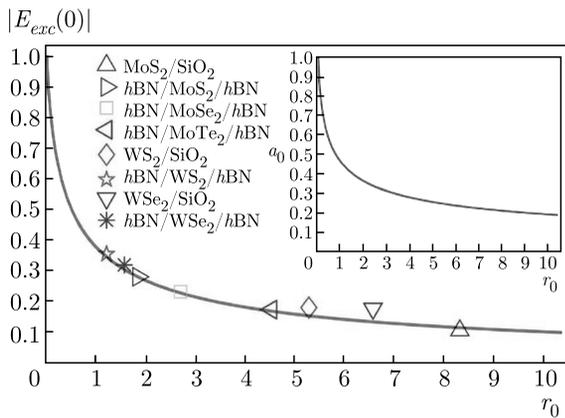
Для расчетов энергии связи экситона в монослое  $\text{MoS}_2$  на подложке  $\text{SiO}_2$  ( $\text{MoS}_2/\text{SiO}_2$ ) эффективные массы электрона и дырки были взяты из эксперимента [38]. Значение длины экранирования  $r_0$  бралось из теоретической работы [40]. Полученный нами результат сравнивался с экспериментальной энергией связи экситонов [71]. Близкое значение энергии связи (340 мэВ) было получено путем вариационного решения уравнения Шредингера в координатном пространстве [72].

Для монослоев ДПМ, инкапсулированных тонкими слоями гексагонального нитрида бора ( $h\text{BN}$ ), экспериментальные данные были взяты из работы [73].

Для  $\text{WS}_2$  и  $\text{WSe}_2$  на подложке  $\text{SiO}_2$  ( $\text{WS}_2/\text{SiO}_2$  и  $\text{WSe}_2/\text{SiO}_2$ ) расчетные параметры были взяты из работ [40, 74]. Экспериментальные энергии связи экситонов в  $\text{WS}_2/\text{SiO}_2$  и  $\text{WSe}_2/\text{SiO}_2$  были получены соответственно в работах [71] и [75].

**Таблица 3.** Параметры монослоев ДПМ, рассчитанные ( $|E_{exc}(0)|$ ) и экспериментальные ( $E_b$ ) энергии связи экситонов;  $m_0$  — масса свободного электрона

Гетероструктура	$m, m_0$	$r_0, \text{Å}$	$\epsilon_{eff}$	$ E_{exc}(0) , \text{мэВ}$	$E_b, \text{мэВ}$	Ссылки
MoS <sub>2</sub> /SiO <sub>2</sub>	0.320±0.04	16.926	2.45	336	310±40	[38, 40, 71]
hBN/MoS <sub>2</sub> /hBN	0.275±0.015	7.640	4.45	215	221±3	[73]
hBN/MoSe <sub>2</sub> /hBN	0.350±0.015	8.864	4.4	226	231±3	[73]
hBN/MoTe <sub>2</sub> /hBN	0.360±0.04	14.546	4.4	173	177±3	[73]
WS <sub>2</sub> /SiO <sub>2</sub>	0.220	15.464	2.45	310	360±60	[40, 71, 74]
hBN/WS <sub>2</sub> /hBN	0.175±0.007	7.816	4.35	175	180±3	[73]
WSe <sub>2</sub> /SiO <sub>2</sub>	0.230	18.414	2.45	283	370	[40, 74, 75]
hBN/WSe <sub>2</sub> /hBN	0.200±0.01	10	4.5	158	167±3	[73]



**Рис. 6.** (В цвете онлайн) Численный расчет зависимости энергии связи экситона при нулевой плотности носителей тока  $|E_{exc}(0)|$  от длины экранирования  $r_0$ . Выделены точки, соответствующие нескольким системам, которые были изучены в эксперименте. На вставке показана зависимость вариационного параметра  $a_0$ , отвечающего максимуму энергии связи, от  $r_0$

Для гетероструктур MoS<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> и WS<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> рассчитанные нами энергии связи попадают в интервал погрешностей экспериментальных величин. Для других гетероструктур также получилось хорошее соответствие расчетных значений с экспериментальными за исключением WSe<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>, для которой не был приведен интервал погрешностей [75]. Как следует из табл. 3, в целом достигнуто хорошее согласие наших расчетов с экспериментом.

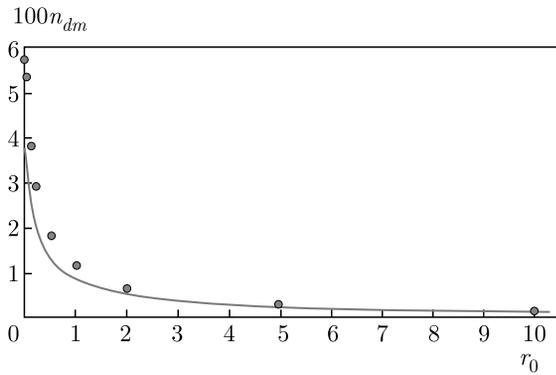
Мы также рассчитали зависимость энергии связи  $|E_{exc}(0)|$  от  $r_0$  (см. рис. 6). Следует отметить, что интервалы погрешностей для обезразмеренных экспериментальных значений энергии связи появились также по оси абсцисс, так как единица измерения  $a_x$ , на которую мы обезразмеривали  $r_0$ , имеет

погрешность, обусловленную неточностью в измерении эффективных масс носителей тока. В силу той же причины неточности в  $E_x$  также вносят дополнительную погрешность в обезразмеренную величину  $E_{exc}(0)$ . Экспериментальные точки для всех гетероструктур (кроме WSe<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>) с учетом погрешностей совпадают с расчетной кривой. Для гетероструктуры WSe<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> авторы работы [75], по-видимому, рассчитали энергию связи экситонов  $E_b$  для подвешенного образца в вакууме, что дало завышенное значение  $E_b$ .

Мы приходим к выводу, что описанный выше метод вариационного решения уравнения Шредингера применим к нахождению энергии связи экситонов при нулевой плотности  $e$ - $h$ -пар.

Нами были исследованы зависимости плотности перехода металл-диэлектрик  $n_{dm}$  при нулевой температуре от длины экранирования  $r_0$  для различных чисел электронных и дырочных долин и отношения масс носителей тока ( $\sigma = 0.8 \div 1.1$ ). Результирующие кривые  $n_{dm}(r_0)$  для различных  $\nu_{e,h}$  и  $\sigma$  оказались очень близкими. Мы сравнили результаты наших расчетов для  $\nu_e = \nu_h = 2$  с опубликованными в работе [69] для  $\nu_e = \nu_h = 1$  (см. рис. 7). В интересующей нас области  $1 \lesssim r_0 \lesssim 10$  значения  $n_{dm}$  также весьма близки к расчетной кривой. Это позволяет сделать вывод о слабой зависимости  $n_{dm}$  от  $\nu_e, \nu_h$  и  $\sigma$ .

Для вычисления зависимости энергии связи экситона от плотности  $e$ - $h$ -пар при  $T \neq 0$  нам понадобится поляризационный оператор при конечной температуре. После суммирования по дискретным мацубаровским частотам и аналитического продолжения на вещественные частоты находим его вещественную часть на нулевой частоте в виде



**Рис. 7.** (В цвете онлайн) Численный расчет зависимости плотности перехода металл–диэлектрик  $n_{dm}$  от  $r_0$  для системы с двумя электронными и двумя дырочными долинами и равными массами электронов и дырок. Точками нанесены значения  $n_{dm}$  из работы [69] для системы с одной электронной и одной дырочной долиной и равными массами электронов и дырок

$$\Pi_0(\mathbf{q}, T) = \nu_e \Pi_0^e(\mathbf{q}, T) + \nu_h \Pi_0^h(\mathbf{q}, T), \quad (43)$$

$$\Pi_0^\alpha(\mathbf{q}, T) = 2 \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{n_F^\alpha(\mathbf{k}) - n_F^\alpha(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\alpha - \varepsilon_{\mathbf{k}}^\alpha}, \quad (44)$$

где

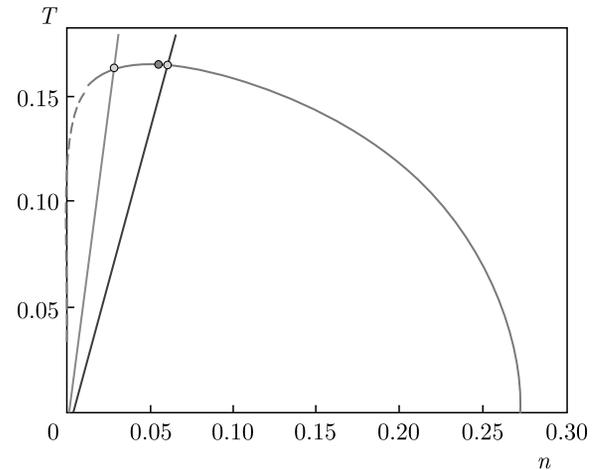
$$n_F^\alpha(\mathbf{p}) = 1 / [\exp((\varepsilon_{\mathbf{p}}^\alpha - \mu_{kin}^\alpha) / T) + 1]$$

— фермиевская функция распределения  $\alpha$ -го сорта частиц ( $\alpha = e, h$ ) с химическим потенциалом  $\mu_{kin}^\alpha$  (рассчитанного для газа невзаимодействующих частиц),

$$\varepsilon_{\mathbf{p}}^\alpha = p^2 / \eta_\alpha = \frac{1 \pm \zeta}{2} p^2$$

— закон дисперсии частиц  $\alpha$ -го сорта (плюс для электронов, минус для дырок). Черта у интеграла означает, что он взят в смысле главного значения.

Используя значения  $m$ ,  $r_0$  и  $\varepsilon_{eff}$ , приведенные в табл. 3, мы рассчитали температурные зависимости плотности перехода металл–диэлектрик  $n_{dm}(T)$  для гетероструктур  $\text{MoS}_2/\text{SiO}_2$  и  $h\text{BN}/\text{MoS}_2/h\text{BN}$  и сопоставили их с кривой перехода газ–жидкость на рис. 8. Точки пересечения кривых на фазовой диаграмме  $(n, T)$ : для первой гетероструктуры  $n_{dm} = 0.029$  ( $2.8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ ) при  $T_{dm} = 0.164$  (638 K) и для второй  $n_{dm} = 0.060$  ( $4.6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ ) при  $T_{dm} = 0.165$  (412 K). Критическая точка перехода газ–жидкость  $n_c = 0.055$  ( $5.5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$  и  $4.2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$  соответственно для первой и второй гетероструктур) и  $T_c = 0.165$  (644 K и 412 K соответственно для первой и второй гетероструктур) находится между ними. Следовательно, в  $\text{MoS}_2/\text{SiO}_2$  переход происходит в газовой фазе, а в  $h\text{BN}/\text{MoS}_2/h\text{BN}$  — в жидкой фазе.



**Рис. 8.** (В цвете онлайн) Температурные зависимости плотности перехода металл–диэлектрик  $n_{dm}(T)$  для гетероструктур  $\text{MoS}_2/\text{SiO}_2$  (зеленая кривая) и  $h\text{BN}/\text{MoS}_2/h\text{BN}$  (синяя кривая) и кривая перехода газ–жидкость (красная кривая). Бирюзовой точкой указана критическая точка. Желтыми точками указаны точки пересечения кривых  $n_{dm}(T)$  с кривой перехода газ–жидкость

Отметим, что величины  $n_c$  и  $n_{dm}$  для гетероструктуры  $h\text{BN}/\text{MoS}_2/h\text{BN}$  очень близки (отличие  $\lesssim 10\%$ ), и мы не можем строго утверждать, что переход происходит в жидкой фазе. Уточнение расчетов  $n_{dm}$  с использованием диэлектрической экранировки [50] заслуживает отдельного рассмотрения.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе мы рассчитали фазовую диаграмму ЭДЖ в монослойных гетероструктурах на основе ДПМ для произвольного отношения масс электрона и дырки и числа долин.

Мы продемонстрировали, что в многодолинном случае главный вклад в образование ЭДЖ дает корреляционная энергия. Расчет показал, что энергия связи и равновесная плотность ЭДЖ тем больше, чем больше число долин в ДПМ. Отметим, что при равном суммарном числе долин максимальные значения достигаются при одинаковом числе электронных и дырочных долин.

Мы показали, что соотношение между критической температурой перехода газ–жидкость и энергией связи ЭДЖ  $T_c \simeq 0.1 |E_{EHL}|$  выполняется с хорошей точностью для различных гетероструктур.

Разработанный нами метод позволил определить степенной закон зависимости корреляционной энергии от плотности  $E_{corr} = -An^\gamma$  и оценить показатель степени  $\gamma$ . Расчеты показали, что он ограничен значениями для трехмерного (слоистого или много-

долинного) и двумерного случаев,  $1/4 < \gamma < 1/3$ . Исключением являются однодолинные ДПМ, для которых степенной закон для корреляционной энергии неприменим ввиду отсутствия малого параметра.

Мы исследовали зависимость энергии связи экситона в монослойных гетероструктурах на основе ДПМ от их параметров и обнаружили хорошее согласие расчетных значений с экспериментальными.

Мы изучили переход металл–диэлектрик. В качестве критерия такого перехода мы использовали обращение в нуль при повышении плотности носителей тока энергии связи экситона. Соответствующая плотность  $n_{dm}$  слабо зависит от числа долин и отношения масс электрона и дырки.

Обычно переход металл–диэлектрик происходит в газовой фазе. Мы показали, что диэлектрическое окружение монослоя ДПМ может определять, в какой фазе (газовой или жидкой) происходит переход из диэлектрической в металлическую фазу. Примером такого поведения являются гетероструктуры на основе монослоя  $\text{MoS}_2$ . Если монослой находится на подложке  $\text{SiO}_2$ , то переход металл–диэлектрик происходит в газовой фазе, а если монослой инкапсулирован  $h\text{BN}$ , то переход, по-видимому, происходит в жидкой фазе. Следует отметить, что в инкапсулированном монослое точка перехода металл–диэлектрик очень близка к критической точке перехода газ–жидкость и полученные результаты не очень надежны и требуют уточнения.

По нашему мнению, наиболее интересными для исследования ЭДЖ и перехода металл–диэлектрик являются гетероструктуры, основанные на монослое  $\text{MoS}_2$ , свободно подвешенном или находящемся на подложке  $\text{SiO}_2$ , как обладающая максимальными  $|E_{EHL}|$  и  $n_{EHL}$ .

Интересно исследовать, как внешнее диэлектрическое окружение и электронное допирование влияет на переход металл–диэлектрик, и выяснить, в какой фазе (газовой или жидкой) он происходит.

**Финансирование.** П. В. Ратников благодарит за поддержку Фонд развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (грант № 20-1-3-68-1).

## ЛИТЕРАТУРА

1. П. В. Ратников, А. П. Силян, УФН **188**, 1249 (2018).
2. P. Miró, M. Audiffred, and T. Heine, Chem. Soc. Rev. **43**, 6537 (2014).
3. A. K. Geim and I. V. Grigorieva, Nature **499**, 419 (2013).
4. Л. Н. Булаевский, УФН **116**, 449 (1975).
5. Л. Н. Булаевский, УФН **120**, 259 (1976).
6. М. В. Дурнев, М. М. Глазов, УФН **188**, 913 (2018).
7. H. Zeng, J. Dai, W. Yao et al., Nature Nanotechnol. **7**, 490 (2012).
8. K. F. Mak, K. He, J. Shan, and T. F. Heinz, Nature Nanotechnol. **7**, 494 (2012).
9. D. Xiao, G.-B. Liu, W. Feng et al., Phys. Rev. Lett. **108**, 196802 (2012).
10. T. Cao, G. Wang, W. Han et al., Nature Commun. **3**, 887 (2012).
11. A. M. Jones, H. Yu, N. J. Ghimire et al., Nature Nanotechnol. **8**, 634 (2013).
12. Q. H. Wang, K. Kalantar-Zadeh, A. Kis et al., Nature Nanotechnol. **7**, 699 (2012).
13. K. F. Mak, K. L. McGill, J. Park, and P. L. McEuen, Science **344**, 1489 (2014).
14. K. F. Mak and J. Shan, Nature Photon. **10**, 216 (2016).
15. Е. А. Андриюшин, Л. В. Келдыш, А. П. Силян, ЖЭТФ **73**, 1163 (1977).
16. Т. Райс, Дж. Хенсел, Т. Филлипс, Г. Томас, *Электронно-дырочная жидкость в полупроводниках*, Мир, Москва (1980).
17. *Электронно-дырочные капли в полупроводниках*, под ред. К. Д. Джеффрис, Л. В. Келдыш, Наука, Москва (1988).
18. С. Г. Тиходеев, УФН **145**, 3 (1985).
19. Н. Н. Сибельдин, ЖЭТФ **149**, 678 (2016).
20. Н. Н. Сибельдин, УФН **187**, 1236 (2017).
21. A. W. Bataller, R. Younts, A. Rustagi et al., Nano Lett. **19**, 1104 (2019).
22. R. Younts, A. Bataller, H. Ardekani et al., Phys. Stat. Sol. B **256**, 1900223 (2019).
23. Y. Yu, A. W. Bataller, R. Younts et al., ACS Nano **13**, 10351 (2019).
24. T. B. Arp, D. Pleskot, V. Aji, and N. M. Gabor, Nature Photon. **13**, 245 (2019).
25. Y. Sun, J. Zhang, Z. Ma et al., Appl. Phys. Lett. **110**, 102102 (2017).
26. A. Rustagi and A. F. Kemper, Nano Lett. **18**, 455 (2018).

27. Н. С. Рыгова, Вестн. Моск. ун-та, сер. 3, Физ. Астрон. №3, 30 (1967).
28. А. В. Чаплик, М. В. Энтин, ЖЭТФ **61**, 2496 (1971).
29. Л. В. Келдыш, Письма в ЖЭТФ **29**, 716 (1979).
30. П. Л. Пех, П. В. Ратников, А. П. Силин, Письма в ЖЭТФ **111**, 80 (2020).
31. A. Steinhoff, M. Florian, M. Rösner et al., Nature Comm. **8**, 1166 (2017).
32. Е. А. Андриюшин, А. П. Силин, ФТТ **32**, 3010 (1990).
33. E. A. Andryushin and A. P. Silin, J. Moscow Phys. Soc. **1**, 57 (1991).
34. Е. А. Андриюшин, А. П. Силин, ФТТ **32**, 3579 (1990).
35. Е. А. Андриюшин, А. П. Силин, ФТТ **18**, 2130 (1976).
36. E. A. Andryushin and A. P. Silin, Solid State Comm. **20**, 453 (1976).
37. N. Zibouche, A. Kuc, J. Musfeldt, and T. Heine, Ann. Phys. **526**, 395 (2014).
38. Т. Екнапакул, P. D. C. King, M. Asakawa et al., Nano Lett. **14**, 1312 (2014).
39. C. Zhang, Y. Chen, A. Johnson et al., Nano Lett. **15**, 6494 (2015).
40. T. C. Berkelbach, M. S. Hybertsen, and D. R. Reichman, Phys. Rev. **88**, 045318 (2013).
41. Е. А. Андриюшин, А. П. Силин, ФТТ **21**, 839 (1979).
42. X. Yan, L. Zhu, Y. Zhou et al., Appl. Opt. **54**, 6732 (2015).
43. А. В. Ключник, Ю. Е. Лозовик, ФТТ **20**, 625 (1978).
44. Е. А. Андриюшин, А. П. Силин, ФТТ **21**, 219 (1979).
45. А. П. Силин, Труды ФИАН **188**, 11 (1988).
46. M. Combescot and P. Nozières, J. Phys. C **5**, 2369 (1972).
47. Е. А. Андриюшин, А. П. Силин, ФТТ **19**, 1405 (1977).
48. L. V. Keldysh, Proc. 9th Int. Conf. Phys. Semicond. Nauka L. (1968), p. 1307.
49. В. Е. Бисти, А. П. Силин, ФТТ **20**, 1850 (1978).
50. А. Н. Лобаев, А. П. Силин, ФТТ **26**, 2910 (1984).
51. И. В. Кукушкин, В. Д. Кулаковский, Т. Г. Тратас, В. Б. Тимофеев, ЖЭТФ **84**, 1145 (1983).
52. J. Zipfel, M. Kulig, R. Perea-Causin et al., Phys. Rev. B **101**, 115430 (2020).
53. Л. В. Келдыш, А. А. Маненков, В. А. Миляев, Г. Н. Михайлова, ЖЭТФ **66**, 2178 (1974).
54. В. Д. Санина, Труды ФИАН **161**, 3 (1985).
55. Ю. Е. Лозовик, С. П. Меркулова, А. А. Соколик, УФН **178**, 757 (2008).
56. В. Л. Березинский, ЖЭТФ **59**, 907 (1970).
57. В. Л. Березинский, ЖЭТФ **61**, 1144 (1971).
58. J. M. Kostelitz and D. J. Thouless, J. Phys. C **11**, 1181 (1973).
59. D. R. Nelson and B. I. Halperin, Phys. Rev. Lett. **41**, 121 (1978).
60. D. R. Nelson and B. I. Halperin, Phys. Rev. B **19**, 2457 (1979).
61. M. Danovich, I. L. Aleiner, N. D. Drummond, and V. I. Fal'ko, IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics **23**, 168 (2017).
62. G. A. Thomas, T. M. Rice, and J. C. Hensel, Phys. Rev. Lett. **33**, 219 (1974).
63. T. M. Rice, Nuovo Cimento **23B**, 226 (1974).
64. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, ч. 1, Наука, Москва (1995).
65. E. S. Kryachko and E. V. Ludeña, Phys. Rep. **544**, 123 (2014).
66. R. O. Jones, Rev. Mod. Phys. **87**, 897 (2015).
67. J.-L. Bretonnet, AIMS Mater. Sci. **4**, 1372 (2017).
68. *Density Functional Theory*, ed. by D. Glossman-Mitnik, IntechOpen, Zagreb (2019).
69. Е. А. Андриюшин, А. П. Силин, В. А. Санина, ФТТ **23**, 1200 (1981).
70. J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **243**, 336 (1957).
71. A. F. Rigosi, H. M. Hill, K. T. Rim et al., Phys. Rev. **94**, 075440 (2016).
72. P. V. Ratnikov, Phys. Rev. B **102**, 085303 (2020).
73. M. Goryca, J. Li, A. V. Stier et al., Nature Comm. **10**, 4172 (2019).
74. F. A. Rasmussen and K. S. Thygesen, J. Phys. Chem. C **119**, 13169 (2015).
75. K. He, N. Kumar, L. Zhao et al., Phys. Rev. Lett. **113**, 026803 (2014).

# О МЕХАНИЗМЕ ТУРБУЛЕНТНЫХ ТЕЧЕНИЙ СО СДВИГОМ. ТУРБУЛЕНТНЫЙ ПОГРАНИЧНЫЙ СЛОЙ

*В. П. Воротилин\**

*Институт прикладной механики Российской академии наук (ИПРИМ РАН)  
125040, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 4 мая 2021 г.,  
после переработки 4 июня 2021 г.  
Принята к публикации 10 июня 2021 г.

На основе представлений о механизме турбулентных течений как формирующим источник турбулентных вихрей на границах турбулентного потока, разработанных и описанных ранее для турбулентных струй [2] и турбулентных течений в каналах [3], проведен расчет параметров течения для турбулентного пограничного слоя, объединяющего особенности течений в струях и каналах. Дано описание механизма воздействия внешней турбулентности на параметры течения слоя. Предложено обобщение теории для течений с учетом градиента давления внешнего потока.

DOI: 10.31857/S0044451021100151

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Разнообразие вариантов и сложность картины течения в турбулентных пограничных слоях (далее сокращенно ТПС), их практическая важность, а также отсутствие ясного понимания действия механизма турбулентности в течениях подобного рода породили не иссякающий в течение десятилетий поток публикаций, посвященных решению проблемы ТПС. Однако, как отмечено в обзорной статье [1], остается множество трудно решаемых вопросов, касающихся как общего понимания механизма турбулентности, так и конкретных расчетов, в частности, расчетов ТПС. Тем не менее надежды, связанные с кажущейся возможностью решить проблему турбулентных течений, и нескончаемые попытки решения этой проблемы, обусловлены тем «простым» обстоятельством, что турбулентность как особый случай движения жидкости описывается уравнениями Навье–Стокса, и проблема видится только в поисках решений этих уравнений. При этом расчет поля скоростей всегда оставался основной целью теоретических моделей, поскольку как искомая переменная скорость входит в уравнения Рейнольдса (усредненные уравнения Навье–Стокса), являющиеся базовыми уравнениями для последующих модельных

методов описания турбулентных течений. Подобное понимание проблемы турбулентности и путей ее решения в существующих исследованиях отмечено в связи с альтернативным подходом к решению задач турбулентных течений, разработанным в [2, 3] для турбулентных струй и турбулентных течений в каналах и намеченным в данной работе при рассмотрении проблемы ТПС.

Суть предлагаемого подхода заключается в том, что действие физических механизмов турбулентности для турбулентных течений со сдвигом, т. е. для струй и течений в каналах, переносится из объема потока к его границам и характеризуется образующимися на его границах отрывными вихрями. Для турбулентных струй факт их существования позволил вывести выражение для скорости захвата внешней среды и написать замыкающее уравнение баланса массы турбулентной жидкости, а для течений в каналах описать эффективную шероховатость в законе сопротивления как средний объем отрывных застойных зон на единице поверхности стенки. Таким образом, решение самих уравнений для выяснения важнейших характеристик турбулентных течений теряет свою актуальность. Рассматриваемый вариант ТПС, имея своими границами твердую стенку и реально существующую внешнюю границу, отделяющую область турбулентного течения в слое от параллельного ламинарного потока внешней среды, объединяет упомянутые особенности течения в струях и каналах.

\* E-mail: VPVorotilin@yandex.ru

Что касается обзора существующих теоретических методов описания ТПС, то помимо разработок бесчисленных моделей, уточняющих детали профиля скорости у стенки ТПС, можно отметить одну их общую особенность, явно или неявно присутствующую всем исследованиям на эту тему и давшую один из поводов для постановки предлагаемой работы — это чисто формальное определение толщины пограничного слоя как расстояния от стенки вглубь потока, на котором скорость в пограничном слое отличается от скорости внешнего течения на некоторую малую величину (чаще всего на один процент). И таким образом исчезает факт реально существующей границы, разделяющей области ламинарного (внешнего) и турбулентного течений в ТПС, и, конечно, различие действующих в них физических механизмов движения: механизм турбулентной вязкости применяется ко всему пространству движения ТПС, включая область внешнего ламинарного течения.

## 2. О МЕХАНИЗМЕ ЗАХВАТА И ТУРБУЛИЗАЦИИ ВНЕШНЕЙ СРЕДЫ НА ГРАНИЦЕ ТПС

Важность понимания и формулировки условий на границе турбулентных течений с внешним ламинарным потоком в монографии [4] подчеркнута фразой: «Точный вид условий на границе с внутренней областью турбулентного течения, которым должно удовлетворять решение, до сих пор неизвестен». В данной работе для решения этой проблемы при описании ТПС используется разработанный в [3] механизм захвата внешней среды для турбулентных струй. Напомним логику и детали вывода используемых далее соотношений. Единственный, но актуальный до настоящего времени вопрос, связанный с фактом существования реальной границы, касался явления захвата (entrainment) внешней ламинарной среды. Первая попытка качественного объяснения механизма этого явления была основана на гипотезе существования вязкого надслоя на границе турбулентного слоя и внешней ламинарной среды толщиной масштаба минимальных турбулентных пульсаций  $\lambda_{min}$  [5], в котором завихрение и захват внешней среды по идее авторов происходит под действием сил молекулярной вязкости (viscous nibbling). Но при этом, поскольку движение турбулентной среды от молекулярной вязкости не зависит, по аналогии с объяснением механизма диссипации турбулентной энергии, утверждалось, что скорость захва-

та должна зависеть только от интенсивности крупномасштабных пульсаций внутри турбулентной области.

Мотивом для предлагаемого в данной работе и в работе для турбулентных струй [2] объяснения механизма захвата явился тот пробел гипотезы вязкого надслоя, что в основе ее допущений исключается обратное влияние скорости внешней среды на параметры движения ТПС. Но достаточно отметить, что, даже если в строгой постановке задачи использовать понятие турбулентной вязкости, то решение с условием  $u_x(x, y \rightarrow \infty) = u_\infty$ , где  $u_x$  — компонента скорости струи вдоль оси  $x$  системы прямоугольных координат  $(x, y)$ ,  $u_\infty$  — скорость параллельного внешнего течения, даст формальный результат, учитывающий влияние внешних условий. Исходя из того факта, что внешняя среда и ТПС — это две четко различимые жидкости, их динамическое взаимодействие можно представить как силу трения, действующую на разделяющей их границе. Поскольку при турбулентном движении молекулярная вязкость роли не играет, из соображений размерности следует, что эта сила может быть пропорциональна только квадрату некоторой комбинации скоростей движения внешней среды и ТПС:

$$F_{fr} = \gamma_1 \rho_\infty (u_s - u_\infty)^2,$$

где  $\gamma_1$  — константа (для турбулентных струй ее значение, подтверждаемое экспериментальными данными, было принято равным 0.1),  $\rho_\infty$  — плотность внешней среды,  $u_s$  — некоторая промежуточная скорость между  $u_\infty$  и средней скоростью струи  $\bar{u}$ . Из условия непрерывности потока импульса, перетекающего от внешней границы во внутреннюю область ТПС, эту же силу можно записать в виде

$$F_{fr} = \gamma_1 \rho (u_s - \bar{u})^2,$$

где  $\rho$  — средняя плотность ТПС, без объяснения возможной причины, но в интересах общности получаемых выражений, принимается не равной  $\rho_\infty$ . Из этих двух равенств для  $u_s$  и  $F_{fr}$  следуют выражения

$$u_s = \sigma \left( \bar{u} + (\rho_\infty/\rho)^{1/2} u_\infty \right), \quad F_{fr} = \gamma \rho_\infty (u_\infty - \bar{u})^2,$$

где введены величины

$$\sigma = \frac{1}{1 + (\rho_\infty/\rho)^{1/2}}, \quad \gamma = \gamma_1 \sigma^2.$$

Вывод о том, что закон трения квадратичен по скорости, означает, что обтекание возмущенной границы ТПС внешним потоком должно происходить

с образованием отрывных вихрей. По смыслу деления всей области течения на внешнюю безвихревую среду и собственно ТПС указанные отрывные вихри должны остаться в составе ТПС, играя для него роль источника турбулентности. Поэтому и импульс, при трении отдаваемый им ТПС, также должен возвратиться ТПС вместе с захваченными вихрями. От ТПС вихри получают импульс, пропорциональный разности скоростей  $\bar{u} - u_\infty$ . Отсюда, введя обозначение  $v_c$  для скорости захвата вихрей внешней среды, поток возвращаемого импульса (на единицу площади поверхности ТПС) запишем в виде

$$j = \rho_\infty v_c |\bar{u} - u_\infty|.$$

Из условия равенства потоков  $j$  и  $F_{fr}$  т. е.

$$\rho_\infty v_c |\bar{u} - u_\infty| - F_{fr} = 0, \quad (1)$$

находим

$$v_c = \gamma |\bar{u} - u_\infty|. \quad (2)$$

Общий характер полученных формул подчеркивает то обстоятельство, что никакие конкретные свойства турбулентных вихрей, особенности механизма их формирования на возмущенной границе ТПС в окончательном виде полученных соотношений ни в чем не проявляются. Под влиянием хаотических турбулентных пульсаций крупномасштабные вихри проникают во внутренние области течения в ТПС, дробятся на мелкие вихри, в конечном счете равномерно распределяясь по его всему поперечному сечению.

### 3. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ВЫВОД УРАВНЕНИЙ, ОПИСЫВАЮЩИХ ПРОЦЕСС РАЗВИТИЯ ТПС

Рассматривается простейший, и в то же время достаточно общий для выяснения основных закономерностей развития, вариант двумерного ТПС с текущей толщиной  $\delta$  на плоской поверхности с координатой  $x$  вдоль ТПС и началом отсчета  $x = 0$  в точке набегания внешнего потока со скоростью  $u_\infty$ , в интересах общности формулировки задачи, описываемой уравнением

$$\nabla P = -\rho_\infty u_\infty \frac{du_\infty}{dx}.$$

Поскольку, как было показано в работе [3], формирование профиля скорости при турбулентном режиме течения вторично по отношению к процессу переноса кинетической энергии потока к энергии турбулентных пульсаций, фактически происходящем в результате вихреобразования на границах

потока, распределения скоростей и плотности, не обедняя сути механизма турбулентности, задаются однородными по нормальному сечению потока. Уравнения баланса массы, импульса и позднее энергии получим, суммируя их потоки между нормальными к слою сечениями  $x$  и  $x + dx$ . Уравнением баланса массы фактически определяется скорость натекания внешней среды  $v_{y\infty}$  на ТПС по нормали к стенке:

$$v_{y\infty} \rho_\infty = \frac{d[(\rho \bar{u} - \rho_\infty u_\infty) \delta]}{dx}.$$

Уравнение баланса импульсов с учетом потока, вносимого скоростью  $v_{y\infty}$ , градиента давления  $\nabla P$  и силы трения на стенке  $\tau$  запишем в виде

$$\frac{d[\rho \bar{u} (u_\infty - \bar{u}) \delta]}{dx} + (\rho_\infty u_\infty - \rho \bar{u}) \delta \frac{du_\infty}{dx} - \tau = 0. \quad (3)$$

Величина  $\tau$  или скорость трения  $v_* = (\tau/\rho)^{1/2}$  для течений в каналах, а в нашем случае для ТПС, как для плоского течения Куэтта шириной  $\delta$ , определяется на основе логарифмического закона трения

$$\frac{\bar{u}}{v_*} = \frac{1}{\kappa} \ln \left( \frac{\delta}{K_{eff}} \right) + B, \quad (4)$$

где  $\kappa = 0.4$  и  $B$  — константы,  $K_{eff}$  — параметр эффективной шероховатости. В соответствии с результатами работы [3]  $K_{eff}$  определяется как толщина отрывных застойных зон на единицу площади поверхности стенки: для гладкой стенки  $K_{eff} = 1.1\nu/v_*$ ,  $\nu$  — коэффициент молекулярной вязкости,  $B = 1.75$ ; для песочной шероховатости  $K = 0.044r$ ,  $B = -3$ ,  $r$  — радиус песчинки. Замыкающим уравнением для искомых  $\bar{u}$  и  $\delta$  служит уравнение баланса массы «турбулентной» жидкости, в котором произведение  $\rho_\infty v_c$  играет роль источника ее массы на единицу площади поверхности ТПС:

$$\frac{d(\rho \bar{u} \delta)}{dx} = v_c \rho_\infty. \quad (5)$$

Отметим, что в литературе скорость натекания часто интерпретируют как скорость вовлечения внешней среды в объем ТПС, хотя по условиям течения знак  $v_{y\infty}$  может быть больше нуля (к струе) или меньше нуля (в сторону от струи). Кажущаяся картина натекания внешнего потока на область турбулентного течения связана с неучетом малых поправок к скорости внешнего течения при его вытеснении из области ТПС.

При проведении последующих оценок и расчетов полученные уравнения следует представить в безразмерном виде, используя для этого в качестве характерной скорости скорость набегания внешнего

потока в точке  $x = 0$   $u_\infty(x = 0) = u_0$ , плотности внешней среды  $\rho_\infty$ . Поскольку переменные длины  $x$  и толщины  $\delta$  входят в уравнения в виде дроби, вид безразмерной формы уравнений не изменится, если в них положить  $\rho_\infty = 1$ ,  $u_\infty = 1$  (при  $u_\infty = \text{const}$ ) при любом выборе параметра длины, в качестве которого из физических соображений взять начальную толщину слоя, при которой течение становится турбулентным,  $\delta_0 = \text{Re}_{kp} \nu / u_0$ , где  $\text{Re}_{kp} \cong 2000$ . Для удобства проведения расчетов вместо логарифма в формуле (4) (например, как и в [6]) используется степенная зависимость

$$\frac{\bar{u}}{v_*} = g \left( \frac{\delta}{K_{eff}} \right)^{1/7}$$

и выражение для  $\tau$  преобразуется к виду

$$\frac{\tau}{\rho} = \frac{A \bar{u}^\alpha}{\delta^\beta}, \tag{6}$$

где  $g = 6.6$ ,  $A = 0.0376 / \text{Re}_{kp}^\beta$ ,  $\alpha = 7/4$ ,  $\beta = 1/4$  для гладкой стенки и  $g = 6.4$ ,  $A = 0.01(r/h_0)^\beta$ ,  $\alpha = 2$ ,  $\beta = 2/7$  для песочной шероховатости.

#### 4. СРАВНЕНИЕ С СУЩЕСТВУЮЩИМИ МЕТОДИКАМИ РАСЧЕТА ТПС

Как было отмечено выше, в основе общепринятых подходов к решению проблемы ТПС лежит использование уравнений движения для расчета поля скоростей. Их различие только в способах приближенного решения и выборе эмпирических корреляций, описывающих механизм турбулентного переноса. Один из известных методов решения связан с рассмотрением интегрального уравнения Кармана

$$\frac{d\delta^{**}}{dx} + \frac{du_\infty}{dx} \frac{1}{u_\infty} (2\delta^{**} + \delta^*) = \frac{\tau}{u_\infty^2}, \tag{7}$$

где  $\delta^*$  и  $\delta^{**}$  — толщины соответственно вытеснения и потери импульса:

$$\delta^* = \int_0^\delta \left( 1 - \frac{u}{u_\infty} \right) dy, \quad \delta^{**} = \int_0^\delta \left( 1 - \frac{u}{u_\infty} \right) \frac{u}{u_\infty} dy,$$

верхний предел интегрирования  $\delta$  отмечает внешнюю границу пограничного слоя. Дальнейшее изложение для наглядности проведем на примере сравнения с решением, приведенным в [6]. Профиль скорости в зависимости от переменных  $y$  и  $x$  в виде комбинации  $y/\delta(x)$  задается степенной зависимостью:

$$\frac{u}{u_\infty} = \left( \frac{y}{\delta} \right)^{1/7}. \tag{8}$$

Выражение для  $\tau$  подобно формуле (6), но с заменой  $\bar{u}$  на  $u_\infty$ , т.е. с учетом записи в безразмерных переменных — на единицу. Отсюда для искомого  $\delta$  из уравнения (7) следует выражение

$$\delta = 0.37x^{4/5} \text{Re}_{kp}^{-2/5}. \tag{9}$$

Описанный вариант теории в целом отражает основные подходы и результаты существующих представлений о турбулентных течениях со сдвигом применительно к проблеме описания ТПС. Для оценки физического содержания этих теорий с позиции предлагаемого в данной работе понимания механизма турбулентности уравнение (7) перепишем в виде, близком по форме к уравнению (3):

$$\frac{d[p\bar{u}(u_\infty - \bar{u})\delta]}{dx} + \rho_\infty (u_\infty - \bar{u}) \delta \frac{du_\infty}{dx} + \frac{d(\Delta\delta\rho)}{dx} = \tau. \tag{10}$$

Здесь  $\Delta = \bar{u}^2 - \overline{u^2}$  и средние  $\bar{u}$  и  $\overline{u^2}$  определены как

$$\bar{u}\delta = \int_0^\delta u dy, \quad \overline{u^2}\delta = \int_0^\delta u^2 dy. \tag{11}$$

Для  $\bar{u}$ ,  $\overline{u^2}$  и комбинации  $\Delta$  с учетом аппроксимации (8) находим оценки

$$\bar{u} = (7/8)u_\infty, \quad \overline{u^2} = (7/9)u_\infty^2, \\ \Delta = (7/576)u_\infty^2 \approx 0.012u_\infty^2.$$

Видим, что решение уравнения (10) отличается от результатов предлагаемой теории вкладом малой добавки  $\Delta$ . Так, для  $\delta_{\Delta=0}$ , рассчитанного при  $\Delta = 0$ , получим значение  $\delta_{\Delta=0} = 0.91\delta$ . Отсюда можно утверждать, что уравнение импульсов классической теории практически совпадает с уравнением (3) с заранее заданными постоянными по сечению слоя значениями скоростей. Но если в предлагаемом подходе для искомого  $\bar{u}$  и  $\delta$  имеется второе уравнение — уравнение баланса массы турбулентной жидкости (5), то в традиционном варианте теории уравнение для  $\delta$  получают «сразу», подставляя распределение скоростей (8) в интегральное уравнение импульсов (7). Скрытый смысл подобной операции состоит в том, что средняя по сечению слоя скорость заранее определяется первым из интегралов (11) —  $\bar{u} = (7/8)u_\infty$ , и она постоянна на всем протяжении ТПС. И таким образом в уравнении (10), практически эквивалентном исходному уравнению (7), остается одна искомая переменная  $\delta$ . Аналогичный результат характерен для всех последующих моделей ТПС, задающих

распределение скоростей от независимых переменных  $x$  и  $y$ , следуя аналогии с ламинарным пограничным слоем, в виде комбинации  $u = f(y/\delta(x))u_\infty$ , например, в [7, 8]. Естественно, что усредненное по сечению слоя выражение для средней скорости всегда предстанет как некоторая часть скорости внешнего течения и в интегральном уравнении импульсов останется одна искомая  $\delta$ . При этом существующая проблема турбулизации и захвата внешней среды остается вне рамок решений теории. Подоплека данного результата в том, что запись скорости в виде формулы (7) подразумевает применение модели турбулентной вязкости ко всему пространству движения, без разделения области турбулентного течения в слое и внешнего ламинарного потока.

В качестве иллюстрации взаимосвязи физических механизмов захвата и переноса импульса в рамках предлагаемой теории может служить зависимость выражений искомого  $\delta$  и  $\bar{u}$  в уравнениях (3) и (5) от констант  $\gamma$  и  $A$  для пределов  $x \rightarrow 0$  и  $x \rightarrow \infty$ . Для гладкой стенки имеем

$$\bar{u} \left( \gamma^{5/8} / A^{1/2} \right) x^{1/8}, \quad \delta = \gamma^{3/8} A^{1/2} x^{7/8},$$

$$\tau = \gamma \text{ при } x \rightarrow 0;$$

$$1 - \bar{u} = 1.1(A^4/\gamma^5)^{1/9} x^{-1/9},$$

$$\delta = 1.2(A\gamma)^{4/9} x^{8/9}, \quad \tau = (A^8/\gamma)^{1/9} x^{-2/9} \text{ при } x \rightarrow \infty.$$

Аналогичные оценки с близкими значениями искомого параметров нетрудно получить и для шероховатой стенки. Отметим при этом, что ход зависимости  $\delta(x)$  при  $x \rightarrow \infty$  близок к подтверждаемой опытными данными полуэмпирической формуле (9) при всей несовместимости определяющих их вид действия физических механизмов.

### 5. УРАВНЕНИЕ БАЛАНСА КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ

Алгебраическую сумму входящих и выходящих потоков кинетической энергии между близкими сечениями  $x$  и  $x + dx$  плюс работу сил давления внешнего потока запишем в виде

$$\frac{1}{2} \left( \rho \frac{d[\bar{u}(u_\infty^2 - \bar{u}^2)]}{dx} + (\rho_\infty - \rho) \bar{u} \delta \frac{du_\infty^2}{dx} \right) = \varepsilon \delta,$$

где правая часть равенства при стандартном выводе уравнения энергии из уравнения Навье – Стокса есть скорость диссипации кинетической энергии. Чтобы

пояснить смысл параметра  $\varepsilon$  в рамках представлений предлагаемой теории, из левой части полученной формулы вычтем умноженное на  $\bar{u}$  уравнение импульсов (3). В результате несложных преобразований получим

$$\frac{1}{2} \rho (u_\infty^2 - \bar{u}^2) \frac{d[\bar{u}\delta]}{dx} + \tau \bar{u} = \varepsilon \delta.$$

С учетом уравнения захвата (5) и выражения для силы трения, действующей на границе слоя (1), уравнение энергии примет вид

$$\frac{1}{2} (u_\infty + \bar{u}) F_{fr} + \tau \bar{u} = \varepsilon \delta.$$

Физический смысл членов левой части данного уравнения — работа сил трения на границах слоя, результатом которой является преобразование части кинетической энергии потока в энергию образующихся турбулентных вихрей. Таким образом, параметр  $\varepsilon$  в противоположность существующим представлениям выражает скорость порождения энергии турбулентных вихрей (иначе турбулентных пульсаций). В классической теории механизм турбулентности и параметр диссипации энергии  $\varepsilon$  описываются на основе понятия и соотношений турбулентной вязкости. И в рамках предлагаемого подхода можно рассуждать о процессе диссипации турбулентной энергии, так как, скажем, в режиме стационарного процесса, сколько энергии будет произведено, столько же и будет диссипировано, но при этом без необходимости вводить какие-либо механизмы его реализации и, не затрагивая существа основных понятий и механизмов теории.

### 6. ОЦЕНКИ И РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ТЕОРИИ

При проведении качественных оценок и численных расчетов для варианта течения с постоянной скоростью внешнего потока уравнение импульсов (3) с учетом уравнения (5) и замены производной по  $x$  на производную по  $z = \bar{u}\delta$  удобно представить в виде

$$\frac{d[(1 - \bar{u})z]^2}{dz} = 2 \left( \frac{A}{\gamma} \right) \bar{u}^{\alpha+\beta} Z^{1-\beta}. \quad (12)$$

Константы  $A$  и  $\gamma$  в уравнениях (5), (10), (12) можно «спрятать» в масштабы переменных  $x$  и  $\delta$ , проведя их преобразование по схеме:  $\hat{x} = \lambda_x x$  и  $\hat{\delta} = \lambda_\delta \delta$ , где  $\lambda_\delta = (\gamma/A)^{1/\beta}$  и  $\lambda_x = \gamma \lambda_\delta$ .

Для пределов  $z \rightarrow 0$  и  $z \rightarrow \infty$  точное решение уравнения (12) имеет вид

$$\bar{u} = 1 / \left( 1 + z^{-1/8} \right),$$

и поэтому приближенно принимается справедливым для всей области изменения  $z$ . Подставив полученные выражения для  $\bar{u}$  и  $\delta = z/\bar{u}$  в формулы для силы трения  $F_{fr}$  на поверхности слоя и  $\tau$  на стенке, убеждаемся, что они совпадают:

$$F_{fr} \equiv \tau = \gamma \left( 1 + z^{1/8} \right)^{-2}.$$

Этот результат не вполне очевиден, так как при выводе уравнения баланса импульсов учитывались только конвективные потоки импульса, а  $\tau$  задавалась в виде общепринятой логарифмической зависимости и ее степенной аппроксимации (6), и он указывает на нетривиальный характер взаимодействия физических факторов, управляющих процессом развития ТПС.

Интегрируя (5), находим связь искомого  $\bar{u}$ ,  $\delta$  и  $\tau$  с координатой  $x$ :  $x = z + (8/9)z^{9/8}$ . В теории отсутствуют какие-либо эмпирические корреляции или подгоночные константы (по крайней мере, в приведенных зависимостях искомого переменных), и поэтому полученные соотношения могут представлять интерес для возможной экспериментальной проверки.

### 7. О МЕХАНИЗМЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ВНЕШНЕЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ НА ПАРАМЕТРЫ ТЕЧЕНИЯ ТПС

Влияние турбулентности на особенности течения жидких сред носит двойственный характер. С одной стороны, при турбулентном режиме течения в каналах и ТПС имеет место интенсивное перемешивание жидкой среды и существенно более высокие значения коэффициента трения, чем при ламинарном режиме. С другой стороны, при отрывном обтекании тел сила сопротивления трением существенно выше для ламинарного режима обтекания, чем при наличии внешней турбулентности (ВТ) потока [9]. О трудностях проведения экспериментального исследования действия механизма ВТ и интерпретации его результатов можно судить по недавно вышедшей работе [10]. В ней толщина ТПС задавалась формально по отмеченной в начале статьи общепринятой методике ее определения, и таким образом исключался такой важный фактор для понимания рассматриваемых процессов, как явление перемежаемости на границе ТПС, широко известное при описании турбулентных струй [11–13]. Поскольку в рамках предлагаемой теории взаимодей-

ствие ТПС с внешней средой представлено как механизм захвата внешней среды, влияние ВТ можно связать с оценкой ее воздействия на величину скорости захвата. Детали его теоретического описания выходят за рамки данного исследования, но поскольку вывод выражения для скорости захвата  $v_c$  получен при заданных  $\bar{u}$  и  $u_\infty$  и независимо от прочих условий внешнего течения, единственным результатом усредненного по времени воздействия ВТ может быть только величина константы  $\gamma$  в формуле для  $v_c$ . В окончательных преобразованиях теории эта константа скрыта в масштабах переменных  $\hat{x}$  и  $\hat{\delta}$ .

### 8. О МЕХАНИЗМЕ ТРЕНИЯ В ПОГРАНИЧНОМ СЛОЕ С ГРАДИЕНТОМ ДАВЛЕНИЯ

Ввиду отсутствия ясных представлений о механизме порождения турбулентных пульсаций в рамках существующей полумпирической теории турбулентных течений со сдвигом, постановка задачи, связанной с решением проблемы ТПС, но уже с градиентом давления, имеющей важное практическое значение, еще в большей степени сопровождается различного рода допущениями и эмпирическими корреляциями. При этом в любых вариантах существующих моделей основной целью остается расчет профиля скорости турбулентного потока, в частности, с наиболее популярным использованием гипотезы автомодельности скорости течения [6–8].

Сложность картины турбулентных течений при постановке какой-либо конкретной задачи неизбежно требует упрощений при описании важнейших с точки зрения предполагаемого механизма турбулентности параметров течения. В данной работе с достаточным обоснованием механизма турбулентности как процесса вихреобразования на его границах было принято упрощающее допущение об однородности профиля скорости по поперечному сечению потока. В преобразованном уравнении кинетической энергии потока зависимость от  $U_\infty(x)$  отсутствует. И неявно механизм возможного влияния внешнего течения может осуществляться лишь только косвенным путем через зависимость от параметра трения  $\tau$  на твердой границе слоя. Как отмечено в [7], турбулентное течение весьма чувствительно к кривизне средних линий тока. Эта особенность течения в диффузорах может служить причиной неустойчивости пристенного движения и возникновения отрывных турбулентных вихрей у стенок, наподобие того как это происходит на границе вязкого подслоя у стенки

при турбулентном течении в гладких каналах (но, конечно, до момента возникновения возвратных отрывных течений, рассмотренных, например, в монографии [9]). И так же, как для турбулентных течений в каналах с гладкими и шероховатыми стенками, количественная оценка роли этих вихрей в логарифмическом законе трения будет задаваться величиной эффективной шероховатости как средний объем отрывных застойных зон на единице площади поверхности стенки  $K_\infty$ , величину которого из соображений размерности можно представить в виде

$$K_\infty = -\gamma_\infty \delta^2 \frac{\partial u_\infty}{\partial x} \frac{1}{u_\infty},$$

где  $\gamma_\infty$  — константа, знак «минус» подчеркивает наблюдаемое явление неустойчивости при условии торможения внешнего течения. В том случае, когда  $\partial u_\infty / \partial x > 0$ , слагаемое  $K_\infty$  в общей сумме вкладов в величину  $K_{eff}$  будет давать отрицательный вклад, и влияние ускорения внешнего течения можно рассматривать как фактор стабилизации течения у стенок канала. Конечно, в этом случае вихри уже не образуются, но результат подавления вихреобразования из соображений универсальности применимости данной формулы можно рассматривать как вычитание из суммарного объема отрывных застойных зон, образуемых от шероховатости и возмущений вязкого подслоя.

## 9. ВЫВОДЫ

Подводя итог проведенного исследования проблемы ТПС, отметим некоторые из его результатов. В основу понимания и последующего описания механизма турбулентности были положены представления о процессе вихреобразования на границах турбулентного течения жидкой среды. Как результат динамического взаимодействия ТПС с внешним ламинарным потоком было получено выражение для скорости захвата (турбулизации) внешней среды. Это позволило написать уравнение баланса массы турбулентной жидкости (БМТ) и рассматривать толщину слоя как реальный физический объект исследования ТПС. Уравнение БМТ вместе с интегральным уравнением баланса импульсов составило пару уравнений для искомого средней по сечению потока скорости  $\bar{u}$  и толщины слоя  $\delta$  как функций координаты  $x$  вдоль потока при наличии множества независимых параметров, характеризующих общие условия развития ТПС, в частности, гладкой и шероховатой стенки, внешней турбулентности, различия плотности внешней среды и ТПС. В законе трения на твердой поверхности в соответ-

ствии с представлениями о процессе вихреобразования на границах потока величина эффективной шероховатости задавалась как средний объем отрывных застойных зон, образующихся за выступами шероховатых элементов и возмущений потока на границах ламинарного подслоя для гладких участков стенки, и, в частности, с учетом кривизны поверхности стенки при наличии внешнего градиента давления. Поскольку механизм переноса кинетической энергии потока к энергии турбулентных пульсаций в рамках предлагаемой теории целиком обусловлен процессом образования вихрей на границах потока, при выводе уравнений использовалось условие однородности профиля скорости по сечению потока, не обедняя при этом сути физических механизмов, определяющих процесс развития ТПС. Что же касается сравнения с экспериментальными данными, то помимо того, что выражения для силы трения  $\tau$  и толщины слоя  $\delta$  с точностью до произвольно варьируемых констант близки к значениям из приведенного в статье классического исследования [6], а также из других работ, например монографии [8], результаты представленной теории дают, скорее, повод для постановки новых экспериментов, связанных с описанием приведенного в статье механизма турбулентности.

Отметим, что в литературе экспериментальные и теоретические исследования гидродинамики на границе ламинарной и турбулентной областей течения в струях и ТПС и различные варианты объяснения механизма захвата и турбулизации внешней среды не прекращались, начиная с упомянутой ранее работы [5]. Обширный обзор этих работ вместе с результатами новых данных эксперимента и на их основе попытки обоснования гипотезы вязкого надслоя представлены в недавно вышедшей работе [14]. Не вдаваясь в детали рассуждения этой работы и множества упомянутых в ней других исследований, отметим их главное смысловое отличие от понимания механизма турбулентности данной работы. Суть его в том, что в этой и всех других работах процессы захвата и турбулизации внешней среды рассматриваются как следствие хаотических движений турбулентных структур в окрестности границы ТПС с внешним течением, результатом которых при их усреднении во времени получают экспериментально измеряемые данные. Иначе говоря, процесс захвата и турбулизации внешней среды вторичен по отношению к наблюдаемому хаосу турбулентных пульсаций, в то время как в предлагаемой теории механизм и скорость захвата рассматриваются как первичный источник этих пульсаций.

## ЛИТЕРАТУРА

1. I. Marusic, B. J. McKeon, P. A. Monkewitz, H. M. Nagib, A. J. Smits, and K. R. Sreenivasan, *Phys. Fluids* **22**, 065103 (2010).
2. В. П. Воротилин, *ЖЭТФ* **153**, 313 (2018).
3. В. П. Воротилин, *ЖЭТФ* **156**, 176 (2019).
4. *Турбулентность: принципы и применение*, под ред. У. Фроста, Т. Моулдена, Мир, Москва (1980).
5. S. Corrsin and A. L. Kistler, *Tech. Rep. TN — 1244.NACA* (1955).
6. Г. Шлихтинг, *Теория пограничного слоя*, Наука, Москва (1969).
7. A. A. Townsend, *The Structure of Turbulent Shear Flow*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1980).
8. Л. Г. Лойцянский, *Механика жидкости и газа*, Наука, Москва (1987).
9. П. Чжень, *Отрывные течения*, т. 1–3, Мир, Москва (1972).
10. Y. Jooss, L. Li, T. Bracchi, and R. J. Hearst, *J. Fluid Mech.* **911**, A4 (2021).
11. H. Fiedler and M. R. Head, *J. Fluid Mech.* **25**, 719 (1966).
12. L. S. G. Kovasznay, V. Kibens, and R. F. Blackwelder, *J. Fluid Mech.* **41**, 283 (1970).
13. R. A. Antonia, *J. Fluid Mech.* **56**, 1 (1972).
14. K. Chauhan, J. Philip, C. M. de Silva, N. Hutchins, and I. Marusic, *J. Fluid Mech.* **742**, 119 (2014).

# АСИММЕТРИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЛЕВОПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРИНО В НЕОДНОРОДНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

*А. Е. Лобанов\**, *А. В. Чухнова\*\**

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

Поступила в редакцию 11 мая 2021 г.,  
после переработки 5 июня 2021 г.  
Принята к публикации 7 июня 2021 г.

Исследуется эволюция нейтрино в неоднородном электромагнитном поле. На основании точных решений уравнения, которое описывает как флейворные осцилляции, так и поворот спина, получены вероятности спин-флейворных переходов нейтрино. Детально рассмотрен случай распространения нейтрино в поле точечного магнитного диполя. Для этого случая показано, что полная вероятность поворота спина зависит от угла между направлением скорости нейтрино и осью диполя. Из полученных результатов следует, что эффективное уменьшение потока левых нейтрино от астрофизического объекта с высоким магнитным полем или на финальной стадии коллапса сверхновой может быть вызвано поворотом спина как в области с высокой плотностью вещества, так и при дальнейшем распространении нейтрино в окружающем объект поле.

DOI: 10.31857/S0044451021100163

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Предложенная Понтекорво [1] идея осцилляций нейтрино существенно изменила наши представления о поведении фундаментальных частиц. На основе этой идеи была развита феноменологическая теория осцилляций, в которой флейворное состояние нейтрино описывается как суперпозиция массовых состояний. Эта теория позволяет рассматривать также и распространение нейтрино в фермионной среде с помощью эффективного потенциала, предложенного Вольфенштейном [2]. Важным следствием такого подхода явилось открытие эффекта резонансного поведения вероятностей флейворных переходов нейтрино при определенной плотности вещества, называемого эффектом Михеева – Смирнова – Вольфенштейна [3].

Однако обобщение феноменологического подхода, который использует эффективное уравнение типа уравнения Шредингера, на случай движущейся среды или наличия внешнего электромагнитного поля затруднено. Действительно, поскольку нейтрино — массивная частица, то в этом случае необходи-

мо учитывать не только флейворные осцилляции, но и эволюцию спина, для корректного описания которой необходимо использовать явно релятивистское уравнение. Если нейтрино распространяется вдоль направления магнитного поля или в неподвижной среде, то спиральность нейтрино не изменяется, и достаточно рассматривать осцилляции нейтрино с определенной спиральностью аналогично тому, как это делается при изучении распространения нейтрино в вакууме. Однако в общем случае наличие электромагнитного поля [4, 5], а также движущейся или поляризованной среды [6] (см. также [7]), приводит к изменению ориентации спина. При этом вследствие корреляций между осцилляциями нейтрино и поворотом спина эти процессы необходимо рассматривать одновременно, что может иметь важное значение для астрофизики [8–16]. В указанных работах исследовались особенности поведения нейтрино и был получен ряд интересных результатов, в том числе с использованием квантово-полевых методов. При этом, как и в феноменологической теории осцилляций, флейворное состояние нейтрино в этих работах рассматривалось как суперпозиция массовых. Альтернативный подход для описания осцилляций в рамках квантовой теории поля предложен в работе [17].

\* E-mail: lobanov@phys.msu.ru

\*\* E-mail: av.chukhnova@physics.msu.ru

Отметим, что исследование возможности построения флейворных состояний как суперпозиции массовых с точки зрения квантовой теории поля проводилось неоднократно (см., например, [18, 19]). Однако непротиворечивое квантовополевое описание суперпозиции состояний с различными массами сопряжено с существенными математическими сложностями [20]. В работах [21, 22] было показано, что эту проблему можно обойти, если работать в рамках модификации Стандартной модели, в которой фермионы с разными электрослабыми квантовыми числами объединены в мультиплеты. Такое описание позволяет построить пространство Фока для произвольной суперпозиции массовых состояний нейтрино и соответствующие операторы рождения и уничтожения, что дает возможность описывать осцилляции нейтрино в рамках  $S$ -матричного подхода. Поскольку волновое уравнение для мультиплета нейтрино в данном подходе становится 12-компонентным, в его решениях содержится информация как о флейворе, так и о поляризации нейтрино. Это уравнение может быть обобщено на случай взаимодействия нейтрино со средой и электромагнитным полем.

Именно такой подход был использован нами в работах [23, 24], в которых были получены и исследованы вероятности спин-флейворных переходов для нейтрино, взаимодействующего с движущейся средой постоянной плотности через нейтральные и заряженные токи или взаимодействующего с постоянным однородным электромагнитным полем. В [25] мы обобщили результаты, полученные в [24], на случай неоднородного магнитного поля и показали в адиабатическом приближении, что не только в плотной среде, но и в магнитном поле может иметь место резонансное поведение вероятности флейворного перехода. Этот резонанс в определенной степени аналогичен резонансу Михеева–Смирнова–Вольфенштена и обусловлен наличием у нейтрино переходных магнитных моментов.

В наших работах [23–25], как и в других статьях, посвященных исследованию спин-флейворных переходов в магнитном поле (см., например, [26, 27]), использовалось приближение двух флейворов. В этом приближении результаты получаются более наглядными. К сожалению, имеет место и другая причина — получить в модели трех флейворов явное аналитическое выражение для вероятностей переходов в общем случае не представляется возможным. Однако в некоторых частных случаях в реалистичной модели трех флейворов можно получить точные решения уравнения эволюции и соответствующие вероятности переходов даже в случае перемен-

ных характеристик внешнего поля. В настоящей работе в модели трех флейворов изучаются вероятности спин-флейворных переходов дираковских нейтрино в неоднородном магнитном поле. В качестве примера мы детально рассматриваем нейтрино в поле точечного диполя. Полученные результаты применяются для исследования возможного поведения спина нейтрино от астрофизических объектов, характеризующихся сильным магнитным полем.

## 2. ВЕРОЯТНОСТИ СПИН-ФЛЕЙВОРНЫХ ПЕРЕХОДОВ НЕЙТРИНО В НЕОДНОРОДНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В работах [23–25] эволюция нейтрино была исследована в квазиклассическом приближении, которое применимо для нейтрино ультрарелятивистских энергий  $\mathcal{E}_\nu$  и позволяет удерживать члены порядка  $m_\nu/\mathcal{E}_\nu$ . При таком рассмотрении 4-скорость нейтрино  $u^\mu$  можно считать постоянной. Действительно, в работе [22] показано, что существуют решения 12-компонентного уравнения Дирака в вакууме, такие что все массовые состояния распространяются с одной скоростью. В настоящей работе мы также ограничиваемся исследованием нейтрино в квазиклассическом приближении.

Квазиклассическое уравнение эволюции для нейтрино в электромагнитном поле имеет вид (см. [24])

$$\left( i \frac{d}{d\tau} \mathbb{I} - \mathbb{M} - \mu_0 \mathbb{M} \gamma^5 \gamma^\mu {}^* F_{\mu\nu} u^\nu - \mathbb{M}_h \gamma^5 \gamma^\mu {}^* F_{\mu\nu} u^\nu - \mathbb{M}_{ah} \gamma^5 \gamma^\mu F_{\mu\nu} u^\nu \right) \Psi(\tau) = 0, \quad (1)$$

где  $\tau$  — собственное время нейтрино, а  $\Psi(\tau)$  представляет собой 12-компонентную квазиклассическую волновую функцию нейтрино, которая удовлетворяет условию

$$\gamma^\mu u_\mu \Psi(\tau) = \Psi(\tau).$$

Собственное время связано с длиной пробега нейтрино  $L$  соотношением  $\tau = L/|\mathbf{u}|$ . В уравнении (1)  $\mathbb{I}$  — единичная матрица  $3 \times 3$ ,  $\mathbb{M}$  — массовая матрица нейтрино,

$${}^* F^{\mu\nu} = -\frac{1}{2} e^{\mu\nu\rho\lambda} F_{\rho\lambda}$$

— тензор, дуальный тензору электромагнитного поля  $F^{\mu\nu}$ . Взаимодействие с переходными магнитными и электрическими моментами нейтрино [5] (см.

также [28]) учитывается с помощью эрмитовых матриц  $M_h$  и  $M_{ah}$ . В первом и втором слагаемых уравнения (1) подразумевается домножение на единичную матрицу из алгебры матриц Дирака. Матрица  $\gamma^5$  здесь определена как  $\gamma^5 = -i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ .

В работах [24, 25] было показано, что влияние переходных моментов на эволюцию нейтрино существенно при энергиях, близких к энергии резонанса, которая для чисто магнитного поля определяется соотношением

$$\mu_0 |\mathbf{B}| \sqrt{(u_0)^2 - |\mathbf{u}|^2 \cos^2 \vartheta} \sim 1, \quad (2)$$

где  $u^\mu$  — 4-скорость нейтрино,  $\mathbf{B}$  — индукция магнитного поля,  $\vartheta$  — угол между скоростью нейтрино и направлением магнитного поля в лабораторной системе отсчета, а величина  $\mu_0$  является коэффициентом пропорциональности между диагональным магнитным моментом и массой нейтрино. В рамках Стандартной модели значение параметра  $\mu_0$  задается известным соотношением [4]

$$\mu_0 = \frac{3eG_F}{8\sqrt{2}\pi^2}, \quad (3)$$

а переходные моменты подавлены по сравнению с диагональными за счет GIM-механизма [29]. В настоящей работе мы пренебрегаем переходными моментами нейтрино, положив в уравнении (1)  $M_h$  и  $M_{ah}$  равными нулю. Таким образом, мы рассматриваем случай дорезонансных энергий нейтрино. Вычисление вероятностей переходов в квазиклассическом приближении мы будем проводить, используя оператор эволюции для уравнения (1), с помощью которого волновая функция записывается следующим образом:

$$\Psi(\tau) = \frac{1}{\sqrt{2u_0}} U(\tau) \Psi_0, \quad (4)$$

где  $\Psi_0$  постоянный 12-компонентный математический объект, который определяет начальное состояние нейтрино и может быть представлен в виде

$$\Psi_0 = \frac{1}{2} (1 - \gamma^5 \gamma_\mu s_0^\mu) (\gamma_\mu u^\mu + 1) (\psi^0 \otimes e_j), \quad (5)$$

$$\bar{\Psi}_0 \Psi_0 = 2.$$

Здесь  $\psi^0$  — постоянный биспинор,  $e_j$  — произвольный единичный вектор в трехмерном пространстве над полем комплексных чисел, а  $s_0^\mu$  представляет собой 4-вектор поляризации нейтрино, который удовлетворяет условию  $(u s_0) = 0$ .

В общем случае резольвента может быть записана как мультипликативный интеграл Вольтерра

(см., например, [30]), или, что фактически то же самое, с помощью T-экспоненты, однако в виде явного аналитического выражения ее можно представить только в нескольких частных случаях, один из которых будет рассмотрен далее. Поскольку мы пренебрегаем переходными моментами нейтрино, элементы матрицы смешивания в магнитном поле в рассматриваемом случае совпадают с их вакуумными значениями. Таким образом, волновая функция нейтрино является линейной комбинацией волновых функций массовых состояний. Это обстоятельство позволяет получить явное решение уравнения.

Если направление магнитного поля остается неизменным на траектории нейтрино, то при равенстве нулю переходных магнитных моментов для уравнения (1) существует спиновый интеграл движения  $\mathcal{S}$ :

$$\mathcal{S} = \gamma^5 \gamma^\mu {}^*F_{\mu\nu} u^\nu / N, \quad N = \sqrt{u_\mu {}^*F^{\mu\alpha} {}^*F_{\alpha\nu} u^\nu}. \quad (6)$$

Очевидно, что для нейтрино в чисто магнитном поле с индукцией  $\mathbf{B}$  величина  $N$  определяется выражением

$$N = |\mathbf{B}| \sqrt{u_0^2 - |\mathbf{u}|^2 \cos^2 \vartheta},$$

где  $\vartheta$  — угол между направлением движения нейтрино и вектором магнитной индукции в лабораторной системе отсчета. Оператор  $\mathcal{S}$  определяет проекцию спина нейтрино на направление магнитного поля в системе покоя нейтрино. Соответствующий этому интегралу движения 4-вектор поляризации нейтрино определяется как

$$\bar{s}^\mu = H^\mu / N, \quad H^\mu = {}^*F^{\mu\nu} u_\nu. \quad (7)$$

В этом случае мы получаем точное выражение для оператора эволюции в следующем виде:

$$U(\tau) = \frac{1}{2} \sum_{i=1,2,3} \sum_{\zeta=\pm 1} \exp \left( -im_i \int_0^\tau (1 - \zeta \mu_0 N(\tilde{\tau})) d\tilde{\tau} \right) \times (1 - \zeta \gamma^5 \gamma^\mu \bar{s}_\mu) \mathbb{P}^{(i)}, \quad (8)$$

где  $\mathbb{P}^{(i)}$  представляет собой проектор на состояние с определенной массой  $m_i$ . Суммирование по  $\zeta = \pm 1$  соответствует различным значениям проекции спина нейтрино на направление магнитного поля.

Пусть направление магнитного поля достаточно медленно меняется относительно направления скорости нейтрино, а именно скорость изменения направления поля удовлетворяет условиям [31]

$$\frac{\kappa}{2\mu_0 N} \ll 1, \quad \frac{\varkappa}{\kappa} \ll 1, \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned} \kappa &= \sqrt{H^2 \dot{H}^2 - (H \ddot{H})^2} / N^2, \\ \varkappa &= \frac{N}{H^2 \dot{H}^2 - (H \ddot{H})^2} e^{\alpha\beta\gamma\delta} \ddot{H}_\alpha \dot{H}_\beta H_\gamma u_\delta. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь точка обозначает дифференцирование по собственному времени. В этом случае оператор  $\mathcal{S}$  можно рассматривать как интеграл движения приближенно, и как резольвента (8), так и выражения для вероятностей переходов между состояниями с определенными флейвором и спиральностью, полученные на ее основе, остаются приближенно верными.

Для описания чистого состояния с определенным исходным флейвором  $\alpha$  и начальной спиральностью  $\zeta_\alpha$  ( $\zeta_\alpha = -1$  для левополяризованных нейтрино и  $\zeta_\alpha = 1$  для правополяризованных нейтрино) мы будем использовать квазиклассические спин-флейворные матрицы плотности чистых состояний (см. [23])

$$\begin{aligned} \rho_{(\alpha),\zeta_\alpha}(\tau) &= \frac{1}{4u^0} U(\tau) (\gamma^\mu u_\mu + 1) (1 - \zeta_\alpha \gamma^5 \gamma_\mu s_{sp}^\mu) \times \\ &\times \mathbb{P}_0^{(\alpha)} \bar{U}(\tau), \end{aligned} \quad (11)$$

где 4-вектор поляризации, соответствующий спиральному состоянию нейтрино, задается формулой

$$s_{sp}^\mu = \{|\mathbf{u}|, u^0 \mathbf{u}/|\mathbf{u}|\}.$$

В уравнении (11) проектор  $\mathbb{P}_0^{(\alpha)}$  определяет начальный флейвор нейтрино, а проектор  $(1 - \zeta_\alpha \gamma^5 \gamma_\mu s_{sp}^\mu)/2$  — начальную поляризацию нейтрино.

В соответствии с фундаментальными принципами квантовой механики вероятность перехода из состояния с флейвором  $\alpha$  и поляризацией  $\zeta_\alpha$  в состояние с флейвором  $\beta$  и поляризацией  $\zeta_\beta$  зависит от собственного времени  $\tau$  и составляет

$$W_{(\alpha),\zeta_\alpha \rightarrow (\beta),\zeta_\beta} = \text{Tr} \left\{ \rho_{(\alpha),\zeta_\alpha}(\tau) \rho_{(\beta),\zeta_\beta}^\dagger(\tau=0) \right\}. \quad (12)$$

Учитывая соотношение

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left\{ \mathbb{P}^{(k)} \mathbb{U}^\dagger \mathbb{P}^{(\alpha)} \mathbb{U} \mathbb{P}^{(l)} \mathbb{U}^\dagger \mathbb{P}^{(\beta)} \mathbb{U} \right\} &= \\ &= U_{\alpha k}^* U_{\alpha l} U_{\beta l}^* U_{\beta k}, \end{aligned} \quad (13)$$

где  $\mathbb{U}$  — матрица смешивания Понтекорво–Маки–Накагавы–Сакаты, мы получаем выражения

для вероятностей спин-флейворных переходов нейтрино:

$$\begin{aligned} W_{(\alpha),\zeta_\alpha \rightarrow (\beta),\zeta_\beta} &= \frac{1}{4} \sum_{k,l=1}^3 U_{\alpha k}^* U_{\alpha l} U_{\beta l}^* U_{\beta k} \times \\ &\times \sum_{\zeta,\zeta'=\pm 1} \exp(-i(m_k \tau - \zeta \Phi_k(\tau))) \times \\ &\times \exp(i(m_l \tau - \zeta' \Phi_l(\tau))) \times \\ &\times \left\{ \frac{1 + \zeta_\alpha \zeta_\beta}{2} (1 - \zeta_\alpha (\zeta + \zeta') (\bar{s}s_{sp}) + \zeta \zeta' (\bar{s}s_{sp})^2) + \right. \\ &\left. + \frac{1 - \zeta_\alpha \zeta_\beta}{2} \zeta \zeta' (1 - (\bar{s}s_{sp})^2) \right\}, \end{aligned} \quad (14)$$

где

$$\Phi_k(\tau) = m_k \mu_0 \int_0^\tau N d\tau. \quad (15)$$

Для удобства записи вероятностей переходов далее мы используем обозначения

$$\Delta \Phi_{kl} = \Phi_k(\tau) - \Phi_l(\tau), \quad \Delta m_{kl} = m_k - m_l. \quad (16)$$

Суммирование по индексам  $\zeta, \zeta'$  приводит к следующим соотношениям. Вероятность перехода нейтрино из состояния с флейвором  $\alpha$  и поляризацией  $\zeta_\alpha$  в состояние с флейвором  $\beta$  без изменения спиральности определяется формулой

$$\begin{aligned} W_{(\alpha),\zeta_\alpha \rightarrow (\beta),\zeta_\beta=\zeta_\alpha} &= \\ &= \sum_{k=1}^3 |U_{\alpha k}|^2 |U_{\beta k}|^2 (\cos^2 \Phi_k(\tau) + (\bar{s}s_{sp})^2 \sin^2 \Phi_k(\tau)) + \\ &+ \sum_{k>l}^3 R_{\alpha\beta kl} \left\{ \frac{1}{2} (1 - \zeta_\alpha (\bar{s}s_{sp}))^2 \cos(\tau \Delta m_{kl} - \Delta \Phi_{kl}) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} (1 + \zeta_\alpha (\bar{s}s_{sp}))^2 \cos(\tau \Delta m_{kl} + \Delta \Phi_{kl}) + \right. \\ &\quad \left. + (1 - (\bar{s}s_{sp})^2) \cos(\tau \Delta m_{kl}) \cos(\Phi_k(\tau) + \Phi_l(\tau)) \right\} + \\ &+ \sum_{k>l}^3 I_{\alpha\beta kl} \left\{ \frac{1}{2} (1 - \zeta_\alpha (\bar{s}s_{sp}))^2 \sin(\tau \Delta m_{kl} - \Delta \Phi_{kl}) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} (1 + \zeta_\alpha (\bar{s}s_{sp}))^2 \sin(\tau \Delta m_{kl} + \Delta \Phi_{kl}) + \right. \\ &\quad \left. + (1 - (\bar{s}s_{sp})^2) \sin(\tau \Delta m_{kl}) \times \right. \\ &\quad \left. \times \cos(\Phi_k(\tau) + \Phi_l(\tau)) \right\}. \end{aligned} \quad (17)$$

Вероятность перехода с изменением спиральности определяется выражением

$$\begin{aligned}
 W_{(\alpha),\zeta_\alpha \rightarrow (\beta),\zeta_\beta \neq \zeta_\alpha} &= \sum_{k=1}^3 |U_{\alpha k}|^2 |U_{\beta k}|^2 \times \\
 &\times (1 - (\bar{s}s_{sp})^2) \sin^2 \Phi_k(\tau) + \\
 &+ \sum_{k>l}^3 R_{\alpha\beta kl} \left\{ \frac{1}{2} (1 - (\bar{s}s_{sp})^2) \cos(\tau\Delta m_{kl} - \Delta\Phi_{kl}) + \right. \\
 &+ \frac{1}{2} (1 - (\bar{s}s_{sp})^2) \cos(\tau\Delta m_{kl} + \Delta\Phi_{kl}) - \\
 &- (1 - (\bar{s}s_{sp})^2) \cos(\tau\Delta m_{kl}) \cos(\Phi_k(\tau) + \Phi_l(\tau)) \left. \right\} + \\
 &+ \sum_{k>l}^3 I_{\alpha\beta kl} \left\{ \frac{1}{2} (1 - (\bar{s}s_{sp})^2) \sin(\tau\Delta m_{kl} - \Delta\Phi_{kl}) + \right. \\
 &+ \frac{1}{2} (1 - (\bar{s}s_{sp})^2) \sin(\tau\Delta m_{kl} + \Delta\Phi_{kl}) - \\
 &- (1 - (\bar{s}s_{sp})^2) \sin(\tau\Delta m_{kl}) \times \\
 &\quad \left. \times \cos(\Phi_k(\tau) + \Phi_l(\tau)) \right\}. \quad (18)
 \end{aligned}$$

В формулах (17), (18) использованы обозначения:

$$\begin{aligned}
 R_{\alpha\beta kl} &\equiv \text{Re } U_{\alpha k}^* U_{\alpha l} U_{\beta l}^* U_{\beta k}, \\
 I_{\alpha\beta kl} &\equiv \text{Im } U_{\alpha k}^* U_{\alpha l} U_{\beta l}^* U_{\beta k}.
 \end{aligned} \quad (19)$$

Естественно, в модели двух флейворов, когда матрица смешивания приобретает вид

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (20)$$

формулы (17), (18) согласуются с полученными ранее при исследовании поведения нейтрино как в постоянном однородном [24] (см. также [26,27]), так и в слабоменяющемся поле [25]. Следует отметить, что если пренебречь влиянием поля, т. е. положить  $N = 0$ , то полученные соотношения переходят в стандартные выражения для осцилляций нейтрино в вакууме (см., например, [32]), полученные в рамках феноменологического подхода. Очевидно, что в вакууме переходы с переворотом спина отсутствуют.

Величины полей, необходимые для сколько-нибудь значимого проявления эффекта поворота спина нейтрино, очень велики. Детальные оценки эффекта в случае величины магнитного момента нейтрино, определяемого Стандартной моделью, даны в [24]. Однако даже если использовать экспериментальное ограничение на величину магнитного момента  $\mu_\nu < 2.7 \cdot 10^{-11} \mu_B$  [33, 34], ясно, что поля,

которые можно получить в земных условиях, явно недостаточны для наблюдения указанного эффекта. Поэтому имеет смысл рассматривать только удаленные источники нейтрино. Поскольку нас интересуют поля, которые могут быть сгенерированы локализованным источником, для достаточно больших  $\tau$  у фаз  $\Phi_k(\tau)$  существует конечный предел, т. е.

$$\Phi_k(\tau) \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} \Phi_k. \quad (21)$$

Следовательно, на больших расстояниях от источника эволюция нейтрино характеризуется вакуумными длинами осцилляций, а параметры  $\Phi_k$  определяют только сдвиги фаз. В этом случае, если считать, что разброс расстояний между источником нейтрино и точкой регистрации значительно превышает характерную длину вакуумных осцилляций нейтрино, необходимо провести усреднение вероятностей переходов по собственному времени. В результате получаем

$$\begin{aligned}
 W_{(\alpha),\zeta_\alpha \rightarrow (\beta),\zeta_\beta = \zeta_\alpha} &= \\
 &= \sum_{k=1}^3 |U_{\alpha k}|^2 |U_{\beta k}|^2 (\cos^2 \Phi_k + (\bar{s}s_{sp})^2 \sin^2 \Phi_k), \quad (22)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 W_{(\alpha),\zeta_\alpha \rightarrow (\beta),\zeta_\beta = -\zeta_\alpha} &= \\
 &= \sum_{k=1}^3 |U_{\alpha k}|^2 |U_{\beta k}|^2 (1 - (\bar{s}s_{sp})^2) \sin^2 \Phi_k.
 \end{aligned}$$

Вероятность сохранения спиральности, которая представляет собой сумму вероятностей переходов в состояния со всеми возможными флейворами  $\beta$ , задается формулой

$$\begin{aligned}
 W_{(\alpha)\zeta_\alpha \rightarrow \zeta_\alpha} &= \sum_{(\beta)} W_{(\alpha),\zeta_\alpha \rightarrow (\beta),\zeta_\beta = \zeta_\alpha} = \\
 &= \sum_{k=1}^3 |U_{\alpha k}|^2 (\cos^2 \Phi_k + (\bar{s}s_{sp})^2 \sin^2 \Phi_k). \quad (23)
 \end{aligned}$$

Как хорошо известно, с высокой точностью только нейтрино левой поляризации участвуют в процессах взаимодействия с частицами Стандартной модели. Поэтому если считать, что  $\zeta_\alpha = -1$ , то с помощью этого соотношения можно определить величину потока нейтрино, который возможно зарегистрировать на больших расстояниях от источника.

Соответствующая вероятность процесса с переворотом спина имеет вид

$$\begin{aligned}
 W_{(\alpha)\zeta_\alpha \rightarrow -\zeta_\alpha} &= \sum_{(\beta)} W_{(\alpha),\zeta_\alpha \rightarrow (\beta),\zeta_\beta = -\zeta_\alpha} = \\
 &= \sum_{k=1}^3 |U_{\alpha k}|^2 (1 - (\bar{s}s_{sp})^2) \sin^2 \Phi_k. \quad (24)
 \end{aligned}$$

Поскольку правополяризованные нейтрино практически стерильны, это соотношение определяет различие между исходным потоком нейтрино от источника и потоком нейтрино, который может наблюдаться.

### 3. НЕЙТРИНО В ПОЛЕ ТОЧЕЧНОГО ДИПОЛЯ

В качестве примера рассмотрим нейтрино в поле точечного диполя, которое, как хорошо известно, задается формулой [35]

$$\mathbf{B} = B_0 \frac{R_0^3}{r^5} (3\mathbf{r}(\mathbf{m} \cdot \mathbf{r}) - r^2 \mathbf{m}). \quad (25)$$

Здесь  $\mathbf{m}$  — направление оси диполя,  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор, проведенный из центра диполя, а  $B_0$  — величина магнитного поля на расстоянии  $R_0$  от центра при  $(\mathbf{m} \cdot \mathbf{r}) = 0$ .

Если скорость нейтрино направлена по радиусу, то

$$\begin{aligned} \frac{N}{|\mathbf{u}|} &= B_0 \frac{R_0^3}{r^3} (\sin^2 \varphi + (3 \cos^2 \varphi + 1)/|\mathbf{u}|^2)^{1/2} \approx \\ &\approx B_0 \frac{R_0^3}{r^3} \sin \varphi, \end{aligned} \quad (26)$$

где  $\varphi$  — угол между осью диполя и направлением вылета нейтрино. Пусть нейтрино летит по направлению из центра диполя и имеет определенный флейвор  $\alpha$  и спиральность  $\zeta_\alpha$  на расстоянии  $R_0$  от центра. Тогда

$$\begin{aligned} \Phi_k &= \frac{m_k \mu_0}{|\mathbf{u}|} \int_{R_0}^{\infty} N dr = \frac{R_0}{2} m_k \mu_0 B_0 \sin \varphi = \\ &= \frac{\pi R_0}{L_k} \sin \varphi, \end{aligned} \quad (27)$$

где

$$L_k = \frac{2\pi}{m_k \mu_0 B_0} \quad (28)$$

— характерная длина поворота спина. Если  $L_k$  существенно превышает радиус объекта, то влияние магнитного поля на эволюцию нейтрино пренебрежимо мало. Однако если  $L_k \lesssim R_0$ , влияние магнитного поля становится существенным.

Поскольку мы не знаем точных значений масс нейтрино, исследовать следствия формулы (23) в полном объеме не представляется возможным. Поэтому рассмотрим наиболее наглядный случай квазивырожденного спектра масс нейтрино, когда все

массы почти равны между собой  $m_k \approx m$ , и, следовательно,

$$\Phi \approx \Phi_k, L_k \approx L_0 \quad (k = 1, 2, 3).$$

В этом случае вероятность сохранения спиральности и вероятность поворота спина определяются соотношениями

$$\begin{aligned} W_{(\alpha)\zeta_\alpha \rightarrow \zeta_\alpha} &= \cos^2 \Phi + (\bar{s}s_{sp})^2 \sin^2 \Phi, \\ W_{(\alpha)\zeta_\alpha \rightarrow -\zeta_\alpha} &= (1 - (\bar{s}s_{sp})^2) \sin^2 \Phi, \end{aligned} \quad (29)$$

которые не зависят от углов смешивания. Величина  $(\bar{s}s_{sp})$  зависит от угла  $\vartheta$  между направлением распространения нейтрино и вектором магнитной индукции, однако для нейтрино ультрарелятивистских энергий эта величина отлична от нуля только внутри узкого диапазона углов, имеющего ширину порядка обратного лоренц-фактора нейтрино вблизи  $\vartheta = 0$  и  $\vartheta = \pi$  (подробнее см. [24]), поэтому такое приближение вполне состоятельно. Для простоты мы положим  $(\bar{s}s_{sp}) = 0$ . Тогда

$$W_{(\alpha)\zeta_\alpha \rightarrow \zeta_\alpha} = \cos^2 \Phi, \quad (30)$$

$$W_{(\alpha)\zeta_\alpha \rightarrow -\zeta_\alpha} = \sin^2 \Phi. \quad (31)$$

Вероятность сохранения спиральности (30) в случае поля точечного диполя принимает вид

$$\begin{aligned} W_{(\alpha)\zeta_\alpha \rightarrow \zeta_\alpha} &= \cos^2 \left( \frac{\pi R_0}{L_0} \sin \varphi \right) = \\ &= \cos^2 (\pi r \sin \varphi) \end{aligned} \quad (32)$$

и определяется только параметром

$$r = \frac{R_0}{L_0} = \frac{R_0}{2\pi} m \mu_0 B_0, \quad (33)$$

который пропорционален как размеру источника, так и величине поля на его поверхности.

Для различных значений параметра  $r$  распределение потоков нейтрино в пространстве существенно меняется. На рис. 1–4 показана зависимость вероятности сохранения спиральности в зависимости от угла между осью диполя и направлением вылета нейтрино. С увеличением  $r$  анизотропия углового распределения левополяризованных нейтрино становится более ярко выраженной, причем когда выполняется условие  $r > 1/2$ , появляются выделенные направления, при распространении вдоль которых поток потенциально наблюдаемых нейтрино полностью исчезает.

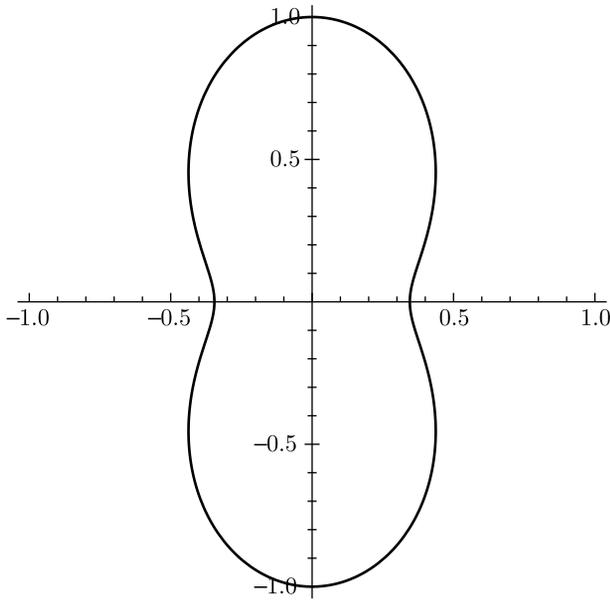


Рис. 1. Угловое распределение вероятности сохранения спиральности нейтрино для  $r \approx 0.3$

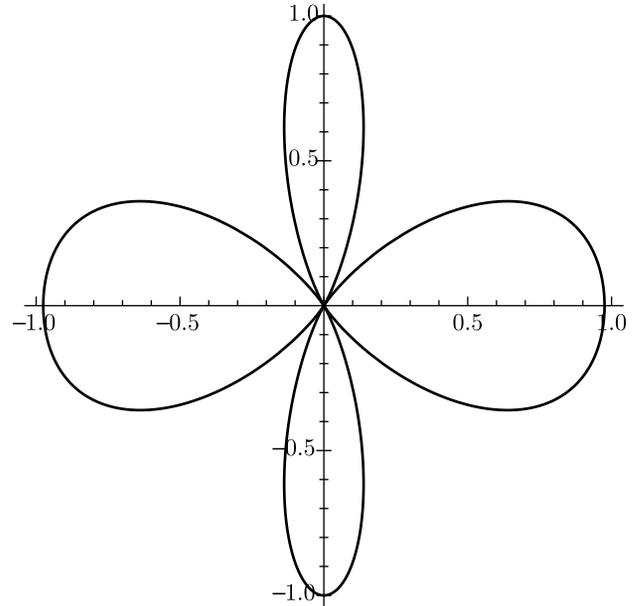


Рис. 3. Угловое распределение вероятности сохранения спиральности нейтрино для  $r \approx 0.95$

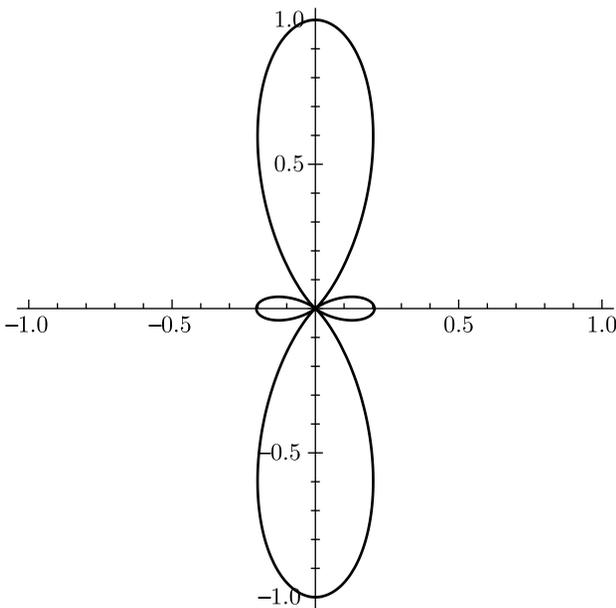


Рис. 2. Угловое распределение вероятности сохранения спиральности нейтрино для  $r \approx 0.65$

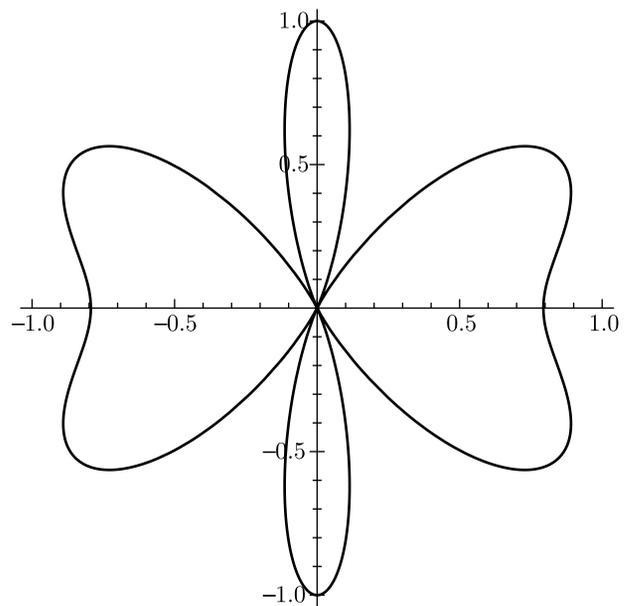


Рис. 4. Угловое распределение вероятности сохранения спиральности нейтрино для  $r \approx 1.15$

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В работе рассмотрена модельная задача распространения нейтрино в магнитном поле точечного мультиполя на примере поля дипольного типа. Выбор такой модели для исследования обусловлен следующими соображениями. Внутри компактного астрофизического объекта с высоким значением поля,

например, магнетара [36–40], могут генерироваться тепловые нейтрино. Поле снаружи такого объекта в первом приближении можно рассматривать как поле точечного магнитного мультиполя. При этом вольфенштейновский потенциал внутри объекта подавляет как флейворные осцилляции, так и поворот спина нейтрино.

Действительно, плотность вещества в магнетаре чрезвычайно высока. Плотность нейтронов является величиной порядка  $n^{(n)} \sim 10^{34} - 10^{35} \text{ см}^{-3}$ , а плотность вещества в центре объекта может достигать  $10^{40} \text{ см}^{-3}$ . С учетом вида лагранжиана Стандартной модели, кажется разумным предположение, что тепловые нейтрино в магнетаре рождаются как левополяризованные нейтрино с электронным флейвором. Поскольку степень поляризации всех фермионов вещества внутри объекта невелика (см., например, [41]), то основное влияние на распространение нейтрино будут оказывать нулевые компоненты потенциала взаимодействия через заряженные токи и потенциала взаимодействия через нейтральные токи. Из общего вида уравнения для нейтрино в веществе и электромагнитном поле [24] следует, что взаимодействием магнитного момента нейтрино с полем можно пренебречь, если

$$\sqrt{2}G_F \left| n^{(e)} - \frac{1}{2}n^{(n)} \right| \gg \mu_0 m_\nu B, \quad (34)$$

т. е. когда энергия взаимодействия магнитного момента с полем существенно меньше энергии взаимодействия с веществом. Для наглядности запишем условие, при котором влияние магнитного поля становится существенным, в гауссовой системе единиц:

$$\frac{B}{B_c} \gtrsim \frac{16}{3} \pi^2 \frac{m_e}{m_\nu} \left( \frac{\hbar}{m_e c} \right)^3 \left| n^{(e)} - \frac{1}{2}n^{(n)} \right|, \quad (35)$$

где  $B_c \approx 4.41 \cdot 10^{13} \text{ Гс}$  — швингеровское поле. Соотношение  $n^{(e)} - \frac{1}{2}n^{(n)} < 0$  выполняется внутри объекта, где концентрация электронов мала, но может нарушаться при переходе к внешним слоям магнетара. В таком случае знак величины  $n^{(e)} - \frac{1}{2}n^{(n)}$  меняется внутри объекта и часть траектории нейтрино может лежать в области, где влияние магнитного поля, вообще говоря, может приводить в повороту спина нейтрино. Возможность такого эффекта была рассмотрена в работе [15]. Поскольку область, в которой нарушается (34), очень узка по сравнению с характерной длиной поворота спина уже вследствие малых размеров самого магнетара, то с хорошей точностью можно считать, что левые электронные нейтрино сохраняют спиральность и флейвор при распространении внутри объекта. Аналогично, если в коре объекта осцилляции нейтрино и переворот спина возможны, влияние этих процессов также не будет существенным. Таким образом, можно считать, что вблизи поверхности объекта нейтрино находится в состоянии с левой поляризацией и электронным флейвором.

При исследовании нейтрино от магнетара с такой точки зрения начальное состояние нейтрино задается вблизи поверхности объекта, т. е. на сфере. Полученные нами результаты означают возможность анизотропии потока левых нейтрино вдали от магнетара. Если при этом ось вращения магнетара не совпадает с магнитной осью, то возможно быстрое периодическое изменение величины потока.

Как уже было указано выше, значение параметра  $r$ , определяющего степень асимметрии потока левых нейтрино, зависит от произведения магнитного момента нейтрино, величины магнитного поля и характерного масштаба объекта. Из анализа формулы (32) следует, что направления с нулевым значением потока левых нейтрино появляются при значении  $r = 1/2$ . Если принять характерный размер магнетара  $R_0 \approx 25 \text{ км}$  и поле на расстоянии  $R_0$  от центра магнетара  $10^{16} \text{ Гс}$ , то этот эффект проявляется при значении магнитного момента  $\mu_\nu \gtrsim 4.3 \cdot 10^{-19} \mu_B$ , что, вообще говоря, превышает величину магнитного момента, рассчитанного в рамках Стандартной модели [4],

$$\mu_\nu \sim 3 \cdot 10^{-19} \left( \frac{m_\nu}{1 \text{ эВ}} \right) \mu_B.$$

Однако указанная нами величина магнитного момента вполне удовлетворяет существующему экспериментальному ограничению  $\mu_\nu < 2.7 \cdot 10^{-11} \mu_B$ .

К сожалению, даже если величины магнитного момента нейтрино, напряженность магнитного поля и размер объекта достаточны для того, чтобы эффект поворота спина был существенным, экспериментальное обнаружение эффекта с помощью существующих в настоящее время установок представляется маловероятным вследствие малой величины потока таких нейтрино. По этой причине интересно рассмотреть, что будет происходить со спином нейтрино на финальной стадии коллапса сверхновой, когда потоки нейтрино велики и могут быть зарегистрированы в земных условиях.

Очевидно, что при коллапсе сверхновой уже не будет выполняться предположение, что нейтрино будет иметь электронный флейвор и левую поляризацию на фиксированном расстоянии от центра объекта. Используемый нами подход позволяет находить вероятности переходов и в том случае, когда поляризация нейтрино в начальном и конечном состояниях описывается разными 4-векторами поляризации. Если начальное состояние нейтрино описывается 4-вектором поляризации  $s_\alpha^\mu$  и флейвором  $\alpha$ , то вероятность обнаружить такое нейтрино в состоянии с поляризацией  $s_\beta^\mu$  задается формулой

$$W_{(\alpha)s_\alpha \rightarrow s_\beta} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 |U_{\alpha k}|^2 (\cos^2 \Phi_k (1 - (s_\alpha s_\beta)) + \sin^2 \Phi_k (1 + (s_\alpha s_\beta) + 2(\bar{s}s_\alpha)(\bar{s}s_\beta)) + \sin 2\Phi_k (e_{\mu\nu\rho\lambda} u^\mu \bar{s}^\nu s_\alpha^\rho s_\beta^\lambda)). \quad (36)$$

Для того чтобы в качестве поляризации конечного состояния  $s_\beta^\mu$  рассматривать спиральное состояние нейтрино, следует положить  $s_\beta^\mu = \zeta_\beta s_{sp}^\mu$ .

Вообще говоря, начальное состояние нейтрино при выходе из области, где существенно влияние вещества, будет представлять собой уже не чистое в квантовомеханическом смысле состояние, а смешанное. Тогда соответствующая вероятность переворота спина задается выражением

$$W_{in \rightarrow s_\beta} = \sum_{\alpha=e,\mu,\tau} \frac{w_\alpha}{2} \times \sum_{k=1}^3 |U_{\alpha k}|^2 (\cos^2 \Phi_k (1 - (s_\alpha s_\beta)) + \sin^2 \Phi_k (1 + (s_\alpha s_\beta) + 2(\bar{s}s_\alpha)(\bar{s}s_\beta)) + \sin 2\Phi_k (e_{\mu\nu\rho\lambda} u^\mu \bar{s}^\nu s_\alpha^\rho s_\beta^\lambda)), \quad (37)$$

причем величины  $s_\alpha^\mu$  могут быть различны для нейтрино разных флейворов. Поскольку начальное состояние является смешанным, величина  $|(s_\alpha s_\alpha)|$  может отличаться от единицы, т. е.  $|(s_\alpha s_\alpha)| \leq 1$ . Коэффициенты  $w_\alpha$  в выражении (37) имеют смысл вероятностей нахождения в чистых состояниях с флейвором  $\alpha$  и поляризацией  $s_\alpha^\mu$  и удовлетворяют условию  $w_e + w_\mu + w_\tau = 1$ .

Как показывает выражение (37), где фаза  $\Phi_k$  определяется выражением (27), при достаточных значениях поля анизотропия потока левых нейтрино также может иметь место. Указанный эффект не будет наблюдаться только в том случае, если в некоторой точке, где влияние вещества перестает быть существенным, потоки нейтрино всех флейворов будут полностью деполаризованы, что может быть вызвано высокими значениями магнитной индукции внутри коллапсирующего объекта. В этом случае поток левых нейтрино вдали от сверхновой во всех направлениях будет составлять в точности половину исходного потока.

**Благодарности.** Авторы выражают благодарность С. И. Блинникову, А. В. Борисову, И. П. Волобуеву, А. Д. Долгову, В. Ч. Жуковскому, Е. М. Мурчиковой, В. А. Соколову и Д. Д. Соколову за плодотворные обсуждения.

**Финансирование.** Работа А. В. Ч. выполнена при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики «Базис» (грант № 19-2-6-100-1).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Б. М. Понтекорво, ЖЭТФ **33**, 549 (1957).
2. L. Wolfenstein, Phys. Rev. D **17**, 2369 (1978).
3. С. П. Михеев, А. Ю. Смирнов, ЯФ **42**, 1441 (1985).
4. K. Fujikawa and R. E. Shrock, Phys. Rev. Lett. **45**, 963 (1980).
5. R. E. Shrock, Nucl. Phys. B **206**, 359 (1982).
6. A. E. Lobanov and A. I. Studenikin, Phys. Lett. B **515**, 94 (2001); arXiv:hep-ph/0106101.
7. А. И. Студеникин, ЯФ **67**, 1014 (2004).
8. E. Kh. Akhmedov and M. Yu. Khlopov, Phys. Lett. B **213**, 64 (1988).
9. C. Volpe, Int. J. Mod. Phys. E **24**, 1541009 (2015); arXiv:1506.06222 [hep-ph].
10. A. Kartavtsev, G. Raffelt, and H. Vogel, Phys. Rev. D **91**, 125020 (2015); arXiv:1504.03230[hep-ph].
11. A. Dobrynina, A. Kartavtsev, and G. Raffelt, Phys. Rev. D **93**, 125030 (2016); arXiv:1605.04512[hep-ph].
12. A. Vlasenko, G. M. Fuller, and V. Cirigliano, Phys. Rev. D **89**, 105004 (2014); arXiv:1309.2628[hep-ph].
13. A. I. Ternov, Phys. Rev. D **94**, 093008 (2016).
14. А. И. Тернов, Письма в ЖЭТФ **104**, 75 (2016).
15. A. Grigoriev, E. Kupcheva, and A. Ternov, Phys. Lett. B **797**, 134861 (2019).
16. P. Kurashvili, K. A. Kouzakov, L. Chotorlishvili, and A. I. Studenikin, Phys. Rev. D **96**, 103017 (2017); arXiv:1711.04303[hep-ph].
17. V. O. Egorov and I. P. Volobuev, Phys. Rev. D **100**, 033004 (2019).
18. M. Blasone and G. Vitiello, Ann. Phys. **244**, 283 (1995).
19. C. Giunti, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. **34**, R93 (2007).
20. R. Jost, Helv. Phys. Acta **39**, 369 (1966).
21. А. Е. Лобанов, ТМФ **192**, 70 (2017).
22. А. Е. Лобанов, Ann. Phys. **403**, 82 (2019); arXiv:1507.01256[hep-ph].
23. А. Е. Лобанов, А. В. Чухнова, Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физ. Астрон. **58**, № 5, 22 (2017).

24. A. V. Chukhnova and A. E. Lobanov, Phys. Rev. D **101**, 013003 (2020); arXiv:1906.09351.
25. A. V. Chukhnova and A. E. Lobanov, arXiv:2005.04503 (2020).
26. M. Dvornikov and J. Maalampi, Phys. Lett. B **657**, 217 (2007).
27. A. Popov and A. Studenikin, Eur. Phys. J. C **79**, 144 (2019); arXiv:1902.08195[hep-ph].
28. C. Giunti and A. Studenikin, Rev. Mod. Phys. **87**, 531 (2015); arXiv:1403.6344[hep-ph].
29. S. L. Glashow, J. Iliopoulos and L. Maiani, Phys. Rev. D **2**, 1285 (1970).
30. Ф. Р. Гантмахер, *Теория матриц*, Физматлит, Москва (2010).
31. A. E. Lobanov, J. Phys. A **39**, 7517 (2006); arXiv:hep-ph/0311021.
32. C. Giunti and C. W. Kim, *Fundamentals of Neutrino Physics and Astrophysics*, Oxford University Press (2007).
33. M. Agostini et al., Phys. Rev. D **96**, 091103(R) (2017); arXiv:1707.09355 [hep-ex].
34. A. G. Beda et al., Phys. Part. Nucl. Lett. **10**, 139 (2013); arXiv:1005.2736[hep-ex].
35. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика. Том 2. Теория поля*, Наука, Москва (1988).
36. С. Б. Попов, М. Е. Прохоров, Труды ГАИШ **72**, ГАИШ МГУ (2003).
37. А. Ю. Потехин, УФН **180**, 1279 (2010).
38. R. Turolla et al., Rep. Prog. Phys. **78**, 116901 (2015).
39. V. M. Kaspi and A. M. Beloborodov, Ann. Rev. Astron. Astrophys. **55**, 261 (2017).
40. *Online mcgill magnetar catalogue*. [www.physics.mcgill.ca/pulsar/magnetar/main.html](http://www.physics.mcgill.ca/pulsar/magnetar/main.html).
41. H. Nunokawa, V. B. Semikoz, A.Yu. Smirnov, and J.W. F. Valle, Nucl. Phys. B **501**, 17 (1997).

## 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](mailto:jetp@kapitza.ras.ru) Телефон: +7 (499) 137 56 22

## К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

Редакция ЖЭТФ просит авторов при направлении статей в печать руководствоваться приведенными ниже правилами.

1. В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

2. Статьи должны быть изложены с предельной краткостью, совместимой с ясностью изложения, и окончательно обработаны. Следует избегать повторения данных таблиц или графиков в тексте статьи, а также представления численных результатов в виде таблиц и графиков одновременно. Не следует злоупотреблять введением новых аббревиатур в дополнение к общепринятым, таким как ЯМР, УФ и т. д.

3. К статье необходимо прилагать короткую аннотацию, в которой должны быть четко сформулированы цель и результаты работ (аннотация и раздел «Выводы» не должны дублировать друг друга).

4. Редакция принимает статьи:

а) по электронной почте по адресу [JETP@kapitza.ras.ru](mailto:JETP@kapitza.ras.ru);

б) в «on-line» режиме на веб-странице журнала ([www.jetp.ac.ru](http://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  $\text{\LaTeX}$  или Word, рисунки — в формате PostScript (\*.ps) или EncapsulatedPostScript (\*.eps), каждый рисунок отдельным файлом (желательно также представить рисунки в том формате, в котором они готовились). В том случае, если статья посылается по электронной почте, текст должен быть представлен дополнительно в формате ps или pdf.

5. Статьи должны быть напечатаны шрифтом 12 пунктов в одну колонку через полтора интервала, на одной стороне листа, с полями с левой стороны

листа не уже 4 см; рукописные вставки не допускаются. В обозначениях и индексах (в тексте и на рисунках) не должно быть русских букв. Например, следует писать  $P_{\text{opt}}$ , а не  $P_{\text{опт}}$ . Все сколько-нибудь громоздкие формулы должны выноситься на отдельные строки. Векторные величины должны быть выделены прямым полужирным шрифтом.

Все страницы рукописи должны быть пронумерованы. Таблицы, аннотация, литература, подписи к рисункам должны быть напечатаны на отдельных страницах.

6. Подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье. Цитируемая литература должна даваться не в виде подстрочных примечаний, а общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой в прямых скобках (например, [1]). Литература дается в порядке упоминания в статье. Указываются инициалы и фамилии авторов (всех авторов, если число авторов меньше четырех, и троих и др., если число авторов больше четырех). Порядок оформления литературы виден из следующих примеров:

1. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1984), с. 1.
2. А. М. Сергеев, Р. И. Чернова, А. Я. Сергиенко, ФТТ **30**, 835 (1988).
3. R. Brewer, J. M. Faber, C. N. Malleson et al., Phys. Rev. A **18**, 1632 (1978).
4. A. N. Stirling and D. Watson, in *Progress in Low Temperature Physics*, ed. by D. F. Brewer, North Holland, Amsterdam (1986), Vol. 10, p. 683.
5. К. Д. Громов, М. Э. Ландсберг, в сб. *Тез. докл. X Всесоюзн. конф. по физике низких температур* (Ташкент, 1986), Наука, Москва (1987), с. 434.
6. M. P. Elliot, V. Rumford, and A. A. Smith, Preprint TH 4302-CERN (1988).

7. Л. Н. Шалимова, А. С. Крюков, Препринт ОИЯИ № Р-16-22 (1987).
  8. Н. В. Васильев, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, МГУ, Москва (1985).
  9. A. Fang and C. Howald, E-print archives, 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*