

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД

МОСКВА

ТОМ 159, ВЫПУСК 4

АПРЕЛЬ 2021

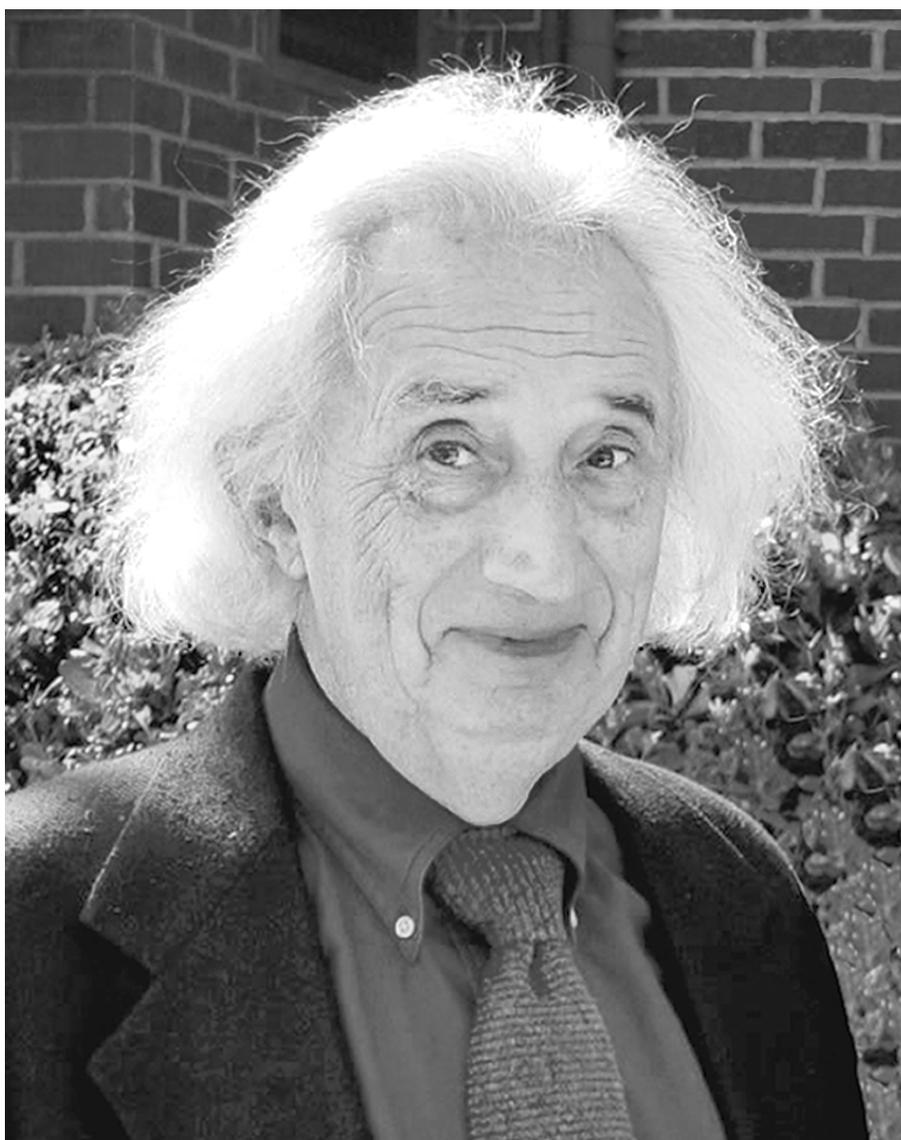
РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

Мультиферроики и не только: электрические свойства различных магнитных текстур	Хомский Д. И.	581
Analogy between the magnetic dipole moment at the surface of a magnetoelectric and the electric charge at the surface of a ferroelectric	Spaldin N. A.	594
A Dzyaloshinskii–Moriya interaction guide to magnets micro-world	Mazurenko V. V., Kvashnin Y. O., Lichtenstein A. I., Katsnelson M. I.	598
Взаимодействие Дзялошинского и обменно-релятивистские эффекты в ортоферритах	Москвин А. С.	607
Исследование влияния электронных корреляций на электронную структуру соединений FeAlO_3 и FeSiO_3	Чернов Е. Д., Лукоянов А. В., Анисимов В. И.	644
Пьезомагнетизм в ферромагнитных сверхпроводниках	Минеев В. П.	653
Анизотропия магнитных фаз кубических гелимагнетиков	Чижигов В. А.	656
Динамика доменных стенок в киральных магнетиках	Галкина Е. Г., Иванов Б. А., Кулагин Н. Е., Лерман Л. М., Ястремский И. А.	671
Об аномальном опрокидывании подрешеток в антиферромагнитном $\text{Cu}(\text{pz})_2(\text{ClO}_4)_2$	Марченко В. И.	687
Critical fluctuations beyond the quantum phase transition in Dzyaloshinskii–Moriya helimagnets $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$	Grigoriev S. V., Utesov O. I., Chubova N. M., Dewhurst C. D., Menzel D., Maleyev S. V.	690

Капли параметра порядка в электронной системе малой плотности с притяжением в присутствии сильного случайного потенциала	Каган М. Ю., Мазур Е. А.	696
Pairing by a dynamical interaction in a metal	Chubukov A. V., Abanov Ar.	708
Nickelate superconductors: an ongoing dialog between theory and experiments	Botana A. S., Bernardini F., Cano A.	711
Асимптотическая теория анизотропной классической диффузии в неоднородных средах	Кондратенко П. С., Матвеев А. Л., Обухов Ю. Н.	719
Неклассический перенос примеси в модели Дыхне с параметрами, зависящими от координат. Принцип Ферма	Кондратенко П. С., Матвеев А. Л.	724
Динамические структуры зарядов в нематике с отрицательной анизотропией электропроводности	Пикин С. А.	730
Комбинированные дефекты в ферроэлектрических нематиках	Кац Е. И.	735
Скобки Пуассона гидродинамического типа и их обобщения . .	Мальцев А. Я., Новиков С. П.	740
Квазиклассическая динамика модели Дике в сверхизлучательной дипольной фазе в состоянии «связанного сияния»	Мухин С. И., Мукерджи А., Сеидов С. С.	755
Осцилляторы с затуханием в рамках общей теории сил Казимира и Ван дер Ваальса	Бараш Ю. С.	761
Kinetic processes in Fermi–Luttinger liquids	Levchenko A., Micklitz T.	776
Симметричный подход в задаче о расширении газов в вакуум	Кузнецов Е. А., Каган М. Ю.	794
Phase slips, dislocations, half-integer vortices, two-fluid hydrodynamics, and the chiral anomaly in charge and spin density waves	Brazovskii S., Kirova N.	806
Dimensionless physics	Volovik G. E.	815
К вопросу о наперстках Лефшеца в сигма-моделях, I	Кричевер И., Некрасов Н.	822



К 90-летию Игоря Ехиельевича Дзялошинского

ОТ РЕДАКЦИИ

Первого февраля 2021 года исполнилось 90 лет выдающемуся физику-теоретику Игорю Ехиельевичу Дзялошинскому. Он начинал свою научную деятельность как ближайший ученик и сотрудник Л. Д. Ландау и остается одним из немногих живущих ныне физиков, кто с полным основанием может назвать его своим непосредственным и прямым учителем. Выступая на защите его кандидатской диссертации, не щедрым на похвалы Ландау сказал: «Очень много все хвалили диссертанта, так что одна лишняя похвала мало что изменит. Но у меня нет никаких оснований его ругать. Я хотел бы подчеркнуть, что за последние годы тов. Дзялошинский является одним из наиболее талантливых молодых теоретиков, с которыми мне приходилось встречаться: он выделяется большой инициативностью. Такой вопрос, как вопрос ферромагнетизма, он поставил по своей инициативе, и по своей инициативе его разрешил». И. Е. Дзялошинскому принадлежит множество оригинальных работ, большинство из которых были опубликованы в ЖЭТФ, где он работал редактором. Уже в ранние годы Дзялошинский становится лидером в сообществе физики магнитных явлений. К числу его основных результатов можно отнести предсказание магнитоэлектрического эффекта, объяснение явления слабого ферромагнетизма в антиферромагнетиках (являющегося результатом взаимодействия, известного теперь как взаимодействие Дзялошинского–Мория), теорию геликоидальных сверхструктур и эффектов соизмеримости. Этой же темой замыкается список его публикаций на сегодняшний день: пришедшая в 2000-х эпоха «мультиферроиков» фактически и основана на предсказаниях, сделанных более полувека назад начинающим ученым.

Нельзя не поражаться результативности, энтузиазму и научной любознательности Игоря Ехиельевича к весьма на первый взгляд далеким друг от друга научным сюжетам в области физики магнетизма и конденсированных сред, статистической физики и жидких кристаллов и полимеров, точно решаемых моделей и состояний с нарушением симметрии обращения времени. Темы статей, вошедших в юбилейный выпуск ЖЭТФ в полной мере отражают широту его научных интересов. Особенно хочется отметить, что многие из этих работ фактически основаны на предсказаниях, сделанных самим Дзялошинским. Мы благодарим всех авторов этого выпуска и вместе с ними поздравляем Игоря Ехиельевича с юбилеем и желаем ему крепкого здоровья.

EDITORIAL

February 1, 2021 is the 90th birthday a prominent theoretical physicist, Igor Ekhilievich Dzyaloshinskii. At the start of his career, Dzyaloshinskii was a student and a closest associate of Lev Landau; now he is among the few active physicists who can call Landau his teacher. Speaking at the defense of Dzyaloshinskii's PhD thesis, Landau, who was hardly lavish in his praise of others, said, "The defender has already received so many commendations that yet another one is hardly necessary. But I have no reason to criticize him. I want to stress that in the course of recent years, Comrade Dzyaloshinskii has been one of the most talented young theoreticians whom I have met. He stands out for his creativity. It was his initiative to study the problems of ferromagnetism." Dzyaloshinskii authored numerous research papers, most of which were published in JETP; he served as Deputy Editor-in-chief of JETP for many years, together with E. M. Lifshitz. Early in his career, Dzyaloshinskii became a leader in the community of the physics of magnetic phenomena. Among his main results are the prediction of magnetoelectric effect, explanation of weak ferromagnetism in antiferromagnets (resulting from the interaction now known as Dzyaloshinskii–Moria interaction), the theory of helicoidal superstructures and commensurability effects. This last is also the subject of his recent papers: the advent of the age of "multiferroics" in the 2000s is actually based on the predictions made by a young scientist more than half a century ago.

Dzyaloshinskii's productivity, enthusiasm, and intellectual curiosity are remarkable for having covered apparently disparate subjects: the physics of magnetism, liquid crystals, polymers, exactly solvable models, and states with time-reversal symmetry violation. The contributions to this anniversary issue of JETP adequately reflect the scope of his research interests. It is worth noting that many of these works are actually based on the above-mentioned predictions made by Dzyaloshinskii himself over the many years of his career in science. We are grateful to all the contributors to this issue and join them in wishing Dzyaloshinskii an excellent anniversary and good health.

МУЛЬТИФЕРРОИКИ И НЕ ТОЛЬКО: ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РАЗЛИЧНЫХ МАГНИТНЫХ ТЕКСТУР

*Д. И. Хомский**

*И. Институт физики, Кельнский университет
50937, Кельн, Германия*

Поступила в редакцию 30 октября 2020 г.,
после переработки 20 ноября 2020 г.
Принята к публикации 20 ноября 2020 г.

Представлен краткий обзор многих нетривиальных эффектов, обусловленных взаимосвязью электрических и магнитных степеней свободы в твердых телах, начало изучения которой было положено И. Е. Дзялошинским в 1959 году. Кратко рассмотрев основные физические свойства мультиферроиков, мы остановимся на различных эффектах в других системах, основанных на тех же физических механизмах, которые действуют в мультиферроиках. В частности, эти механизмы приводят к нетривиальным электрическим свойствам различных магнитных текстур, таких как образование диполей на магнитных монополях в спиновом льде, на некоторых доменных стенках в обычных ферромагнетиках, на скирмионах и т. д. Также кратко обсуждается обратный эффект: появления магнитных монополей на электрических зарядах в магнитоэлектриках. Такая необычная электрическая активность различных магнитных текстур проявляется во многих физических свойствах этих материалов и может иметь прикладное значение.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040015

Электричество и магнетизм представляют собой две стороны одного и того же физического явления, что следует, например, из уравнений Максвелла. Их сильное взаимное влияние играет большую роль как в фундаментальной физике, так и для практических приложений. Очередным поворотом в этой истории стало быстрое развитие спинтроники [1, 2], новой прикладной области, в которой используется не только заряд, но и спин электронов. Развитие этой области до современного состояния можно проследить от основополагающих работ И. Э. Дзялошинского по слабому ферромагнетизму, в которых введено понятие антисимметричного обмена — взаимодействия Дзялошинского или Дзялошинского–Мория (ДМ) [3], и почти одновременно им была предложена идея линейного магнитоэлектрического эффекта [4]. Обе эти статьи оказали сильное влияние на развитие магнетизма. В частности, вторая ста-

тья привела к впечатляющему развитию таких направлений, как магнетоэлектрики и мультиферроики [5–13]. Знания, полученные при изучении этих материалов, можно также применять для исследования многих других явлений, обусловленных взаимосвязью электрических и магнитных свойств материалов, причем не только в специальных магнитоэлектрических и мультиферроидных соединениях, но и в обычных магнитных материалах с различными видами магнитных текстур, таких как магнитные доменные стенки, дефекты, скирмионы и т. д., проявляющих нетривиальную электрическую активность. Это является темой данной статьи, которая частично носит характер краткого обзора, но также содержит некоторые новые результаты. Таким образом, в названии данной статьи «Мультиферроики и не только» акцент будет сделан на словах «не только». Следует также отметить, что в своих недавних работах Дзялошинский возвращается к этой теме [14–17] и, таким образом, его имя снова и снова возникает в этой области.

* E-mail: khomskii@ph2.uni-koeln.de

1. МУЛЬТИФЕРРОИКИ: НЕМНОГО ИСТОРИИ

Начнем с очень краткого описания развития исследований в области мультиферроиков в моем представлении. Как упоминалось выше, настоящая деятельность в этой области началась с публикации основополагающей статьи Дзялошинского [4], хотя иногда также цитируется короткая фраза из гораздо более ранней статьи Пьера Кюри 1894 года [18], в которой он упомянул, что нетривиальные электрические и магнитные свойства в принципе могут совмещаться в одном материале. Но это было лишь общее заявление без привлечения каких-либо конкретных физических идей. После сделанного Дзялошинским утверждения (вслед за коротким замечанием, высказанным в книге [19]) о возможном существовании в определенных магнитных системах магнитоэлектрического эффекта, индуцированной магнитным полем электрической поляризации, и обратного эффекта индуцирования намагниченности электрическим полем, этот эффект был очень быстро обнаружен Астровым [20] в соединении Cr_2O_3 . Вскоре последовало довольно быстрое развитие данной проблемы, причем внимание привлекли не только магнитоэлектрики, в которых интересные эффекты возникают во внешнем поле, но и материалы, которые в основном состоянии в отсутствие внешних полей могут сочетать магнитные и сегнетоэлектрические свойства. Такие материалы получили название мультиферроиков [21]. Помимо чисто научного интереса, эти системы могут найти важное практическое применение, наиболее существенным из которых в настоящее время является потенциальная возможность электрического управления магнитной памятью в компьютерных запоминающих устройствах за счет эффектов, не связанных с использованием обладающих диссипацией электрических токов. Это по-прежнему служит основным стимулом подобных исследований.

Особенно активный поиск и изучение таких систем на ранней стадии исследований проводились в бывшем Советском Союзе, в основном двумя группами, Смоленского в Ленинграде, ныне Санкт-Петербург, и Веневцева в Москве, см., например, [22, 23]. В этих двух группах были открыты несколько мультиферроиков, но их прикладное значение ограничивалось либо низкими температурами, при которых такое состояние существовало, либо относительно слабой связью между электрической и магнитной подсистемами, что до настоящего времени остается основным препятствием для широ-

кого практического использования, хотя за последние годы в этом направлении был достигнут огромный прогресс. Но, помимо потенциальных приложений, изучение этих материалов выдвинуло ряд серьезных общезначимых вопросов. Одним из них было первоначальное наблюдение, что в одном из самых обширных классов материалов, перовскитах ABO_3 , к которым принадлежит довольно много магнитных систем, включая хорошо известные манганиты с колоссальным магнитосопротивлением, такие как $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$, а также большинство интересных и практически важных сегнетоэлектриков, начиная с BaTiO_3 , существует поразительное «взаимное исключение»: материалы, в которых переходные металлы B имеют частично заполненные d -оболочки, являются магнитными, тогда как при незаполненной d -оболочке с конфигурацией d^0 они, естественно, будут немагнитными, но могут оказаться сегнетоэлектриками. Удивительно, но между этими двумя большими классами материалов практически не было перекрытия: либо они были сегнетоэлектриками, либо магнетиками, но почти никогда не проявляли оба свойства одновременно. Такое d^n-d^0 -разделение было замечено давно, но долгое время не привлекало внимания. Я помню, что примерно в 1996 году рассказал об этой проблеме и вообще о попытках объединить в одном материале (ферро)магнитные и сегнетоэлектрические свойства очень хорошему и чрезвычайно эрудированному физики Джорджу Завадскому, с которым мы оба работали в то время в Гронингском университете, и его реакция была весьма характерной: «Это ведь очень интересно! Почему мы ничего об этом не знаем?» Некоторое время спустя на программе по квантовому магнетизму в КИТР в Санта-Барбаре в 1998 году было организовано широкое обсуждение на тему возможного сосуществования электричества и магнетизма. Никола Спалдин (в то время Никола Хилл) рассказала на этой встрече о своих *ab-initio* расчетах одного «подозрительного» материала BiNiO_3 [24], и мы обсудили это эмпирическое наблюдение о взаимном исключении сегнетоэлектричества (конфигурация d^0) и магнетизма (конфигурация d^n).

Следующий важный шаг был сделан в 2001 году, когда Никола организовала специальную сессию С21 на мартовском митинге Американского физического общества, посвященную обсуждению мультиферроиков [25]. Можно сказать, что эта сессия действительно привела к возрождению интереса к этой проблеме и «прославила» мультиферроики. Действительно, в 2007 году на мартовском митинге APS было уже 7 специальных сессий по мультиферрои-

кам — сессий, а не докладов! В 2008 году термин «мультиферроики» присутствовал уже в названии 12 сессий мартовского митинга. А началось все с первой специальной сессии на мартовском митинга 2001 года.

Однако наиболее важным был экспериментальный прогресс в этой области, достигнутый несколько позже, в основном тремя группами. В работе [26] были обнаружены замечательные мультиферроидные свойства соединения $TbMnO_3$, а в работе [27] — соединения $Tb_2Mn_2O_5$. Фактически это стало открытием мультиферроиков нового вида, которые теперь называют мультиферроиками II типа — систем, в которых сегнетоэлектричество возникает вследствие определенного магнитного упорядочения, в отличие от мультиферроиков I типа, в которых сегнетоэлектричество и магнетизм появляются независимо, и чаще всего за них отвечают различные подсистемы и ионы. Третьим прорывом стал синтез группой Рамеша тонких пленок классического мультиферроика I типа $BiFeO_3$ [28], до сих пор остающегося системой с наилучшими характеристиками и, наверное, с лучшими перспективами для практического применения (если говорить об одном материале, а не о композитных системах, таких как, например, многослойные структуры, состоящие из хороших сегнетоэлектриков и хороших ферромагнетиков). Пленки, выращенные в группе Рамеша, обладали весьма впечатляющими свойствами, демонстрируя гораздо более сильные эффекты, чем имеющиеся в то время объемные кристаллы $BiFeO_3$ (хотя сейчас люди достигают таких характеристик и в объемном BFO). Эти три экспериментальных прорыва наряду с осознанием некоторых фундаментальных теоретических проблем и задач привели к возрождению общего интереса к мультиферроикам и быстрому прогрессу в этой области. В настоящее время обнаружено много новых систем, и, наверное, можно сказать, что основные физические механизмы, обуславливающие это явление, уже поняты, хотя постоянный прогресс в этой области все еще продолжается, обнаруживаются новые материалы и новые явления. Помимо исследования собственно мультиферроиков, опыт и знания, приобретенные при их изучении, могут применяться для описания похожих явлений в других материалах. В этой статье я попробую обобщить некоторые из новых достижений, хотя, конечно, невозможно полностью охватить эту очень обширную область. Существует достаточно много общих обзорных работ по мультиферроикам [5–13], раздел по мультиферроикам включен в книгу [29], а также издана специальная книга по

этим системам [30]. В данной работе я не буду подробно обсуждать эти явления, а больше сосредоточусь на «побочных эффектах» таких исследований, в основном, на относительно качественном уровне, уделив внимание тому, что происходит «за пределами мультиферроиков». Однако сначала будет сделан краткий обзор основных эффектов и механизмов самих мультиферроиков.

2. МУЛЬТИФЕРРОИКИ: ОСНОВНЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Мультиферроики можно условно разделить на две большие группы [11]. В первую группу, которую можно назвать мультиферроиками I типа, входят материалы, в которых магнетизм и сегнетоэлектричество хотя и взаимосвязаны, но проявляются независимо и обусловлены разными механизмами и подсистемами. В этих материалах значения критических температур магнитного и сегнетоэлектрического переходов часто бывают довольно высокими, причем сегнетоэлектрический переход обычно происходит при более высоких температурах. Лучшими примерами мультиферроиков I типа являются уже упомянутый $BiFeO_3$, в котором $T_{FE} = 1100$ К и $T_N = 643$ К, а также гексагональные манганиты $R MnO_3$ (R — редкоземельный элемент) с $T_{FE} \sim 1000$ К и $T_N \sim 100$ К. Магнитная и сегнетоэлектрическая степени свободы в этих системах, разумеется, связаны, но эта связь обычно довольно слабая.

В мультиферроиках II типа сегнетоэлектричество наводится определенным типом магнитного упорядочения. Первыми открытыми мультиферроиками этого класса стали $TbMnO_3$ [26] и $TbMn_2O_5$ [27]. Парамагнитное состояние в этих системах не является сегнетоэлектрическим, однако сегнетоэлектрическая поляризация может возникать при определенном типе магнитного упорядочения. Именно эти новые материалы вызвали основной общезначимый интерес и привели к появлению нескольких новых физических концепций. Благодаря сильной внутренней связи магнетизма и сегнетоэлектричества эти материалы могут оказаться более многообещающими с практической точки зрения. Однако, к сожалению, большинство из них имеют относительно низкие значения критических температур, ниже которых наблюдается сосуществование сегнетоэлектричества и магнетизма.

Появление электрической поляризации в некоторых конкретных магнитоупорядоченных состояниях в мультиферроиках II типа можно объяснить

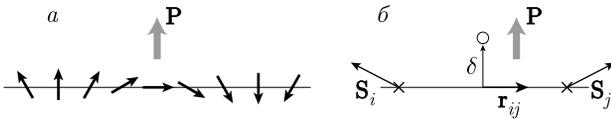


Рис. 1. *a* — Циклоидная магнитная структура и суммарная электрическая поляризация. *б* — Механизм возникновения дипольного момента (обратный механизм Дзялошинского) или поляризации для пары спинов, см. выражение (1). Крестиками обозначены положительно заряженные ионы переходного металла, а кружком, например, ион O^{-2} . Жирная зеленая стрелка показывает направление электрического дипольного момента или электрической поляризации

за счет двух основных механизмов. Одним из них является обычная магнитострикция: определенное магнитное упорядочение может нарушать инверсию, а соответствующее искажение решетки за счет магнитострикции в некоторых магнитных структурах может привести к появлению электрической поляризации (см., например, [31]). Этот механизм не требует наличия спин-орбитального взаимодействия. Другой, более распространенный и более интересный механизм в мультиферроиках II типа связан с релятивистским спин-орбитальным взаимодействием и больше напоминает изначальный механизм магнитоэлектричества, предложенный Дзялошинским. Существует несколько разновидностей этого механизма (см., например, [32, 33]). Наиболее распространенным и важным для выхода «за рамки мультиферроиков» является механизм возникновения электрической поляризации в магнетиках с циклоидной магнитной структурой. Этот механизм был описан в рамках микроскопического подхода в работе [34], а также получен с использованием разложения Ландау в работе [35]. Согласно этой теории, если спины двух соседних магнитных ионов неколлинеарны, для этой пары ионов возникнет электрическая поляризация, пропорциональная

$$\mathbf{P}_{ij} = c \mathbf{r}_{ij} \times [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j], \quad (1)$$

где c — некоторый коэффициент. Для циклоидной магнитной структуры, показанной на рис. 1*a*, возникает отличная от нуля полная поляризация, поэтому циклоидным магнетикам присущи свойства мультиферроиков.

Микроскопический механизм возникновения электрической поляризации был объяснен в работе [36]. По сути он представляет собой обратный эффект Дзялошинского. Как указано в работе [3], в некоторых особых группах симметрии для пары

ионов i, j существует антисимметричное обменное взаимодействие Дзялошинского – Мория (ДМ):

$$H_{DM} = -\mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j). \quad (2)$$

Если вектор Дзялошинского \mathbf{D} отличен от нуля, это взаимодействие приводит к скосу соседних спинов. Также и наоборот, если спины по какой-либо причине неколлинеарны, то для выигрыша в энергии может оказаться выгодным искажение решетки со сдвигом ионов таким образом, чтобы сделать $\mathbf{D} \neq \mathbf{0}$. В типичных случаях, например, в перовскитах, обменное взаимодействие между ближайшими магнитными ионами M_i и M_j осуществляется за счет суперобмена через лиганд (например, ионы кислорода), расположенный между ними, см. рис. 1*б*. Если этот кислород расположен точно посередине связи (ij), то по симметрии взаимодействие ДМ равно нулю [37]. Чтобы получить выигрыш в энергии ДМ (2), необходимо сместить такой кислород на некоторое расстояние δ перпендикулярно связи (ij), например, в направлении z , см. рис. 1*б*. Тогда возникает ненулевое взаимодействие ДМ с вектором $\mathbf{D} \sim \mathbf{r}_{ij} \times \delta$, так что теперь достигается выигрыш в энергии ДМ (2). Однако такое смещение отрицательно заряженных ионов кислорода в сторону от «центра тяжести» положительных зарядов ионов переходных металлов M_i и M_j создает электрический диполь или поляризацию в направлении z . Это обратный эффект Дзялошинского, который является основой мультиферроидного поведения во многих системах, и именно этот механизм может также привести к электрической поляризации различных магнитных текстур, таких как некоторые доменные стенки, скирмионы и т. д., что будет широко «использовано» в дальнейшем изложении.

3. ЭЛЕКТРОННЫЕ МЕХАНИЗМЫ СВЯЗИ ЭЛЕКТРИЧЕСТВА И МАГНЕТИЗМА

Обычно появление электрической поляризации в магнитоэлектриках и мультиферроиках связано с соответствующими сдвигами ионов в решетке. Однако такая связь может возникнуть за счет чисто электронного механизма. В частности, этот механизм может работать во фрустрированных системах на основе треугольников из ионов переходных металлов (см. рис. 2). Если описывать d -электроны в таком треугольнике с помощью обычной модели Хаббарда

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (3)$$

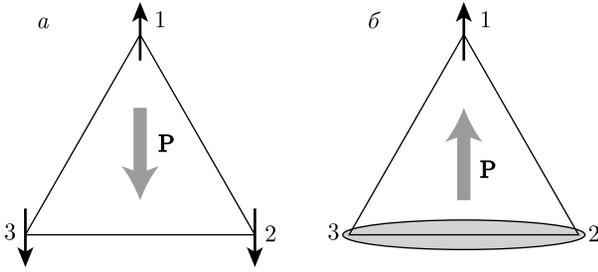


Рис. 2. Образование электрической поляризации в треугольниках с определенной спиновой структурой. Овалом на панели *б* изображено синглетное состояние спинов $\mathbf{S}_2, \mathbf{S}_3$, для которого $\mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3 = \mathbf{0}$ и $\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 = -\frac{3}{4}$ (см. выражение (4))

то можно показать, что для определенных магнитных текстур (спиновых корреляционных функций) в треугольнике возникает перераспределение зарядов таким образом, что в отличие от обычных моттовских изоляторов заряд на узле i не равен в точности 1, а может оказаться больше или меньше 1. Соответственно, в данном случае на таком треугольнике образуется электрический диполь, величина и направление которого определяется спиновой структурой. Таким образом, мультиферроидное поведение обусловлено чисто электронным механизмом.

В работе [38] (см. также [39]) показано, что для треугольника при вычислении в модели (3) (для одного электрона на узел с сильными корреляциями $t/U \ll 1$) до третьего порядка по (t/U) , заряд на узле 1 равен

$$n_1 \sim 1 + K [\mathbf{S}_1 \cdot (\mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3) - 2\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3], \quad K = 8t^3/U^2. \quad (4)$$

Аналогичные выражения получаются для n_2, n_3 . Таким образом, если входящая в выражение (4) спиновая корреляционная функция отлична от нуля, то в треугольнике возникает перераспределение заряда и образуется электрический дипольный момент (см. рис. 2). Этот эффект кажется довольно маленьким, $\sim t^3/U^2 \ll 1$, однако можно показать, что такое же выражение справедливо в случае $t \sim U$, только с другим значением коэффициента K в выражении (4). Таким образом, в общем случае этот чисто электронный механизм наведения электронной поляризации определенной магнитной текстурой может быть весьма значительным. (На самом деле вклад искажений решетки в этом случае приводит к такому же выражению для поляризации с той же зависимостью от спиновой структуры [39].)

Достаточно интересно, что в такой же ситуации для некоторых спиновых текстур в треугольниках могут также возникать спонтанные круговые токи с

соответствующим орбитальным моментом. Эти токи существуют для некопланарных спинов и определяются выражением [38]:

$$j_{123} = C\kappa(123), \quad (5)$$

где κ — скалярная спиновая киральность

$$\kappa(123) = \mathbf{S}_1 \cdot (\mathbf{S}_2 \times \mathbf{S}_3). \quad (6)$$

Здесь коэффициент C в невырожденной модели Хаббарда равен $C = 24et^3/hU^2$. Таким образом, некопланарная спиновая текстура приведет к появлению не только фиктивного магнитного поля от фазы Берри [40], но также и реальных орбитальных токов и орбитальных моментов, пропорциональных скалярной спиновой киральности (6). Далее будут приведены примеры этого эффекта.

Физические механизмы, описанные в этом и предыдущих разделах, могут быть использованы для предсказания или объяснения не только некоторых свойств мультиферроиков, но также явлений, связанных со взаимодействием электрических и магнитных степеней свободы в других случаях. Это будет обсуждаться в следующих разделах.

4. ДИПОЛИ НА МОНОПОЛЯХ В СПИНОВОМ ЛЬДЕ

В некоторых фрустрированных системах (так называемом спиновом льде) было недавно обнаружено очень интересное явление образования возбуждений, обладающих свойствами магнитных монополей [41, 42]. После теоретического предсказания таких монополей они были обнаружены и широко изучены экспериментально (см., например, [43–45]). Подобные монополи были впервые предсказаны и наблюдались в спиновом льде на пирохлорной решетке $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, состоящей из тетраэдров с изинговскими магнитными ионами (в данном случае диспрозия) в вершинах, магнитные моменты которых направлены к центру или от центра тетраэдров (рис. 3). Обычное основное состояние спинового льда соответствует конфигурации (2-in)–(2-out) (в каждом тетраэдре два момента направлены внутрь, два наружу); такое распределение спинов не является единственным и оказывается сильно фрустрированным. Конфигурация монополя, которая для обычного спинового льда является возбужденным состоянием при конечной температуре, но также может быть стабилизирована внешним магнитным полем, соответствует состоянию (3-in)–(1-out) (монополю μ с магнитным зарядом внутри тетраэдра $+2Q$, где каждый спин представляется в виде

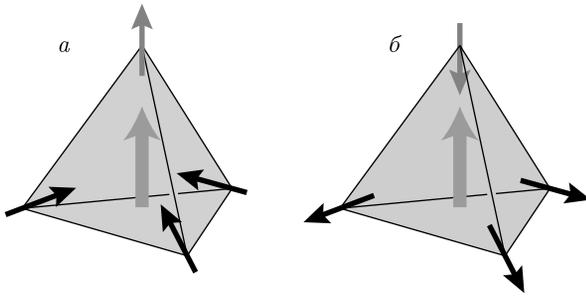


Рис. 3. Возникновение электрических диполей (жирные зеленые стрелки) для монополей (*a*) и антимонполей (*б*) на тетраэдрах с ионами металлов в вершинах, из которых образована пирохлорная решетка с состоянием спинового льда. Здесь и далее монополи изображены розовым, а антимонполю голубым цветом

пары магнитных зарядов $(+Q, -Q)$, или состоянию $(1-in)-(3-out)$ (антимонполю $\bar{\mu}$ с зарядом $-2Q$). Такие монополи и антимонполю могут перемещаться в спиновом льде на пирохлорной решетке за счет переверачивания некоторых спинов, оставляя след из перевернутых спинов, но вследствие присущего состоянию спинового льда спинового беспорядка, такие струны не обладают жесткостью (энергия не растет линейно с длиной струны, как в случае состояния с дальним порядком), т.е. между такими объектами отсутствует притяжение, поэтому монополи и антимонполю могут существовать в кристалле как независимые возбуждения.

Это относится к магнитным степеням свободы в таких системах. Однако в рамках подхода, описанного в предыдущем разделе [см. выражение (4)], можно показать, что в этом случае с каждым магнитным монополю будет связан электрический диполь [46]. Действительно, из выражения (4) следует, что для обычных состояний спинового льда $(2-in)-(2-out)$ [а также для состояний $(4-in)$ или $(4-out)$] суммарный дипольный момент отсутствует. Но из этого же выражения сразу видно, что в монополях и антимонполях будет ненулевой электрический дипольный момент (жирная зеленая стрелка), направленный в сторону «выделенного» спина (красная стрелка на рис. 3 — спин наружу в монополе, спин внутрь в антимонполе). (Поскольку выражение (4) является четным по спинам, переверт всех спинов при переходе от монополя к антимонполю не меняет направление диполя.) Такие электрические диполю на каждом магнитном монополе в обычном спиновом льде оказываются случайными и динамическими и вносят дополнительную электрическую активность в состояние с монополями. Такие

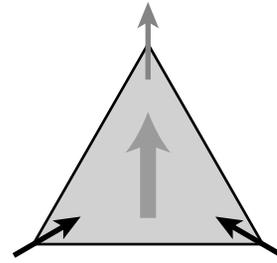


Рис. 4. Возникновение электрического диполя на магнитном треугольнике, из которых образованы кагоме-системы с состоянием спинового льда

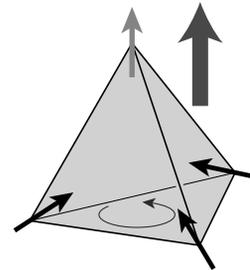


Рис. 5. Спонтанный ток (тонкая круговая стрелка) и соответствующий орбитальный момент (жирная голубая стрелка) на магнитном монополе в пирохлорном спиновом льде. Поскольку выражение (6) нечетно по спинам, токи и орбитальные моменты в монополях и антимонполях направлены в разные стороны, в отличие от электрических диполей

диполю и их следствия действительно наблюдались экспериментально в $Dy_2Ti_2O_7$ и $Tb_2Ti_2O_7$ [47, 48]. В сильном магнитном поле $\mathbf{H} \parallel [111]$ на каждом узле спинового льда появляются упорядоченные монополи и антимонполю, и, соответственно, дипольные моменты на каждом тетраэдре будут упорядочены антисегнетоэлектрическим образом [46].

Аналогичный эффект должен существовать и в спиновом льде на решетке кагоме (рис. 4). В отличие от пирохлоров, здесь монополюльная $[(2-in)-(1-out)]$ или антимонполюльная $[(1-in)-(2-out)]$ конфигурации существуют на каждом треугольнике уже в основном состоянии. Поэтому из уравнения (4) следует, что на каждом треугольнике существуют электрические диполю. В реальном основном состоянии спинового льда спиновые конфигурации, то есть в данном случае монополи и антимонполю, являются случайными, поэтому связанные с ними диполю также будут случайными и флуктуирующими.

С помощью уравнений (5), (6) можно показать, что на магнитных монополях в пирохлорном спиновом льде также существуют спонтанные токи и орбитальные моменты (рис. 5). В состоянии спинового

льда с возбужденными монополями они являются случайными и динамическими. [Следует отметить, что в отличие от диполей, токи также существуют в тетраэдрах с обычной спиновой конфигурацией (2-in)–(2-out)].

5. ФРАГМЕНТИРОВАННЫЙ МОМЕНТ И ДИПОЛИ

Интересным поворотом в этой истории является сделанное недавно предположение [49] о том, что в спиновом льде может существовать новое состояние с фрагментированными спинами или магнитными моментами. Эта идея основана на разложении Гельмгольца намагниченности на безвихревую и бездивергентную компоненты, первая из которых фактически описывает распределение магнитных монополей — источников магнитного поля в системе.

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \mathbf{M}_{\text{mono}} + \mathbf{M}_{\text{ice}} = -\nabla\rho + \text{curl } \mathbf{A}, \quad (7)$$

где $\rho(\mathbf{r})$ — плотность магнитных зарядов («монополей»), а второе слагаемое представляет собой бездивергентную часть намагниченности, соответствующую исходной конфигурации спинового льда с состоянием (2-in)–(2-out) с нулевым полным магнитным зарядом на каждом тетраэдре. (Естественно, разложение (7) не противоречит уравнениям Максвелла, в частности $\text{div } \mathbf{B} = 0$, так как $\mathbf{B} = \mathbf{H} + 4\pi\mathbf{M}$ и $\text{div } \mathbf{H} = -4\pi \text{div } \mathbf{M}$, см., например, работу [50].) При этом наиболее интересной особенностью является возможность существования нетривиального частично упорядоченного состояния, в котором монополи и антимонполи существуют и полностью упорядочены в основном состоянии, тогда как сами спины по-прежнему разупорядочены (см. рис. 6 для спинового льда на решетке кагоме с фрагментированными моментами [51, 52]).

Возникает вопрос, что станет с дипольной электрической активностью в таком состоянии. Можно показать [53], что в таких состояниях диполи будут по-прежнему существовать, но не в свободном виде, а всегда объединенными в пары $(\mathbf{d}, -\mathbf{d})$ (рис. 6). Таким образом, переход в состояние с фрагментированными моментами приводит к уменьшению электрической активности, например, микроволнового поглощения. Спонтанные токи и соответствующие орбитальные моменты на монополях также объединяются, в данном случае в пары (\mathbf{L}, \mathbf{L}) с параллельными орбитальными моментами \mathbf{L} [53].

Существенной особенностью состояния с фрагментированными моментами в спиновом льде явля-

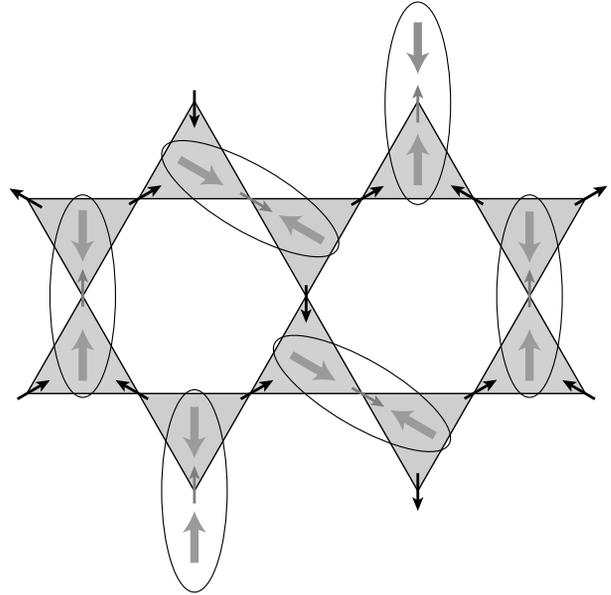


Рис. 6. Спиновый лед на решетке кагоме с фрагментированным моментом. В спиновом льде на пирохлорной решетке такое состояние выглядит аналогично [49, 53]. Электрические диполи также показаны жирными зелеными стрелками

ется сосуществование в одной спиновой системе как упорядоченных (монополи), так и неупорядоченных (сами спины) компонент. Столь необычная ситуация определяет также необычные свойства дефектов и доменных границ в этих системах. В любом упорядоченном состоянии необходимо учитывать дефекты или возбуждения, нарушающие идеальный порядок, а также возникновение доменов и доменных стенок [54]. В данном случае можно также создавать точечные дефекты разных типов, например, «обратный» монополь, т. е. заменять антимонполь на монополь, или возбуждения нового типа, такие как состояние с тремя спинами внутрь («супермонополь» с магнитным зарядом $3Q$ внутри треугольника) в спиновом льде на решетке кагоме, в котором на каждом треугольнике есть монополи и антимонполи (с зарядами $\pm Q$) в упорядоченном состоянии с фрагментированными моментами. Можно также формировать доменные стенки в двухподрешеточном упорядоченном состоянии $\mu-\bar{\mu}$ (такие как доменные стенки в антиферромагнетике). При этом все подобные дефекты или текстуры сосуществуют с сохранившимся спиновым беспорядком!

Можно показать, что такие дефекты или доменные стенки также могут изменять электрические свойства. На первый взгляд может показаться, что каждый такой дефект приводит к образованию сво-

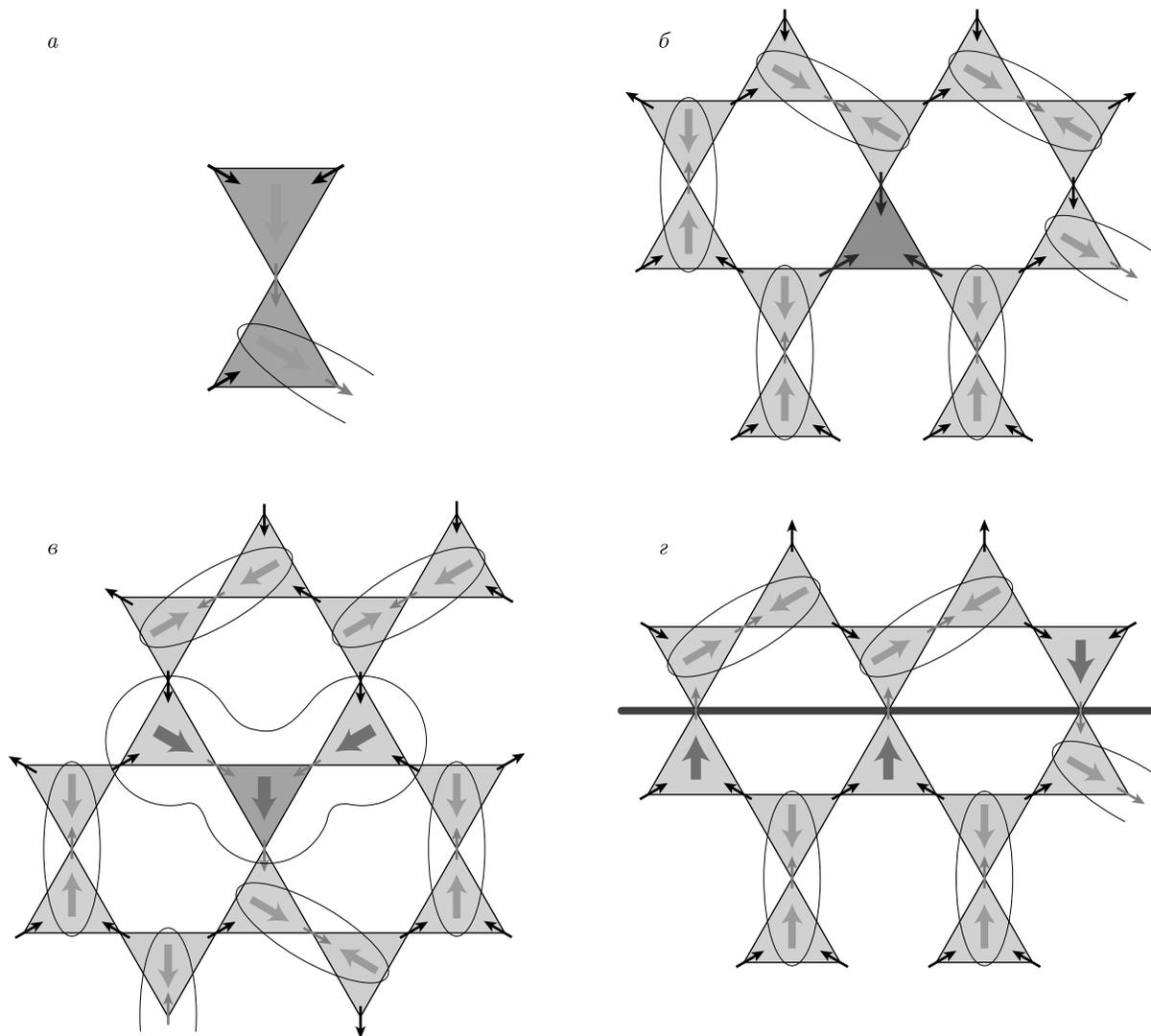


Рис. 7. Электрические диполи на дефектах в состоянии спинового льда с фрагментированными моментами на решетке кагоме (в пирохлорах ситуация аналогична) [53]. *a* — Типичная ситуация для дефектов и доменных стенок: видно, что как минимум в одном из двух соседних треугольников с монополями имеется непарный диполь. *б* — «Супермонополярный» дефект (треугольник с тремя спинами внутрь). Путем перестановки спинов можно убрать непарные диполи. *в* — Образование непарных диполей при замене антимонополя на монополяр. *г* — Один из типов доменной стенки в состоянии с упорядоченными монополями, на которой возникают непарные диполи

бодных диполей: в состоянии с фрагментированными моментами диполи объединяются в пары ($\mathbf{d}, -\mathbf{d}$), дефекты удаляют из пары один диполь, а второй остается непарным. Но на самом деле это не всегда так. Например, «супермонополяр» (состояние с тремя спинами внутрь на треугольнике в спиновом льде на решетке кагоме или с четырьмя спинами внутрь на тетраэдре в пирохлоре) не может создать такие свободные диполи: используя оставшуюся свободу спинов, можно «переставить» их таким образом, что свободные диполи исчезают, см. рис. 7б. Но другие

типы дефектов, например замена μ на $\bar{\mu}$, обязательно приводят к образованию непарных диполей (даже сразу трех в спиновом льде на решетке кагоме, рис. 7в, и четырех в пирохлорах). Типичная конфигурация таких дефектов представляет собой пару соседних монополей, см. рис. 7а. Видно, что в таком случае должен возникнуть хотя бы один непарный диполь, что приводит к появлению непарных диполей на дефекте, изображенном на рис. 7в. Непарные диполи могут также возникать на доменных стенках различного типа, см., например, рис. 7г. Вероятно,

это можно использовать для управления, ориентирования и перемещения таких дефектов или доменных стенок с помощью (неоднородного) электрического поля, что потенциально может быть полезно для некоторых приложений.

6. ДИПОЛИ И МАГНИТНЫЕ ТЕКСТУРЫ В ОБЫЧНЫХ МАГНЕТИКАХ: ДОМЕННЫЕ СТЕНКИ, СКРМИОНЫ И Т. Д.

При рассмотрении мультиферроиков мы видели, что в определенных спиновых конфигурациях, например, циклоидных, должны возникать электрические диполи или поляризация, см. рис. 1а. Но такая же локальная спиновая конфигурация может существовать во многих других ситуациях, например, в доменных стенках неелевского типа в обычных ферромагнетиках (см. рис. 8). Магнитную структура такой доменной стенки можно представить в виде части циклоиды, т. е. согласно выражению (1) она также должна иметь отличную от нуля электрическую поляризацию [35]. Следовательно, можно подумать о воздействии на такие доменные стенки электрическим полем, что было предложено в работе [14]. Такая же идея возникла ранее у группы авторов из Московского университета, которые провели соответствующие эксперименты [55]. Используя пленки обычного магнитного граната, хорошего ферромагнитного изолятора с температурой T_c выше комнатной, авторам этой работы удалось наблюдать движение неелевских доменных стенок при приложении к образцу неоднородного электрического поля, просто создаваемого импульсом напряжения в заостренной медной проволоке, расположенной вблизи пленки (см. рис. 9): электрические диполи, существующие на неелевских доменных стенках, притягивались в область более сильного электрического поля вблизи острия. Этот идейно простой, но красивый эксперимент подтверждает основные физические идеи, впервые разработанные при изучении мультиферроиков, что теперь может быть использовано во многих других случаях.

На основе тех же физических принципов взаимосвязи магнитных и электрических степеней свободы в некоторых магнитных текстурах можно также объяснить эксперимент по созданию спиральных магнитных структур в тонких магнитных слоях на поверхности немагнитных металлов. Было обнаружено, что магнитная структура монослоя марганца на поверхности вольфрама оказывается циклоидальной вместо ожидаемой коллинеарной [56].

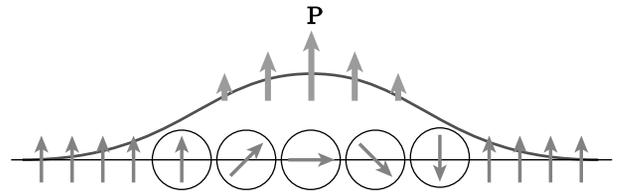


Рис. 8. Электрические диполи на неелевской доменной стенке в ферромагнетике

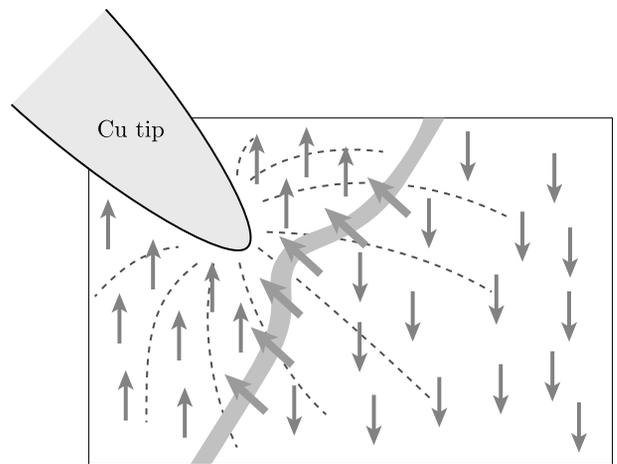


Рис. 9. Схема эксперимента из работы [55], показывающего движение доменной стенки неелевского типа в обычном ферромагнитном диэлектрике при приложении импульса напряжения, создающего неоднородное электрическое поле в образце. Красными стрелками показаны спины, жирные зеленые стрелки — электрические диполи на доменной стенке

Этот эффект был объяснен в работе [57] в рамках микроскопического подхода с учетом взаимодействия Дзялошинского–Мория, которое должно присутствовать на поверхности, которая, естественно, нарушает инверсию. Однако качественно этот эффект очень просто объясняется за счет того же механизма, что и возникновение электрической поляризации в циклоидальных структурах. Как показано на рис. 1а, циклоидальная структура приводит к возникновению электрической поляризации, направленной в плоскости циклоиды перпендикулярно ее направлению. Обратное, если в системе существует собственная поляризация или собственное электрическое поле, это приводит к образованию циклоидальной магнитной структуры. Такое электрическое поле всегда существует на поверхности металла из-за двойного слоя или перепада потенциала (работы выхода). Поэтому можно ожидать, что вместо коллинеарной магнитной структуры в этом случае возникнет циклоидальная структура с опре-

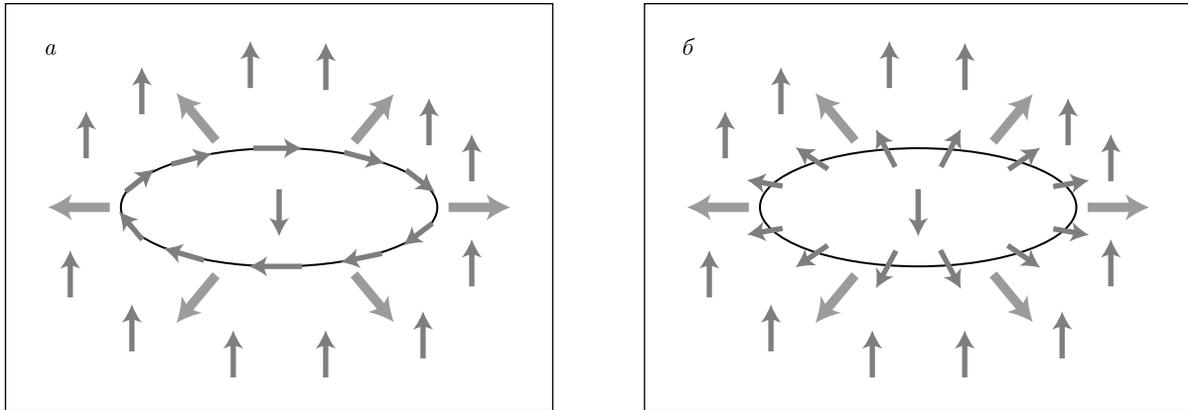


Рис. 10. Электрические диполи на скирмионах. Считается, что в объеме спины направлены вверх, а в центре скирмиона вниз. По мере приближения к центру спины (красные стрелки) поворачиваются таким образом, что на некоторой «средней» окружности оказываются в плоскости xy : *a* — блоховский скирмион, *б* — неелевский скирмион. Из выражения (1) следует, что в обоих случаях возникают радиальные электрические диполи (жирные зеленые стрелки)

деленным направлением вращения спинов. Именно это наблюдалось в работе [56]. Такое вращение спина связано с проигрышем в энергии анизотропии, поэтому слишком сильная анизотропия, например, легкоплоскостная (которая часто имеет место в магнитных пленках) может подавлять образование циклоид. Однако если анизотропия не слишком сильна, образование циклоид становится возможным. Помимо магнитных спиралей в подобных случаях могут возникать магнитные скирмионы, которые наблюдались в двойном слое железа на иридии [58].

Еще один интересный эффект на основе тех же физических принципов был обнаружен при приложении к системе неоднородного электрического поля. По сути этот эксперимент аналогичен описанному выше эксперименту группы МГУ. В работе [59] (см. также [60]) было обнаружено, что скирмионы можно создавать при помощи иглы туннельного микроскопа под электрическим напряжением, причем только при одной полярности. По крайней мере качественно это наблюдение можно снова объяснить описанным выше физическим механизмом. Существует два типа скирмионов: в одних спины вращаются как в блоховских доменных стенках, так что в середине скирмиона они направлены вдоль окружности, см. рис. 10*a*, а в других — как в неелевских доменных стенках, и тогда спины на «средней» окружности направлены от центра или к центру, см. рис. 10*б*. Используя выражение (1), можно показать [61], что в таких текстурах будут появляться локальные электрические диполи, причем в обоих случаях диполи будут направлены радиально (зе-

леные стрелки на рис. 10). (Для неелевских скирмионов также должна возникать полная поляризация, перпендикулярная плоскости скирмиона.) При приложении напряжения к наконечнику создается неоднородное электрическое поле. Его радиальная составляющая будет взаимодействовать с радиальными диполями скирмионов и, в зависимости от полярности, приведет либо к выигрышу, либо к проигрышу в энергии. Поэтому действительно можно ожидать, что поле одной полярности стабилизирует скирмионы под иглой, а поле противоположной полярности препятствует их возникновению. Эта простая картина может объяснить экспериментальное наблюдение [58].

7. ДИПОЛИ НА СПИНОВЫХ ВОЛНАХ

С помощью использованного в предыдущем разделе подхода можно также предсказать нетривиальный эффект даже для обычных спиновых волн в ферромагнетиках. Боголюбов давно задавался вопросом [62], существует ли какой-нибудь нетривиальный электрический эффект, обусловленный спиновыми волнами. Он фактически рассмотрел то, что позже стало известно как модель Хаббарда, и применил ее по теории возмущений, предвосхищая, в частности, гораздо более позднюю трактовку сверхобмена Андерсоном, Гуденафом и другими. Далее он задал вопрос, могут ли магны (если рассматривать их не в чисто магнитных моделях, а вернуться к первоначальному электронному описанию) нести небольшой электрический заряд. В некотором смыс-

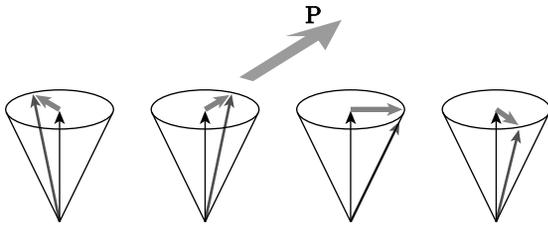


Рис. 11. Возникновение электрического диполя на магноне в ферромагнетике

ле рассмотрение в работе [38] по духу напоминает этот старый подход Боголюбова. Его вывод оказался несколько двусмысленным: он не получил никакого реального тока, переносимого магнонами, но в его результатах фактически содержались выражения, эквивалентные токам из-за спиновой киральности. Недавно аналогичный вопрос был рассмотрен в работе [63] для конкретного случая с токами сдвига в мультиферроиках. Было получено, что в определенных ситуациях на магнонах действительно могут существовать нетривиальные электрические эффекты.

Используя описанный выше подход, в частности, выражение (1) для электрической поляризации скошенных спинов, можно привести соображения, что обычные спиновые волны, например, в ферромагнетиках будут обладать электрической активностью, однако они будут нести не электрический заряд, а электрические диполи [11]. В самом деле, квазиклассическое представление магнона, мгновенный снимок которого показан на рис. 11, состоит в том, что спины слегка отклонены от направления средней намагниченности z и прецессируют вокруг него, причем в спиновой волне эта структура «движется» с определенной скоростью.

Если посмотреть на структуру, изображенную на рис. 11, сразу становится понятно, что в то время как z -компонента намагниченности постоянна (и лишь немного меньше M_{\max}), перпендикулярные x y -компоненты намагниченности образуют в точности такую циклоиду, как на рис. 1! Поэтому из того же выражения (1) можно ожидать появления электрических диполей на обычных спиновых волнах, изображенных на рис. 11. Если создать пакет спиновых волн, то при движении в образце он будет переносить не только намагниченность, но и перпендикулярный электрический диполь. Трудно представить, какие экспериментальные проявления можно ожидать от наличия таких диполей; возможно, они могут вносить вклад, например, в рамановское рассеяние света на магнонах за счет изменения правил

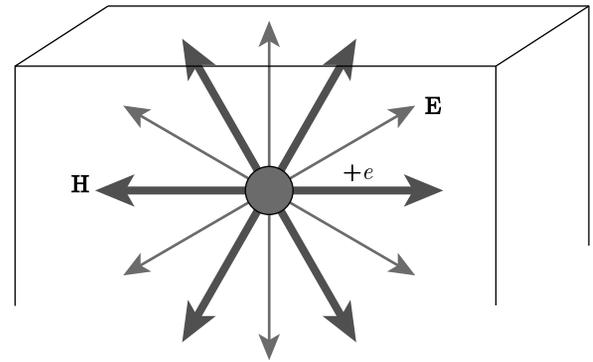


Рис. 12. Образование магнитного монополя (радиального магнитного поля) на заряде в магнитоэлектрическом материале (с ненулевыми диагональными компонентами магнитоэлектрического тензора α_{ij})

отбора или могут привести к некоторым другим подобным эффектам.

8. МОНОПОЛИ НА ЗАРЯДАХ В МАГНИТОЭЛЕКТРИКАХ

В предыдущих разделах мы обсудили несколько случаев, в которых определенные магнитные текстуры приводят к возникновению электрических диполей или токов. Однако существует и обратный эффект: в некоторых случаях электрические заряды могут вызывать магнитный отклик и, в частности, приводить к образованию магнитных монополей [16, 64]. Это происходит в магнитоэлектриках. Действительно, рассмотрим магнитоэлектрик с диагональным магнитоэлектрическим тензором α_{ij} . Заряд, помещенный в такой материал, создает радиальное электрическое поле, но из-за магнитоэлектрического эффекта также появится намагниченность

$$M_i = \sum_j \alpha_{ij} E_j. \quad (8)$$

В случае диагонального магнитоэлектрического тензора α_{ij} эта намагниченность также окажется радиальной и будет иметь форму эллипсоида. Из того же разложения Гельмгольца (7) видно, что она будет иметь безвихревую компоненту (сферическую часть моментов, показанную на рис. 12), и бездивергентную компоненту квадрупольного вида. Первая компонента эквивалентна наличию магнитного монополя на месте пробного заряда.

Существование таких монополей может привести к ряду нетривиальных последствий, в частности для транспортных свойств таких систем [64].

Можно также обнаружить экспериментально измеримые эффекты путем размещения и передвижения зарядов над поверхностью таких магнитоэлектриков. Зеркальный заряд, создаваемый при этом внутри магнитоэлектрика, приведет к образованию магнитного монополя, магнитное поле которого вне образца может быть измерено экспериментально. Такие измерения, подтвердившие данную картину, были выполнены недавно в работе [17], соавтором которой является И. Е. Дзялошинский.

В заключение можно сказать, что в различных магнитных текстурах действительно существуют разнообразные и очень интересные электрические эффекты. Это еще одно проявление нетривиального взаимодействия магнитных и электрических степеней свободы в твердых телах, открытого Дзялошинским более 50 лет назад, но до сих пор преподносящего все новые и новые сюрпризы.

Благодарности. Я благодарен многим коллегам, с которыми долгое время сотрудничал по вопросам, обсуждаемым в этой статье.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG, Немецкий исследовательский фонд), проект № 277146847–CRC 1238.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Ziese, M. J. Thornton, Eds., "Spin Electronics", Lecture Notes in Physics, v. 569, Springer, Heidelberg–Berlin (2001).
2. I. Zutic and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
3. I. Dzyaloshinskii, *J. Phys. Chem. Sol.* **4**, 41 (1958).
4. I. E. Dzyaloshinskii, *Sov. Phys. JETP* **10**, 628 (1959).
5. M. Fiebig, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **38**, R123 (2005).
6. D. I. Khomskii, *J. Magn. Magn. Mater.* **306**, 1 (2006).
7. W. Ehrenstein, N. Mazur, and J. Scott, *Nature* **442**, 759 (2006).
8. S.-W. Cheong and M. Mostovoy, *Nat. Mater.* **6**, 1 (2007).
9. R. Ramesh and N. A. Spaldin, *Nat. Mater.* **6**, 21 (2007).
10. Special issue of *J. Phys. Condens. Matter* **20**, 434201 (2008).
11. D. I. Khomskii, *Physics (Trends)* **2**, 20 (2009).
12. K. F. Wang, J.-M. Liu, and Z. F. Ren, *Adv. in Physics* **58**, 321 (2009).
13. N. A. Spaldin and R. Ramesh, *Nat. Mater.* **18**, 203 (2019).
14. I. Dzyaloshinskii, *Europhys. Lett.* **83**, 67001 (2008).
15. I. Dzyaloshinskii, *Europhys. Lett.* **96**, 17001 (2011).
16. M. Fechner, N. A. Spaldin, and I. E. Dzyaloshinskii, *Phys. Rev. B* **89**, 184415 (2014).
17. Q. N. Meier, M. Fechner, T. Nozaki et al., *Phys. Rev. X* **9**, 011011 (2019).
18. P. Curie, *J. Phys. Theor. Appl.* **3**, 393 (1894).
19. L. D. Landau and E. M. Lifshits, *Electrodynamics of Continuous Media*, Fizmatlit, Moscow (2001) (in Russian).
20. D. N. Astrov, *Sov. Phys. JETP* **11**, 708 (1969).
21. H. Schmid, *Ferroelectrics* **162**, 317 (1994).
22. G. A. Smolenskii and I. E. Chupis, *Sov. Phys. Usp.* **25**, 475 (1982).
23. Y. N. Venetsev and V. V. Gagulin, *Ferroelectrics* **162**, 23 (2994).
24. N. A. Hill and K. M. Rabe, *Phys. Rev. B* **59**, 8759 (1999).
25. *Bull. Amer. Phys. Soc., Section C* **21** (2001).
26. T. Kimura et al., *Nature* **426**, 55 (2003).
27. N. Hur et al., *Nature* **429**, 392 (2004).
28. J. Wang et al., *Science* **299**, 1719 (2003).
29. D. I. Khomskii, *Transition Metal Compounds*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2014).
30. *Multiferroic Materials: Properties, Techniques and Applications*, ed. by Juling Wang, CRC Press, Taylor and Francis Group, Boca Raton–London–New York (2016–2017).
31. J. van den Brink and D. I. Khomskii, *J. Phys. Condens. Matter* **20**, 434217 (2008).
32. Y. Tokura, Sh. Seki, and N. Nagaosa, *Rep. Prog. Phys.* **77**, 076501 (2014).
33. R. Ono, S. Nikolaev, and I. Solovyev, *Phys. Rev. B* **102**, 064422 (2020).
34. H. Katsura, N. Nagaosa, and A. V. Balatsky, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 057205 (2005).

35. M. V. Mostovoy, Phys. Rev. Lett. **96**, 067601 (2006).
36. I. A. Sergienko, C. Sen, and E. Dagotto, Phys. Rev. Lett. **97**, 227204 (2006).
37. T. Moriya, Phys. Rev. **120**, 91 (1960).
38. L. N. Bulaevskii, C. D. Batista, M. V. Mostovoy, and D. I. Khomskii, Phys. Rev. B **78**, 028402 (2008).
39. D. I. Khomskii, J. Phys. Cond. Matter **22**, 164209 (2010).
40. Y. Taguchi, Y. Oohara, H. Yoshizawa, N. Nagaosa, and Y. Tokura, Science **291**, 2573 (2001).
41. I. A. Ryzhkin, J. Exp. Theor. Phys. **101**, 481 (2005).
42. C. Castelnovo, R. Moessner, and S. L. Sondhi, Nature **451**, 42 (2008).
43. D. J. P. Morris et al., Science **326**, 411 (2009).
44. T. Fennel et al., Science **326**, 415 (2009).
45. E. Mengotti et al., Nat. Phys. **7**, 68 (2010).
46. D. I. Khomskii, Nat. Commun. **3**, 904 (2012).
47. C. P. Grams, M. Valldor, M. Garst, and J. Hemberger, Nat. Commun. **5**, 4853 (2014).
48. F. Jin, C. Liu, A. Zhang, X. Wang, X. G. Chen, X. Sun, and Q. Zhang, Phys. Rev. Lett. **124**, 087601 (2020).
49. M. E. Brooks-Bartlett, S. T. Banks, L. D. C. Jaubert, A. Harman-Clarke, and P. C. W. Holdsworth, Phys. Rev. X **4**, 011007 (2014).
50. S. T. Bramwell, Phil. Trans. R. Soc. A **370**, 5738 (2012).
51. G. Moller and R. Moessner, Phys. Rev. B **80**, 140409(R) (2009).
52. G.-W. Chern, P. Mellado, and O. Tchernyshyov, Phys. Rev. Lett. **106**, 207202 (2011).
53. D. I. Khomskii, arXiv:2010.11149 (2020).
54. D. I. Khomskii, *Basic Aspects of the Quantum Theory of Solids: Order and Elementary Excitations*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2010).
55. A. S. Logginov et al., JETP Lett. **86**, 115 (2007); Appl. Phys. Lett. **93**, 182510 (2008).
56. M. Bode et al., Nature **447**, 190 (2007).
57. P. Ferriani et al., Phys. Rev. Lett. **101**, 027201 (2008).
58. J. Sassmannshausen, A. Kubetzka, P.-J. Hsu, K. von Bergmann, and R. Wiesendanger, Phys. Rev. B **98**, 144443 (2018).
59. P.-J. Hsu et al., Nat. Nanotechnol. **12**, 123 (2017).
60. A. Rosch, Nat. Nanotechnol. **12**, 103 (2017).
61. K. T. Delaney, M. Mostovoy, and N. A. Spaldin, Phys. Rev. Lett. **102**, 157203 (2009).
62. N. N. Bogoliubov, Lectures on quantum statistics, Vol. 1, Gordon and Breach, New York–London–Paris (1967).
63. T. Morimoto and N. Nagaosa, Phys. Rev. B **100**, 235138 (2019).
64. D. I. Khomskii, Nat. Commun. **5**, 4793 (2014).

ANALOGY BETWEEN THE MAGNETIC DIPOLE MOMENT AT THE SURFACE OF A MAGNETOELECTRIC AND THE ELECTRIC CHARGE AT THE SURFACE OF A FERROELECTRIC

N. A. Spaldin^{*}

*Department of Materials, ETH Zurich
CH-8093, Zürich, Switzerland*

Received November 29, 2020,
revised version December 21, 2020
Accepted for publication December 21, 2020

Contribution for the JETP special issue in honor of I. E. Dzyaloshinskii's 90th birthday

DOI: 10.31857/S0044451021040027

In a linear magnetoelectric material, an applied electric field induces a magnetization linearly proportional to the field strength, and an applied magnetic field induces a corresponding linear electric polarization. The first mention of the phenomenon, to our knowledge, is in the original 1958 edition of the classic *Electrodynamics of Continuous Media* by Landau and Lifshitz [1], with the brief statement that an effect resulting from a linear relation between the magnetic and electric fields in a substance is possible in principle. Soon after, Dzyaloshinskii proved using symmetry arguments that the behavior should occur in chromia, Cr₂O₃ [2]. This was then the material of choice for the first experimental demonstration of the linear magnetoelectric effect by Astrov [3].

A symmetry requirement for the existence of a linear magnetoelectric response is that both time-reversal, T , and space-inversion, P , symmetries are broken. This condition is the same as that for a non-zero magnetoelectric multipole tensor, $\mathcal{M}_{ij} = \int r_i \mu_j(\mathbf{r}) d^3r$, which is the second order coefficient in the multipole expansion of the energy of a spatially varying magnetization, $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{r})$, in a spatially varying magnetic field, $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ [4–6]:

$$\begin{aligned} \text{Energy} &= - \int \boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}(\mathbf{r}) d^3r = \\ &= - \int \boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{H}(0) d^3r - \\ &\quad - \int r_i \mu_j(\mathbf{r}) \partial_i H_j(0) d^3r - \dots \quad (1) \end{aligned}$$

Here, the expansion in powers of the field gradients is calculated at some arbitrary reference point $\mathbf{r} = 0$, and i, j are Cartesian directions with summation over repeated indices implied. The usual magnetic dipole moment, $\mathbf{m} = \int \boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}) d^3r$ appears in the first term of the expansion of Eq. (1); the \mathcal{M}_{ij} tensor appears in the second term. When appropriately normalized by the volume in the case of bulk, periodic systems we will call it the magnetoelectric multipolization, by analogy with the magnetization or polarization. It provides a bulk, thermodynamic quantity associated with “magnetoelectricness”, complementing the usual definition of magnetoelectricity as a response function.

One scenario in which this thermodynamic aspect manifests, which was pointed out by Dzyaloshinskii in 1992 [7], is in the power-law decay of the external magnetic field around an antiferromagnetic material with a net non-zero magnetoelectric multipolization. Power-law behavior is fundamentally different from the exponential field decay expected around a conventional centro- or time-reversal symmetric antiferromagnet [7]. In the particular case of the prototypical magnetoelectric Cr₂O₃, which is uniaxial and has non-zero magnetoelectric multipolization below its Néel temperature, Dzyaloshinskii showed that the external field should have the angular form of a magnetic quadrupole. As in

^{*} E-mail: nicola.spaldin@mat.ethz.ch

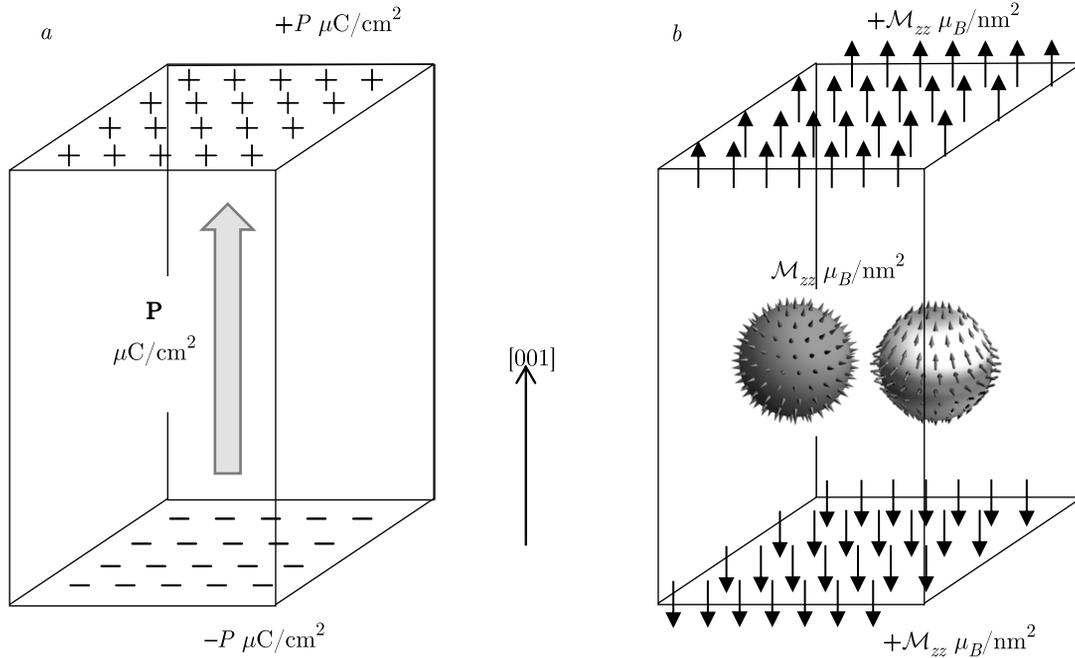


Fig. 1. *a)* Surface charge associated with ferroelectric polarization, P . *b)* Surface magnetic dipole moment associated with magnetolectric multipolization, M_{zz} , which can be represented as the sum of a magnetolectric monopole and z^2 quadrupole. The $-$ signs, $+$ signs and small black arrows on the surfaces indicate negative charge, positive charge and magnetic dipole moments. The ferroelectric has negative charge on its lower surface and positive charge on its upper surface; the magnetolectric has positive magnetic dipole moments (pointing outwards from the sample) on both its upper and lower surfaces

the case of the original magnetolectric response prediction, this was subsequently confirmed by Astrov [8, 9], although the measured field strength was smaller in magnitude than predicted. The intrinsic bulk nature of the measured external field dependence was subsequently questioned, however, when it was pointed out that any antiferromagnet can in principle have a surface magnetization that, depending on the sample shape and choice of surface termination, could give rise to a magnetic field [10]. The discussion was further enriched by recent theoretical demonstrations that certain surfaces of a magnetolectric antiferromagnet will always have a surface magnetization [11] and associated external magnetic field [12] as a consequence of the bulk magnetolectric multipolization.

In this paper, we revisit Dzyaloshinskii’s pioneering work on the linear magnetolectric effect in light of the modern theory of ferroelectric polarization, and approach the description of the surface magnetism of magnetolectric antiferromagnets by making a correspondence with the surfaces of ferroelectrics. We show that the surface magnetic dipole moment associated with magnetolectric materials is analogous to the bound surface charge in ferroelectrics, in that it can

be conveniently described in terms of the bulk magnetolectric multipolization that is analogous to the ferroelectric polarization. We define the intrinsic surface magnetization to be this surface magnetic dipole moment per unit area, and provide a convenient recipe for extracting it for any surface plane, from knowledge of the bulk magnetic order. We demonstrate the procedure for the prototypical magnetolectric material, Cr_2O_3 , in which Dzyaloshinskii first identified the linear magnetolectric effect, and compare the value of the intrinsic surface magnetization to recent experimental measurements. Finally, we show that the description is also relevant for non-magnetolectric antiferromagnets, allowing a classification into one of two types with fundamentally different surface magnetic properties: the trivial case, in which the allowed magnetolectric multipolization values contains zero, and non-trivial antiferromagnets whose magnetolectric multipolization is non-zero, in spite of their not being magnetolectric.

From a quick glance at the units of electric polarization, which are dipole moment per unit volume or equivalently charge per unit area, it is clear that a surface perpendicular to the polarization direction in a ferroelectric material carries a bound charge per unit

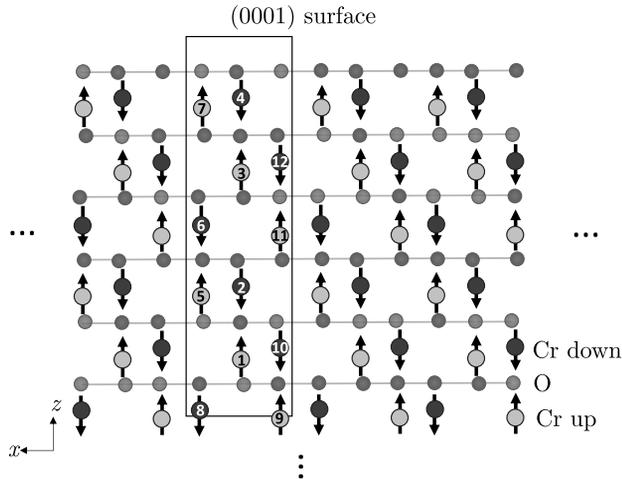


Fig. 2. (Color online) A semi-infinite slab of Cr_2O_3 with a (0001) surface, shown projected down the y axis. Cr and O ions are shown in blue and red respectively, and the arrows indicate the directions of the local magnetic moments on the Cr ions. The symbol ... (black dots) indicate continuation of the structure. The black rectangle shows a choice of hexagonal unit cell, which, in combination with the numbered Cr ions, can be periodically repeated to tile the slab

area equal to the value of the polarization, with the sign of the surface charge given by the direction of polarization, as shown in Fig. 1a. (For a rigorous derivation see Ref. [13].)

While the ferroelectric polarization has units of charge per unit area, the magnetoelectric multipolization, or magnetoelectric multipole per unit volume, has units of magnetic dipole moment per unit area. Therefore, by analogy with the ferroelectric case, the surface of a magnetoelectric should have a magnetic dipole moment per unit area, whose size and orientation depends on the bulk magnetoelectric multipolization. We refer to this as the intrinsic surface magnetization, since it results from a bulk property of the material; it is this surface magnetization that was discussed in Ref. [11]. In Fig. 1b we illustrate the analogy with ferroelectricity for the case of a uniaxial magnetoelectric such as Cr_2O_3 in which the \mathcal{M}_{zz} component of the magnetoelectric multipolization tensor (which can be decomposed into the magnetoelectric monopolar and z^2 quadrupolar contributions shown) is non-zero. The \mathcal{M}_{zz} component results in a z -oriented magnetic moment pointing away from the sample on the (001) and (00 $\bar{1}$) surfaces in this example.

Our procedure for extracting the surface magnetization of a semi-infinite slab of an antiferromagnet from its bulk magnetoelectric multipolization follows that for determining the surface charge from the bulk ferro-

electric polarization [14, 15]. For a particular choice of surface plane orientation and atomic termination, we identify the unit cell that tiles the semi-infinite slab; an example for the (0001) surface of Cr_2O_3 is shown in Fig. 2. We then calculate the magnetoelectric multipole of that unit cell, and normalize it to the unit cell volume; by analogy with the ferroelectric case we call this \mathcal{M}^{bulk} . For the illustrated surface, domain and unit cell of Cr_2O_3 , only \mathcal{M}_{zz}^{bulk} is non-zero, and it has the value $-2.35\mu_B/\text{nm}^2$ (taking the atomic positions and lattice parameters from Ref. [16]). The surface magnetic dipole per unit area, which we define to be the intrinsic surface magnetization, can then be read off directly from the i, j components of the \mathcal{M}^{bulk} tensor, with the first index, i , indicating the x, y or z orientation of the surface magnetic dipole moments at the surface plane normal to the second index, j . For the case of Cr_2O_3 both (0001) surfaces shown have a surface magnetization of $2.35\mu_B/\text{nm}^2$ pointing into the sample.

In the full manuscript, the procedure is also applied to calculation of the interfacial magnetism in heterostructures of $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{Cr}_2\text{O}_3$, and to model non-magnetoelectric systems.

Summary and outlook. In summary, we reviewed the phenomenology of magnetoelectric multipolization in bulk, periodic solids, and provided an analogy with various aspects of the ferroelectric polarization. We showed that the analogy provides a particularly convenient picture of the surface magnetization that is associated with magnetoelectric materials [10, 11], and we provided the following straightforward recipe to extract it from the bulk magnetoelectric multipolization for a given surface plane:

- 1) for the surface plane and chemistry of interest, identify the unit cell and ionic basis that tiles a semi-infinite slab of the system;
- 2) calculate the components of the bulk magnetoelectric multipolization, \mathcal{M}_{ij}^{bulk} , using this unit cell and basis of ions, and normalizing it to the unit cell volume;
- 3) the non-zero components of \mathcal{M}_{ij}^{bulk} that have a contribution normal to the surface plane then give directly the size and orientation of the intrinsic surface magnetization.

We argued that such an intrinsic surface magnetization is possible even at the surface or interface of a non-magnetoelectric material, and distinguished two cases: In non-magnetoelectric materials whose multipolization lattice contains zero it is always possible to choose a stoichiometric termination with zero magnetic moment for any choice of surface plane, although this might not necessarily be the lowest energy termina-

tion. In non-magnetoelectric materials whose multipolization lattice contains the half-multipolization increment, in contrast, surface planes exist for which an intrinsic magnetic moment can not be avoided for stoichiometric terminations.

We mentioned some phenomena for which these concepts might be relevant and which could provide interesting directions for future work. In particular, the intrinsic surface magnetization arising from the magnetoelectric multipolization could have implications for the relative stability of antiferromagnetic surfaces and interfaces, the formation of antiferromagnetic domains, and the mechanism of exchange-bias coupling. Finally, we suggested some experiments that could be used to verify or disprove our proposals, and we hope, in the spirit of Igor Dzyaloshinskii, that this manuscript motivates future experimental work in these directions.

Funding. This work was supported by the Körber Foundation, the European Research Council (ERC) under the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme grant agreement No 810451 and by the ETH Zurich.

Acknowledgments. Thanks to Igor Dzyaloshinskii for the many inspiring discussions and fruitful collaborations, and to Sayantika Bhowal, Christian Degen, Manfred Fiebig, Pietro Gambardella, Kane Shenton, Tara Tošić and Xanthe Verbeek for helpful comments on the manuscript.

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

REFERENCES

1. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics*, Pergamon Press, London (1958).
2. I. E. Dzyaloshinskii, *Sov. Phys. JETP* **10**, 628 (1960).
3. D. N. Astrov, *Sov. Phys. JETP* **11**, 708 (1960).
4. C. Ederer and N. A. Spaldin, *Phys. Rev. B* **76**, 214404 (2007).
5. N. A. Spaldin, M. Fiebig, and M. Mostovoy, *J. Phys. Condens. Matter* **20**, 434203 (2008).
6. N. A. Spaldin, M. Fechner, E. Bousquet, A. Balatsky, and L. Nordström, *Phys. Rev. B* **88**, 094429 (2013).
7. I. Dzyaloshinskii, *Sol. St. Commun.* **82**, 579 (1992).
8. D. N. Astrov and N. B. Ermakov, *JETP Lett.* **59**, 297 (1994).
9. D. N. Astrov, N. B. Ermakov, A. S. Borovik-Romanov, E. G. Kolevato, and V. I. Nizhankovskii, *JETP Lett.* **63**, 745 (1996).
10. A. F. Andreev, *JETP Lett.* **63**, 758 (1996).
11. K. D. Belashchenko, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 147204 (2010).
12. Z. Jiang, D. West, and S. Zhang, *Phys. Rev. B* **102**, 174411 (2020).
13. R. D. King-Smith and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **47**, R1651 (1993).
14. D. Vanderbilt and R. D. King-Smith, *Phys. Rev. B* **48**, 4442 (1993).
15. M. Stengel, *Phys. Rev. B* **84**, 205432 (2011).
16. M. H. Dehn, J. K. Shenton, S. Hohenstein, Q. N. Meier, D. J. Arsenau, D. L. Cortie, B. Hitti, A. C. Y. Fang, W. A. MacFarlane, R. M. L. McFadden, G. D. Morris, Z. Salman, H. Luetkens, N. A. Spaldin, M. Fechner, and R. F. Kiefl, *Phys. Rev. X* **10**, 011036 (2020).

A DZYALOSHINSKII – MORIYA INTERACTION GUIDE TO MAGNETS MICRO-WORLD

V. V. Mazurenko ^{a*}, Y. O. Kvashnin ^b, A. I. Lichtenstein ^{c,a}, M. I. Katsnelson ^{d,a}

^a *Theoretical Physics and Applied Mathematics Department, Ural Federal University
620002, Ekaterinburg, Russia*

^b *Uppsala University, Department of Physics and Astronomy, Division of Materials Theory
SE-751 20, Uppsala, Sweden*

^c *I. Institut für Theoretische Physik, Universität Hamburg
D-20355, Hamburg, Germany*

^d *Institute for Molecules and Materials, Radboud University
NL-6525, AJ Nijmegen, The Netherlands*

Received December 4, 2020,
revised version December 4, 2020
Accepted for publication December 4, 2020

Contribution for the JETP special issue in honor of I. E. Dzyaloshinskii's 90th birthday

DOI: 10.31857/S0044451021040039

Abstract. Dzyaloshinskii–Moriya interaction (DMI) represents an antisymmetric type of magnetic interactions that favour orthogonal orientation of spins and competes with Heisenberg exchange. Being introduced to explain weak ferromagnetism in antiferromagnets without an inversion center between magnetic atoms such an anisotropic interaction can be used to analyze other non-trivial magnetic structures of technological importance including spin spirals and skyrmions. Despite the fact that the corresponding DMI contribution to the magnetic energy of the system has a very compact form of the vector product of spins, the determination of DMI from first-principles electronic structure is a very challenging methodological and technical problem whose solution opens a door into the fascinating microscopic world of complex magnetic materials. In this paper we review a few such methods developed by us for calculating DMI and their applications to study the properties of real materials.

1. Introduction. In a seminal paper [1] I. E. Dzyaloshinskii has introduced a novel type of anisotropic magnetic interactions which are antisym-

metric with respect to swapping the positions of two spins. This was done based on a purely phenomenological basis. Very soon, Moriya [2] suggested the first simplified microscopic explanation of these interactions, indirect exchange and spin-orbit coupling (SOC) being the key ingredients. The Hamiltonian governing these interactions can be written in the following form:

$$\hat{H}_{DMI} = \sum_{i,j} \mathbf{D}_{ij} [\hat{\mathbf{S}}_i \times \hat{\mathbf{S}}_j], \quad (1)$$

where \mathbf{S}_i is the spin moment at the site i . Nowadays the parameter \mathbf{D}_{ij} , which is, by construction, an axial vector, is known as Dzyaloshinskii – Moriya interaction.

“Slow is the experience of all deep fountains: long have they to wait until they know what has fallen into their depths.” (F. Nietzsche).

Whereas the first decades DMI were considered as more or less marginal subject in magnetism (with the only exception of the phenomenon of weak ferromagnetism) now they are the mainstream subject, of a great conceptual meaning and of a great practical importance [3–8]. This only contribution would be sufficient to put the name of Igor Dzyaloshinskii among the main creators of modern physics of magnetism.

We are very thankful to the organizers for their kind invitation to participate in the special issue dedicated to Dzyaloshinskii. In this short review we present our view on the fast growing field of DMI based mostly on

* E-mail: vmazurenko2011@gmail.com

our own experience of calculations and analysis of DMI parameters for specific magnetic materials.

2. Methods for calculating the Dzyaloshinskii–Moriya interaction. In this section, numerical approaches for calculating DMI are discussed. We start with a microscopic theory by Moriya [2] and show how it can be extended to analyze the dependence of DMI sign on the occupation of the $3d$ shell. Then we will focus on a correlated band theory of the DMI, that is free from basic limitations of the superexchange theory and can be applied in a wide range of electronic Hamiltonian parameters corresponding to insulators and metals. The last subsection of the methodological part is devoted to first-principles approaches based on the density functional theory.

2.1. Microscopic theory of DMI. The first microscopic theory of the antisymmetric anisotropic exchange interaction was developed by Moriya in 1960 and presented in Ref. [2]. It is based on the Anderson’s idea on superexchange interaction [9] and formulated on the basis of the simplest electronic model accounting the on-site Coulomb interaction and the spin-orbit coupling on the level of the hopping integrals. Such an electronic model can be written in the following form

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{ij, \sigma\sigma'} t_{ij}^{\sigma\sigma'} \hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{j\sigma'} + \frac{1}{2} \sum_{i, \sigma\sigma'} U \hat{a}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{i\sigma'}^\dagger \hat{a}_{i\sigma'} \hat{a}_{i\sigma}, \quad (2)$$

where $\hat{a}_{i\sigma}^\dagger$ ($a_{i\sigma}$) are the creation (annihilation) operators. U is local Coulomb interaction, $t_{ij}^{\sigma\sigma'}$ is the element of the spin-resolved hopping matrix. Formally, Eq. (2) is nothing but the Hubbard model [10–12] that was officially introduced three years later in 1963. In the limit when the on-site Coulomb interaction is much larger than the hopping integrals such a Hubbard model can be reduced to the spin model

$$\hat{\mathcal{H}}^{spin} = \sum_{ij} J_{ij} \hat{\mathbf{S}}_i \hat{\mathbf{S}}_j + \sum_{ij} \mathbf{D}_{ij} [\hat{\mathbf{S}}_i \times \hat{\mathbf{S}}_j] + \sum_{ij} \hat{\mathbf{S}}_i \overset{\leftrightarrow}{\Gamma}_{ij} \hat{\mathbf{S}}_j, \quad (3)$$

where $\hat{\mathbf{S}}$ is the spin operator, J_{ij} , \mathbf{D}_{ij} and $\overset{\leftrightarrow}{\Gamma}_{ij}$ are the isotropic exchange interaction, antisymmetric anisotropic (Dzyaloshinskii–Moriya) and symmetric anisotropic interactions, respectively. The summation runs twice over all pairs. In terms of the Hubbard Hamiltonian parameters the resulting expression for the DMI has the following form [2, 13]:

$$\mathbf{D}_{ij} = -\frac{i}{2U} [\text{Tr}_\sigma \{ \hat{t}_{ji} \} \text{Tr}_\sigma \{ \hat{t}_{ij} \boldsymbol{\sigma} \} - \text{Tr}_\sigma \{ \hat{t}_{ij} \} \text{Tr}_\sigma \{ \hat{t}_{ji} \boldsymbol{\sigma} \}], \quad (4)$$

where $\boldsymbol{\sigma}$ are the Pauli matrices.

Interestingly, the Moriya’s microscopic theory was published in 1960, however, its first application to quantitative analysis of the magnetic properties of real materials was only done 30 years later by Coffey, Rice, and Zhang in Ref. [14]. They have estimated \mathbf{D}_{ij} for different phases of La_2CuO_4 and $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ compounds. It was shown that peculiarities in the crystal structures of these systems result in different patterns of the DMI vectors, and as the result different ground states with and without net magnetic moment can be realized.

An important feature of the one-band consideration of the DMI is that the Moriya’s results were obtained by using an assumption of the constant U value without orbital dependence as well as by neglecting the intra-atomic (Hund’s) exchange contribution. Further development of the microscopic theory of the antisymmetric anisotropic interaction was mainly related to its generalization to multi-orbital electronic Hamiltonians. As was shown in Ref. [13] inter-orbital Coulomb and intra-atomic exchange interactions play an important role in formation of the DMI.

Another important peculiarity of the one-band consideration of the DMI was demonstrated in Ref. [15]. It was shown that the resulting spin model, Eq. (3) is characterized by a specific symmetry of the symmetric anisotropic exchange interaction tensor, $\overset{\leftrightarrow}{\Gamma}_{ij}$ whose principal axis coincides with DMI for each bond. It means that the state of a system with weak ferromagnetism is higher in energy than the pure (compensated) antiferromagnetic state.

Despite of the above-mentioned and other limitations of the one-band approach for calculating magnetic interaction parameters, it provides a very simple and transparent way to analyze the properties of the interactions. For instance, it can be used for analysis of the dependence of the DMI sign on the occupation of the $3d$ shell experimentally observed in the series of isostructural weak ferromagnets, MnCO_3 , FeBO_3 , CoCO_3 , and NiCO_3 as it was done by us in Ref. [16]. We consider the case of a transition metal oxide for which the crystal field splitting is much larger than the spin-orbit coupling, the latter can be treated as a perturbation. The corresponding expression for Dzyaloshinskii–Moriya interaction can be presented in the following form

$$\mathbf{D}_{ij}^{nn'} = \frac{4i}{U} [b_{ij}^{nn'} \mathbf{C}_{ji}^{n'n} - \mathbf{C}_{ij}^{nn'} b_{ji}^{n'n}], \quad (5)$$

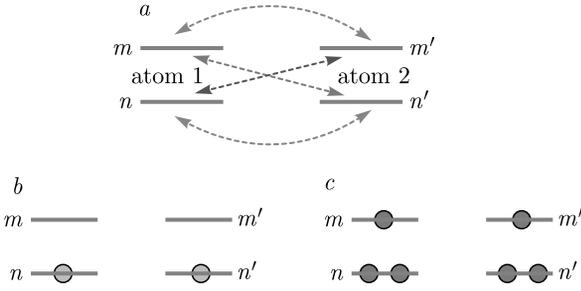


Fig. 1. (Color online) *a*) Minimal tight-binding model used for explaining the DMI sign change at variation of the occupation. The horizontal lines represent the electron levels and hoppings are shown with arrows. *b, c*) Two antiferromagnetic ground states corresponding to the $S = 1/2$ case, obtained in the model for different orbital fillings: $N = 2$ (*b*) and $N = 6$ (*c*)

where $b_{ij}^{nn'}$ is the (unperturbed) hopping integral between n -th ground orbital state of i -th atom and n' -th orbital state of j -th atom, $C_{ij}^{nn'}$ is the corresponding hopping renormalized by SOC and U is the on-site Coulomb interaction. Thus, $C_{ji}^{n'n}$ is given by

$$C_{ji}^{n'n} = -\frac{\lambda}{2} \left[\frac{(\mathbf{L}_j^{m'n'})^*}{\epsilon_j^{m'} - \epsilon_j^{n'}} b_{ji}^{m'n} + \frac{\mathbf{L}_i^{mn}}{\epsilon_i^m - \epsilon_i^n} b_{ji}^{n'm} \right], \quad (6)$$

where λ is the spin-orbit coupling constant, \mathbf{L}_i^{mn} is the matrix element of the orbital angular momentum between the single m -th excited state and the n -th ground state Wannier functions which are centered at i -th ion, while ϵ_i^n represents the energy of the n -th Wannier orbital at the i -th ion.

Tight-binding model we considered contains two atoms having non-degenerate (n and n') and high-energy (m and m') levels. The schematic visualization of the model with the allowed hopping paths is presented in Fig. 1. In the simplest case one can assume that the same hopping integrals between high-energy (m and m') and low-energy (n and n') levels, $b_{12}^{m m'} = b_{12}^{n n'}$. The hoppings between orbitals of different symmetry require more detail analysis, since they define the DMI in the system in question. We assume that the geometry of the model system is fixed, which means that hopping integrals do not change with variation of the occupation.

Our tight-binding model has two ground states with different occupations N that correspond to the $S = 1/2$ case: $N = 2$ and $N = 6$ (Fig. 1). In the case $N = 2$, the ground state magnetic orbital is of symmetry $n(n')$, while for $N = 6$ it is $m(m')$. Another difference between these configurations is the different occupation of the excited states: they are empty and fully occupied for $N = 2$ and $N = 6$, respectively.

The difference between DMIs obtained for a system with two and six electrons is related to the difference between $C_{21}^{n'n}$ and $C_{21}^{m'm}$,

$$C_{ji}^{n'n} = -C_{ji}^{m'm} = -\frac{\lambda \mathbf{L}^{mn}}{2\Delta E} \left(b_{ji}^{m'n} - b_{ji}^{n'm} \right), \quad (7)$$

where $\Delta E = \epsilon_i^n - \epsilon_i^m$.

It means that $\mathbf{D}_{ij}^{nn'}$ (for the system with two electrons) and $\mathbf{D}_{ij}^{mm'}$ (with six electrons) are of different signs. Thus, on the level of Moriya's approach, the sign of the DMI depends on the occupation of the excited states. Depending on the symmetry and occupation, each pair of $3d$ orbitals can result in positive or negative contribution to the total DMI between two atoms. It should be noted that similar dependence of the DMI sign on the occupation of the $3d$ shell can be also found in some series of metallic systems. In this sense interesting methodological results were obtained in Refs. [17–19].

It is important to discuss the limits of the Moriya's theory of DMI from the point of view of its using to study real physical systems. In its original formulation it is limited to the systems with the spin state of $S = 1/2$. Real transition metal compounds and nanosystems are of multi-orbital nature. In this case, the main question is how to define the numerous hopping and Coulomb interaction parameters of the Hubbard model. In principle, one can use approximations of different types to define the parameters [20, 21] by using available experimental data. Another approach is based on performing density functional theory (DFT) calculations and their parametrization using wannierization procedure developed in Refs. [22, 23] to construct the Wannier functions [24]. Then, on this basis the electronic model parameters are calculated. The most accurate numerical scheme to estimate local (U) and non-local Coulomb interaction parameters taking screening effects into account is based on the constrained random phase approximation [25].

The situation becomes even more complicated if one simulates a compound with a strong spin-orbit coupling. For this case effective numerical schemes based on the superexchange theory can be found in Refs. [26, 27].

2.2. Correlated band theory for DMI. We start with correlated band theory of DMI developed by us in Ref. [28]. It is based on the consideration of the general Hamiltonian of interacting electrons in a crystal:

$$\hat{H} = \sum_{12} c_1^\dagger t_{12} c_2 + \frac{1}{2} \sum_{1234} c_1^\dagger c_2^\dagger U_{1234} c_3 c_4, \quad (8)$$

where $1 = (i_1, m_1, \sigma_1)$ is the set of site (i_1), orbital (m_1) and spin (σ_1) quantum numbers and t_{12} are hopping integrals that contain the spin-orbit coupling. These transfer couplings can be found by the Wannier-parameterization of the first-principle band structure with the spin-orbit coupling.

We will take into account only the local Hubbard-like interactions, keeping in \hat{H}_u only terms with $i_1 = i_2 = i_3 = i_4$. This assumption corresponds to the DFT+U Hamiltonian [29] that is also a starting point for the DFT+DMFT (Dynamical Mean-Field Theory) [30–32]. It is crucially important for the later consideration that the interaction term \hat{H}_u is supposed to be rotationally invariant.

We start with a collinear magnetic configuration, for instance an antiferromagnetic state, which is close to the real ground state (weak ferromagnet), but does not coincide with it due to the DMI. Let us re-define the DM Hamiltonian (Eq. (1)) in a slightly different way:

$$H_{DMI} = \sum_{ij} \mathbf{D}'_{ij} [\mathbf{e}_i \times \mathbf{e}_j], \quad (9)$$

where \mathbf{e}_i is a unit vector in the direction of the i -th site magnetic moment and \mathbf{D}'_{ij} is the Dzyaloshinskii–Moriya vector. We analyze the magnetic configuration that is slightly deviated from the collinear state,

$$\mathbf{e}_i = \eta_i \mathbf{e}_0 + [\delta\phi_i \times \eta_i \mathbf{e}_0], \quad (10)$$

where $\eta_i = \pm 1$, \mathbf{e}_0 is the unit vector along the vector of antiferromagnetism, and $\delta\phi_i$ are the vectors of small angular rotations.

Substituting Eq. (10) into Eq. (9) one finds for the variation of the magnetic energy:

$$\delta E = \sum_{ij} \mathbf{D}'_{ij} (\delta\phi_i - \delta\phi_j). \quad (11)$$

Now we should calculate the same variation for the microscopic Hamiltonian (8). Similar to the procedure used in Ref. [33] to derive exchange interactions for the LDA+DMFT approach, we consider the effect of the local rotations

$$\hat{R}_i = e^{i\delta\varphi_i \hat{\mathbf{J}}_i}, \quad (12)$$

on the total energy; here $\hat{\mathbf{J}}_i = \hat{\mathbf{L}}_i + \hat{\mathbf{S}}_i$ is the total moment operator, $\hat{\mathbf{L}}_i$ and $\hat{\mathbf{S}}_i$ are the orbital and spin moments, respectively.

The resulting DMI is given by anticommutator of $\hat{\mathbf{J}}$ and \hat{t}_{ij} :

$$\mathbf{D}'_{ij} = -\frac{i}{2} \text{Tr}_{m,\sigma} N_{ji} [\hat{\mathbf{J}}, \hat{t}_{ij}]_+, \quad (13)$$

where

$$N_{ji} = \langle c_i^\dagger c_j \rangle = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{E_f} \text{Im} G_{ji}(E) dE$$

is the inter-site occupation matrix and \hat{G} is the Green function of the system, E_f is the Fermi energy. The occupation matrix can be calculated by using a static (such as DFT+U [29]) or a dynamic mean-field approach (DFT+DMFT [30–32]).

Note that the occupation matrix is calculated in the corresponding collinear states, which strictly speaking can be done self-consistently only within constrained calculations [34]. Using the decomposition of the total moment $\hat{\mathbf{J}}$ into orbital and spin moments, we have a natural representation of the Dzyaloshinskii–Moriya vector (13) as a sum of the orbital and spin contributions which are related with the rotations in orbital and spin space, respectively.

The resulting expression Eq. (13) is of general nature and its spin part can be also derived in the case of the metallic systems as it was shown in [35].

2.3. DFT-based methods. In this section we discuss mean-field approaches for calculating the DMI that are realized on the basis of the numerical methods of the density functional theory. The net DMI can be assessed by calculating the DFT total energies for the two sets of spin spiral states having opposite helicities [36–38] or by using Berry phase theory [39]. In order to calculate the individual pair-wise DMI, one can employ the magnetic force theorem [40]. According to this theorem, the variation of the total energy of the system due to a magnetic excitation can be expressed through the variation of the single-particle energy.

In 3d systems, the spin-orbit coupling in itself can be also considered as a perturbation [41, 42]. One can consider a mixed perturbation scheme with respect to the rotation and spin-orbit coupling, which leads to the antisymmetric anisotropic DMI [43]

$$\begin{aligned} D_{ij}^z = & -\frac{1}{8\pi S_i S_j} \text{Re} \int_{-\infty}^{E_f} d\epsilon \times \\ & \times \sum_k \text{Tr}_m (\Delta_i G_{ik}^\downarrow H_{k\downarrow\downarrow}^{so} G_{kj}^\downarrow \Delta_j G_{ji}^\uparrow - \\ & - \Delta_i G_{ik}^\uparrow H_{k\uparrow\uparrow}^{so} G_{kj}^\uparrow \Delta_j G_{ji}^\downarrow + \Delta_i G_{ij}^\downarrow \Delta_j G_{jk}^\uparrow H_{k\uparrow\uparrow}^{so} G_{ki}^\uparrow - \\ & - \Delta_i G_{ij}^\uparrow \Delta_j G_{jk}^\downarrow H_{k\downarrow\downarrow}^{so} G_{ki}^\downarrow). \quad (14) \end{aligned}$$

Other components of the Dzyaloshinskii–Moriya vector for particular bond can be obtained from the z ones by

rotation of the coordinate system. Similar expression for DMI was obtained by Solovyev et al. [44].

We have applied the developed method for calculating the DMI to give a microscopic explanation to the scanning tunneling microscopy experiments performed for chains of manganese atoms on CuN surface [43]. Weak ferromagnetism due to the DMI between neighbouring manganese atoms was predicted. Another important example is a first-principles study of the molecular nanomagnet Mn_{12} for which most theoretical works on molecular magnets are mainly relied on the so-called rigid-spin model. Within such a model a complex system of interacting spins is replaced by just one big spin, with some magnetic anisotropy being introduced artificially. However, such a description is rather simplistic and largely ignores intermolecular interactions. Previously, it was predicted that the DMI plays a crucial role in the physics of molecular magnets [45] and in particular magnetic tunneling effects in Mn_{12} [46]. In our work [47] we have demonstrated that the account of the inter-atomic anisotropic exchange interactions in Mn_{12} gives opportunity to reproduce excitation energies observed in the inelastic neutron scattering experiments for this system.

In the case of the systems with strong spin-orbit coupling one could still use similar Green's function approach within the magnetic force theorem [48]. The expressions for DMI, which do not rely on the smallness of spin-orbit coupling constant have been derived independently by several groups [49–53].

3. Applications.

3.1. Weak ferromagnetism in antiferromagnets. Discovery of the weak ferromagnetism in iron hematite, Fe_2O_3 (Ref. [54,55]) was the starting point for development of the DMI theory. More specifically, Fe_2O_3 is pure antiferromagnet with magnetic moments parallel to the trigonal axis c at $T < 260$ K. In the temperature range between 260 and 950 K, the magnetic moments are in-plane and a small canting of the magnetic moment exists. As the result of this canting there is net magnetic moment in the antiferromagnetic system. The weak ferromagnetism in Fe_2O_3 was explored with first-principles DFT calculations in Ref. [56] and with Green's function approach based on the magnetic force theorem in Ref. [57].

A more interesting situation concerning weak ferromagnetism in antiferromagnets is observed in transition metal oxides having calcite structure. Previous magnetization measurements [58–61] have confirmed the existence of the non-compensate in-plane magnetization in several materials of this kind. However, the precise di-

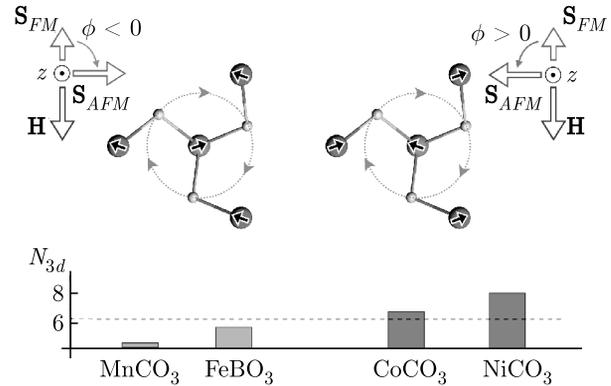


Fig. 2. (Color online) Local atomic and magnetic orders in the weak ferromagnets. The ions of the two magnetic sublattices are represented by blue (site 1) and red (site 2) spheres, with black arrows denoting the direction of their spins. Oxygen atoms between the two adjacent transition metal layers are represented as yellow spheres. The dotted circles highlight the twist of the oxygen layer. The bottom panel shows the occupation of the $3d$ level of a magnetic ion. The left and right panels show the two possible magnetic configurations which stabilize depending on the $3d$ occupation and, therefore, the sign of the DMI, for a net ferromagnetic moment pointing along the magnetic field \mathbf{H} . \mathbf{S}_{AFM} denotes the direction of the antiferromagnetic spin structure. This figure is reproduced with permission from Ref. [16]

rection of the weak ferromagnetic moment with respect to the crystallographic axes and hence the “sign” of DM interaction remained unknown. For the first time, this was unambiguously identified for $FeBO_3$ using resonant x -ray diffraction in Ref. [62]. We have performed *ab initio* calculations and extracted the DM vectors using Eq. (13). It was found that the theoretical calculations do not only reproduce the correct sign of DM vectors, but also give a very good estimate of the canting angle.

Next, we addressed the series of isostructural calcite oxides, namely: $MnCO_3$, $FeBO_3$, $CoCO_3$, $NiCO_3$. They all exhibit weak ferromagnetism and experiments based on the technique developed in Ref. [62], have revealed the change of canting angle sign across the series [16]. More specifically, the compounds $MnCO_3$ and $FeBO_3$ are characterized by the rotation sense which differs from that for the $CoCO_3$ and $NiCO_3$ systems. It is schematically shown in Fig. 2. Taking into account that these compounds have the same crystal structure (and the same crystallographic chirality), such a sign change can be attributed to the difference in the occupation of the $3d$ shell.

To provide a theoretical support to these experiments in Ref. [16] we have performed first-principles calculations within local density approximation taking

into account the on-site Coulomb interaction U and spin-orbit coupling (DFT+ U +SO). The resulting magnetic configuration is antiferromagnetic one characterized by a canting of the magnetic moments. Such a canted state is the lowest-energy state for all the systems under consideration. The calculated magnitudes and signs of the canting angles are in good agreement with experimental data. However, the full calculation does not provide a truly microscopic understanding of the DMI sign change phenomena. For that a minimal tight-binding model based on the Moriya's theory as described in the methodological part of this paper becomes extremely useful.

3.2. Magnetic skyrmions. Investigation of skyrmions is a widely studied topic in the modern material science [63–71]. Previous experimental and theoretical studies on the topologically-protected magnetic skyrmion excitations were fully focused on the transition metal crystals and nanosystems. This seems to be natural, since these materials are characterised by well-localised magnetic moments originated from the partially-filled $3d$ states and magnetic anisotropy [72, 73] that facilitates an experimental detection of the distinct magnetic textures. In works [74–76] a new class of materials, surface nanostructures with sp element revealing skyrmion excitations at experimentally achievable magnetic fields and temperatures was introduced. The non-trivial result, that such sp -electron systems are, in principle, characterized by a magnetic state, was experimentally confirmed in Refs. [77–79].

Our first-principles calculations [74–76] have confirmed a long-range character of the magnetic states in graphene derivatives C_2H and C_2F as well as in surface nanostructures $Si(111):\{C, Si, Sn, Pb\}$ and in Sn on $SiC(0001)$. The corresponding Wannier functions in these systems demonstrate that substantial amount of the electron density is concentrated in the interstitial region. In all the cases we have found that the values of the calculated hopping integrals are much smaller than that of the Coulomb interactions, which gives us opportunity to construct a Heisenberg-type Hamiltonian for the localized spins $S = 1/2$ within the superexchange theory.

The constructed spin models for graphene derivatives, $Si(111):\{C, Si, Sn, Pb\}$ and Sn monolayer on $SiC(0001)$ surface were solved by means of the Monte Carlo methods, which gives us opportunity to define the magnetic phases of these materials depending on the external magnetic field and temperature. It was found that one can stabilize skyrmionic solutions in the case of the semifluorinated graphene (Fig. 3)

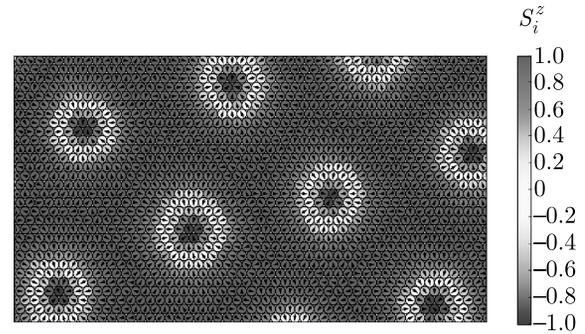


Fig. 3. (Color online) Skyrmionic magnetic structure obtained from the Monte Carlo simulations for C_2F system. This figure is adopted from Ref. [74]

and nanosystems with heavy adatoms $Sn/Si(111)$, $Pb/Si(111)$ and $Sn/SiC(0001)$. The key quantity here allowing the formation of the topologically protected magnetic structures is the anisotropic Dzyaloshinskii–Moriya interaction.

4. Perspectives. Despite there were several decades of intensive investigations on DMI and related phenomena we think that this is still young and very promising research field within which one could focus on the following directions for future investigations. From the very beginning DMI is considered as a representative of one of the smallest energy scales in the magnetic Hamiltonians of the strongly correlated systems, $|\mathbf{D}_{ij}| \ll J_{ij}$. It is due to the DMI always contains additional relativistic small parameter, the ratio of electron velocity in atoms to the velocity of light. However, such a dominance of the Heisenberg exchange interaction can be overcome by different means. For instance, manipulation of magnetic interactions via a strong periodic in time electromagnetic field [80] (“Floquet engineering”) suggests that using real nanosystems and real values of the laser fields one can reach the regime when the Heisenberg exchange J_{ij} is arbitrarily small, or even equal to zero, whereas the Dzyaloshinskii–Moriya parameter \mathbf{D}_{ij} remains constant. As an interesting example of such a situation, a new class of two-dimensional Heisenberg-exchange-free materials where a completely new type of skyrmions (Fig. 4) that emerge as the result of the competition between the DMI and uniform magnetic field has been introduced [81].

Another fascinating research field is related to a quantum skyrmions that in contrast to the classical counterpart are practically unexplored. The main methodological problem here is how to characterize the topology of quantum system with a three-dimensional magnetic structure when the orientation of a spin is

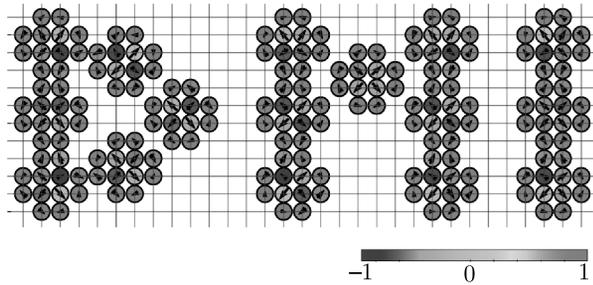


Fig. 4. (Color online) Abbreviation of Dzyaloshinskii–Moriya interaction written with nanoskymions. This is a result of Monte Carlo simulations of the Heisenberg-exchange-free model on the square lattice with non-regular site occupation. Arrows and colors depict the in-plane and out-of-plane spin projections, respectively

ill-defined. One of the possible solutions was recently proposed by some of us in Ref. [82] where scalar chirality operator was introduced to define a quantum analog of the topological charge.

The other direction we consider to be very attractive is DMI applications in quantum computing. Existence of the anisotropic exchange interactions between qubits can be used for preparing highly entangled quantum states that play an important role in quantum information processing [83,84]. The future of DMI looks bright and promising.

Funding. The work of A. I. L. and M. I. K. is supported by European Research Council via Synergy Grant 854843–FASTCORR. Y. O. K. acknowledges the financial support from the Swedish Research Council (VR) under the project No.2019-03569. The work of V. V. M. was supported by Act 211 Government of the Russian Federation, contract 02.A03.21.0006.

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

REFERENCES

1. I. Dzyaloshinskii, *J. Phys. Chem. Sol.* **4**, 241 (1958).
2. T. Moriya, *Phys. Rev.* **120**, 91 (1960); T. Moriya, in *Magnetism*, Vol. I, ed. by G. T. Rado and H. Suhl, Acad. Press, New York (1963), p. 86.
3. H. Katsura, N. Nagaosa, and A. V. Balatsky, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 057205 (2005).
4. I. A. Sergienko and E. Dagotto, *Phys. Rev. B* **73**, 094434 (2006).
5. S. W. Cheong and M. Mostovoy, *Nature Mater.* **6**, 13 (2007).
6. M. Bode, M. Heide, K. von Bergmann, P. Ferriani, S. Heinze, G. Bihlmayer, A. Kubetzka, O. Pietzsch, S. Blügel, and R. Wiesendanger, *Nature* **447**, 190 (2007).
7. M. Heide, G. Bihlmayer, and S. Blügel, *Phys. Rev. B* **78**, 140403(R) (2008).
8. S. Rohart and A. Thiaville, *Phys. Rev. B* **88**, 184422 (2013).
9. P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **115**, 2 (1959).
10. J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. A* **276**, 238 (1963).
11. M. C. Gutzwiller, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 159 (1963).
12. J. Kanamori, *Prog. Theor. Phys.* **30**, 275 (1963).
13. T. Yildirim, A. B. Harris, A. Aharony, and O. Entin-Wohlman, *Phys. Rev. B* **52**, 10239 (1995).
14. D. Coffey, T. M. Rice, and F. C. Zhang, *Phys. Rev. B* **44**, 10112 (1991).
15. L. Shekhtman, O. Entin-Wohlman, and A. Aharony, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 836 (1992).
16. G. Beutier, S. P. Collins, O. V. Dimitrova, V. E. Dmitrienko, M. I. Katsnelson, Y. O. Kvashnin, A. I. Lichtenstein, V. V. Mazurenko, A. G. A. Nisbet, E. N. Ovchinnikova, and D. Pincini, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 167201 (2017).
17. A. Fert and P. M. Levy, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 1538 (1980).
18. V. Kashid, T. Schena, B. Zimmermann, Y. Mokrousov, S. Blügel, V. Shah, and H. G. Salunke, *Phys. Rev. B* **90**, 054412 (2014).
19. A. Belabbes, G. Bihlmayer, F. Bechstedt, S. Blügel, and A. Manchon, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 247202 (2016).
20. A. S. Moskvina, M. A. Vigura, and A. P. Agafonov, *Sov. Phys. Solid State* **28**, 1631 (1986).
21. A. Moskvina, *J. Magn. Magn. Mater.* **400**, 117 (2016), *Proc. of the 20th Int. Conf. on Magnetism, Barcelona* (2015).
22. N. Marzari and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **56**, 12847 (1997).
23. N. Marzari, A. A. Mostofi, J. R. Yates, I. Souza, and D. Vanderbilt, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1419 (2012).

24. A. A. Mostofi, J. R. Yates, G. Pizzi, Y.-Su. Lee, I. Souza, D. Vanderbilt, and N. Marzari, *Comput. Phys. Commun.* **185**, 2309 (2014).
25. F. Aryasetiawan, K. Karlsson, O. Jepsen, and U. Schönberger, *Phys. Rev. B* **74**, 125106 (2006).
26. I. V. Solovyev, *New J. Phys.* **11**, 093003 (2009).
27. I. V. Solovyev, V. V. Mazurenko, and A. A. Katanin, *Phys. Rev. B* **92**, 235109 (2015).
28. M. I. Katsnelson, Y. O. Kvashnin, V. V. Mazurenko, and A. I. Lichtenstein, *Phys. Rev. B* **82**, 100403(R) (2010).
29. V. I. Anisimov, F. Aryasetiawan, and A. I. Lichtenstein, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 767 (1997).
30. A. I. Lichtenstein and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B* **57**, 6884 (1998).
31. G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, and C. A. Marianetti, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 865 (2006).
32. V. Anisimov, A. Poteryaev, M. Korotin, A. Anokhin, and G. Kotliar, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 7359 (1997).
33. M. I. Katsnelson and A. I. Lichtenstein, *Eur. Phys. J. B* **30**, 9 (2002).
34. G. M. Stocks, B. Ujfalussy, X. D. Wang, D. M. C. Nicholson, W. A. Shelton, Y. Wang, A. Canning, and B. L. Gyorfy, *Phil. Mag. B* **78**, 665 (1998).
35. T. Kikuchi, T. Koretsune, R. Arita, and G. Tatara, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 247201 (2016).
36. H. Yang, A. Thiaville, S. Rohart, A. Fert, and M. Chshiev, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 267210 (2015).
37. B. Zimmermann, G. Bihlmayer, M. Böttcher, M. Bouhassoune, S. Lounis, J. Sinova, S. Heinze, S. Blügel, and B. Dupé, *Phys. Rev. B* **99**, 214426 (2019).
38. L. M. Sandratskii, *Phys. Rev. B* **96**, 024450 (2017).
39. F. Freimuth, S. Blügel, and Y. Mokrousov, *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 104202 (2014).
40. A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, V. P. Antropov, and V. A. Gubanov, *J. Magn. Magn. Mater.* **67**, 65 (1987).
41. P. Bruno, *Phys. Rev. B* **39**, 865 (1989).
42. I. V. Solovyev, P. H. Dederichs, and I. Mertig, *Phys. Rev. B* **52**, 13419 (1995).
43. A. N. Rudenko, V. V. Mazurenko, V. I. Anisimov, and A. I. Lichtenstein, *Phys. Rev. B* **79**, 144418 (2009).
44. I. Solovyev, N. Hamada, and K. Terakura, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4825 (1996).
45. M. I. Katsnelson, V. V. Dobrovitski, and B. N. Harmon, *Phys. Rev. B* **59**, 6919 (1999).
46. H. A. De Raedt, A. H. Hams, V. V. Dobrovitski, M. Al-Saqr, M. I. Katsnelson, and B. N. Harmon, *J. Magn. Magn. Mater.* **246**, 392 (2002).
47. V. V. Mazurenko, Y. O. Kvashnin, Fengping Jin, H. A. De Raedt, A. I. Lichtenstein, and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B* **89**, 214422 (2014).
48. M. I. Katsnelson and A. I. Lichtenstein, *Phys. Rev. B* **61**, 8906 (2000).
49. L. Udvardi, L. Szunyogh, K. Palotás, and P. Weinberger, *Phys. Rev. B* **68**, 104436 (2003).
50. H. Ebert and S. Mankovsky, *Phys. Rev. B* **79**, 045209 (2009).
51. A. Secchi, A. Lichtenstein, and M. Katsnelson, *Ann. Phys.* **360**, 61 (2015).
52. S. Mankovsky and H. Ebert, *Phys. Rev. B* **96**, 104416 (2017).
53. Y. O. Kvashnin, A. Bergman, A. I. Lichtenstein, and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B* **102**, 115162 (2020).
54. T. Smith, *Phys. Rev.* **8**, 721 (1916); L. Neel, *Rev. Mod. Phys.* **25**, 58 (1953).
55. S. V. Vonsovsky, *Magnetism*, Vol. 2, Wiley, New York (1974).
56. L. M. Sandratskii, M. Uhl, and J. Kübler, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 983 (1996); L. M. Sandratskii and J. Kübler, *Europhys. Lett.* **33**, 447 (1996).
57. V. V. Mazurenko and V. I. Anisimov, *Phys. Rev. B* **71**, 184434 (2005).
58. A. Kosterov, T. Frederichs, and T. von Döbeneck, *Phys. Earth Planet. Interiors* **154**, 234 (2006), *Developments in Techniques and Methods Related to Rock Magnetism*.
59. M. P. Petrov, G. A. Smolensky, A. P. Paugurt, and S. A. Kizhaev, *AIP Conf. Proc.* **5**, 379 (1972).
60. A. S. Borovik-Romanov and V. I. Ozhogin, *Sov. Phys. JETP* **12**, 18 (1961).
61. N. M. Kreines and T. A. Shal'nikova, *Sov. Phys. JETP* **31**, 280 (1970).

62. V. E. Dmitrienko et al., *Nature Phys.* **10**, 202 (2014).
63. A. N. Bogdanov and D. A. Yablonskii, *Sov. Phys. JETP* **68**, 101 (1989).
64. S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, and P. Böni, *Science* **323**, 915 (2009).
65. A. Neubauer, C. Pfleiderer, B. Binz, A. Rosch, R. Ritz, P. G. Niklowitz, and P. Böni, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 186602 (2009).
66. W. Münzer, A. Neubauer, T. Adams, S. Mühlbauer, C. Franz, F. Jonietz, R. Georgii, P. Böni, B. Pedersen, M. Schmidt, A. Rosch, and C. Pfleiderer, *Phys. Rev. B* **81**, 041203 (2010).
67. X. Z. Yu, Y. Onose, N. Kanazawa, J. H. Park, J. H. Han, Y. Matsui, N. Nagaosa, and Y. Tokura, *Nature* **465**, 901 (2010).
68. N. Nagaosa and Y. Tokura, *Nature Nanotechnol.* **8**, 899 (2013).
69. O. Janson, I. Rousochatzakis, A. A. Tsirlin, M. Belesi, A. A. Leonov, U. K. Röfler, J. van den Brink, and H. Rosner, *Nature Commun.* **5**, 5376 (2014).
70. S. Heinze, K. von Bergmann, M. Menzel, J. Brede, A. Kubetzka, R. Wiesendanger, G. Bihlmayer, and S. Blügel, *Nature Phys.* **7**, 713 (2011).
71. N. Romming, C. Hanneken, M. Menzel, J. E. Bickel, B. Wolter, K. von Bergmann, A. Kubetzka, and R. Wiesendanger, *Science* **341**, 636 (2013).
72. I. Beljakov, V. Meded, F. Symalla, K. Fink, S. Shallcross, M. Ruben, and W. Wenzel, *Nano Lett.* **14**, 3364 (2014).
73. E. Torun, H. Sahin, C. Bacaksiz, R. T. Senger, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **92**, 104407 (2015).
74. V. V. Mazurenko, A. N. Rudenko, S. A. Nikolaev, D. S. Medvedeva, A. I. Lichtenstein, and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B* **94**, 214411 (2016).
75. D. I. Badrtdinov, S. A. Nikolaev, M. I. Katsnelson, and V. V. Mazurenko, *Phys. Rev. B* **94**, 224418 (2016).
76. D. I. Badrtdinov, S. A. Nikolaev, A. N. Rudenko, M. I. Katsnelson, and V. V. Mazurenko, *Phys. Rev. B* **98**, 184425 (2018).
77. S. Glass, G. Li, F. Adler, J. Aulbach, A. Fleszar, R. Thomale, W. Hanke, R. Claessen, and J. Schäfer, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 247602 (2015).
78. G. Li, P. Höpfner, J. Schäfer, C. Blumenstein, S. Meyer, A. Bostwick, E. Rotenberg, R. Claessen, and W. Hanke, *Nature Commun.* **4**, 1620 (2013).
79. H. González-Herrero, J. M. Gómez-Rodríguez, P. Mallet, M. Moaied, J. José Palacios, C. Salgado, M. M. Ugeda, J.-Y. Veuillen, F. Yndurain, and I. Brihuega, *Science* **352**, 437 (2016).
80. E. A. Stepanov, C. Dutreix, and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 157201 (2017).
81. E. A. Stepanov, S. A. Nikolaev, C. Dutreix, M. I. Katsnelson, and V. V. Mazurenko, *J. Phys.: Condens. Matter* **31**, 17LT0 (2019).
82. O. M. Sotnikov, V. V. Mazurenko, J. Colbois, F. Mila, M. I. Katsnelson, and E. A. Stepanov, arXiv: 2004.13526.
83. L. K. Grover, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 325 (1997).
84. P. W. Shor, *SIAM J. Comput.* **26**, 1484 (1997).

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДЗЯЛОШИНСКОГО И ОБМЕННО-РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ЭФФЕКТЫ В ОРТОФЕРРИТАХ

*А. С. Москвин**

*Уральский федеральный университет
620083, Екатеринбург, Россия*

*Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук
620108, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 2 ноября 2020 г.,
после переработки 2 ноября 2020 г.
Принята к публикации 24 ноября 2020 г.

Представлен обзор микроскопической теории взаимодействия Дзялошинского–Мория и других обменно-релятивистских эффектов, таких как обменная анизотропия, электронно-ядерное антисимметричное косвенное сверхтонкое взаимодействие, антисимметричные магнитогиротропные эффекты и антисимметричная магнитоэлектрическая связь в сильнокоррелированных $3d$ -соединениях, прежде всего ортоферритах $RFeO_3$ (R — редкоземельный ион или иттрий Y). Основное внимание уделено выводу выражений для вектора Дзялошинского, его величине, ориентации и знаку при различных типах (сверх)обменного взаимодействия и кристаллического поля. Полученное на микроскопическом уровне выражение для зависимости вектора Дзялошинского от геометрии сверхобмена позволяет найти все углы явного и скрытого скоса магнитных подрешеток в ортоферритах $RFeO_3$, а также соответствующий вклад в магнитную анизотропию. Основываясь на теоретических предсказаниях знака вектора Дзялошинского, мы предсказали и подробно исследовали новое магнитное явление, слабый ферримагнетизм, в смешанных слабых ферромагнетиках с конкурирующими знаками векторов Дзялошинского. Показано, что измерения ЯМР на ядрах лигандов в слабых ферромагнетиках являются эффективным инструментом для изучения взаимодействия Дзялошинского–Мория, в частности, знака вектора Дзялошинского. Наряду с ортоферритами $RFeO_3$ и слабыми ферримагнетиками $RFe_{1-x}Cr_xO_3$ рассматриваются, хотя и в меньшей степени, такие типичные слабые ферромагнетики, как α - Fe_2O_3 , $FeVO_3$ и FeF_3 .

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040040

1. ВВЕДЕНИЕ

В истории науки нечасто случается такое, чтобы одна статья открывала новую область теоретических и экспериментальных исследований. Именно это произошло со статьей Дзялошинского [1], посвященной объяснению явления слабого ферромагнетизма.

Прошло более ста лет со времени обнаружения Смитом [2] в 1916 г. слабого или «паразитного» ферромагнетизма в «международном семействе» различных кристаллов природного гематита α - Fe_2O_3 из Италии, Венгрии, Бразилии и России (Schabry —

поселок Шабры около Екатеринбурга), появление которого первоначально было приписано наличию ферромагнитных примесей. Позднее такое же явление было обнаружено во многих других кристаллах, включая фторид NiF_2 со структурой рутила, орторомбические ортоферриты $RFeO_3$ (R — редкоземельный ион или иттрий Y), ромбоэдрические антиферромагнетики $MnCO_3$, $NiCO_3$, $CoCO_3$ и $FeVO_3$. Однако только в 1954 г. Матарресе и Стаут для NiF_2 [3] и в 1956 г. Боровик-Романов и Орлова для очень чистых синтетических карбонатов $MnCO_3$ и $CoCO_3$ [4] надежно установили, что слабый ферромагнетизм наблюдается в химически чистых антиферромагнитных соединениях, поэтому он является внутренним свойством некоторых антиферромагнетиков, так что прямая связь между слабым фер-

* E-mail: alexander.moskvin@urfu.ru

ромагнетизмом и примесями или неоднородностями вряд ли существует. Более того, Боровик-Романов и Орлова связали появление нескомпенсированного момента в $MnCO_3$ и $CoCO_3$ со скосом магнитных подрешеток в почти антиферромагнитной матрице. Модель «скошенного» антиферромагнетика стала общепринятой моделью слабого ферромагнетика.

Теоретическое объяснение и первая термодинамическая теория слабого ферромагнетизма в $\alpha-Fe_2O_3$, $MnCO_3$, и $CoCO_3$ были даны Дзялошинским [1] в 1957 г. на основе симметричных соображений и теории Ландау фазовых переходов второго рода. Как было показано, свободную энергию двухподрешеточного одноосного слабого ферромагнетика, такого как $\alpha-Fe_2O_3$, $MnCO_3$, $CoCO_3$, $FeVO_3$ можно представить в виде

$$F = MH_E(\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2) - M\mathbf{H}_0(\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2) + E_D + E_A = MH_E(\mathbf{m}^2 - \mathbf{l}^2) - M\mathbf{H}_0\mathbf{m} + E_D + E_A. \quad (1)$$

Здесь \mathbf{m}_1 и \mathbf{m}_2 — единичные векторы в направлении магнитных моментов подрешеток, M — намагниченность подрешетки,

$$\mathbf{m} = \frac{1}{2}(\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2), \quad \mathbf{l} = \frac{1}{2}(\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2)$$

— векторы соответственно ферро- и антиферромагнетизма, H_0 — внешнее поле, H_E — обменное поле. Энергию

$$E_D = -MH_D[\mathbf{m}_1 \times \mathbf{m}_2]_z = +2MH_D[\mathbf{m} \times \mathbf{l}]_z = +2MH_D(m_x l_y - m_y l_x) \quad (2)$$

принято называть взаимодействием Дзялошинского, где $H_D > 0$ — поле Дзялошинского. Энергия анизотропии E_A имеет вид

$$E_A = \frac{H_A}{2M}(m_{1z}^2 + m_{2z}^2) = \frac{2H_A}{2M}(m_z^2 + l_z^2),$$

где H_A — поле анизотропии. Выбор знака для поля анизотропии H_A соответствует выбору c -оси «трудным» направлением намагничивания. В общем случае под взаимодействием Дзялошинского понимают слагаемые в свободной энергии, линейные как по компонентам вектора ферромагнетизма, так и по компонентам вектора антиферромагнетизма. Например для орторомбических ортоферритов и ортохромитов взаимодействие Дзялошинского включает

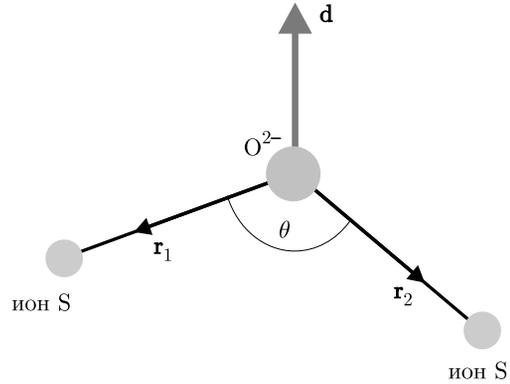


Рис. 1. Геометрия сверхобмена и ориентация вектора Дзялошинского

как антисимметричные, так и симметричные слагаемые:

$$E_D = d_1 m_z l_x + d_2 m_x l_z = \frac{d_1 - d_2}{2}(m_z l_x - m_x l_z) + \frac{d_1 + d_2}{2}(m_z l_x + m_x l_z) = -2MH_D[\mathbf{m} \times \mathbf{l}]_y + \frac{d_1 + d_2}{2}(m_z l_x + m_x l_z), \quad (3)$$

тогда как для тетрагональных фторидов NiF_2 и CoF_2 взаимодействие Дзялошинского включает только симметричные слагаемые.

Дзялошинский полагал, что слабый ферромагнетизм обусловлен релятивистским спин-решеточным и магнитодипольным взаимодействиями, однако теория была феноменологической и не рассматривала микроскопическую природу взаимодействия, приводящего к скосу подрешеток. Позднее, в 1960 г. Мория [5] предложил модельную микроскопическую теорию обменно-релятивистского антисимметричного взаимодействия как основного механизма слабого ферромагнетизма

$$V_{DM} = \sum_{mn} (\mathbf{d}_{mn} \cdot [\mathbf{S}_m \times \mathbf{S}_n]), \quad (4)$$

и получившего название спин-спинового взаимодействия Дзялошинского–Мория (DM-взаимодействие). Здесь, \mathbf{d}_{mn} — аксиальный вектор Дзялошинского. Вскоре Кеффер [6] предложил простое феноменологическое выражение вектора Дзялошинского в паре магнитных ионов M_i и M_j , взаимодействующих «сверхобменно» через промежуточный немагнитный лиганд O (см. рис. 1):

$$\mathbf{d}_{ij} \propto [\mathbf{r}_i \times \mathbf{r}_j], \quad (5)$$

где $\mathbf{r}_{i,j}$ — единичные радиус-векторы для связей $O-M_{i,j}$ с предположительно одинаковыми длинами

Таблица 1. Основные параметры обменного взаимодействия и взаимодействия Дзялошинского–Мория для ортоферритов в сравнении с другими слабыми ферромагнетиками (WFM), I — обменный интеграл, α_D — угол скоса магнитных подрешеток

WFM	R_{FeO} , Å	θ	T_N , К	I , К (MFA)	H_E , Тл	α_D	H_D , Тл	$d(\theta)$, К
YFeO ₃	2.001 (x2)	145°	640	36.6	640	$1.1 \cdot 10^{-2}$	14	3.2
α -Fe ₂ O ₃	2.111	145°	948	54.2	870–920	$1.1 \cdot 10^{-3}$	1.9–2.2	2.3
FeBO ₃	2.028	126°	348	19.9	300	$1.7 \cdot 10^{-2}$	10	2.3
FeF ₃	1.914	153°	363	20.7	440	$5.5 \cdot 10^{-3}$	4.88	1.1

связи. Позднее Москвин [7] вывел микроскопическую формулу для вектора Дзялошинского

$$\mathbf{d}_{ij} = d_{ij}(\theta)[\mathbf{r}_i \times \mathbf{r}_j], \quad (6)$$

где

$$d_{ij}(\theta) = d_1(R_i, R_j) + d_2(R_i, R_j) \cos \theta_{ij}, \quad (7)$$

а θ_{ij} — угол связи M_i –O– M_j . Знак скалярного параметра $d_{ij}(\theta)$ можно рассматривать как знак вектора Дзялошинского. Как было показано, выражение (6) справедливо только для магнитных ионов S -типа с орбитально-невырожденным основным состоянием в предположении локальной кубической симметрии т. е. для $3d$ -ионов с наполовину заполненными оболочками ($3d^5$ или $t_{2g}^3 e_g^2$, $t_{2g}^6 e_g^2$).

Отметим, что иногда вместо (6) удобно использовать другую форму структурного фактора для вектора Дзялошинского:

$$\begin{aligned} [\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2] &= \frac{1}{2} [(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)] = \\ &= \frac{1}{2l^2} [\mathbf{R}_{12} \times \boldsymbol{\rho}_{12}], \quad (8) \end{aligned}$$

где $\mathbf{R}_{12} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$, $\boldsymbol{\rho}_{12} = (\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2)$.

Начиная с пионерских работ Дзялошинского [1] и Мориа [5], ДМ-взаимодействие интенсивно исследовалось в 60–80 годы в основном на примере слабого ферромагнетизма гематита α -Fe₂O₃ и ортоферритов RFeO₃ [8–11] (см. также обзорные статьи [12, 13]). Типичные значения угла скоса магнитных подрешеток α_D оказались порядка 0.001–0.01, в частности, $\alpha_D = 1.1 \cdot 10^{-3}$ в α -Fe₂O₃ [14], 2.2 – $2.9 \cdot 10^{-3}$ в La₂CuO₄ [15], $5.5 \cdot 10^{-3}$ в FeF₃ [16], $1.1 \cdot 10^{-2}$ в YFeO₃ [17], $1.7 \cdot 10^{-2}$ в FeBO₃ [18] (см. табл. 1).

В работе [19] в 1968 г. впервые был поставлен вопрос об определении знака вектора Дзялошинского, однако, только в 1990 г. анализ экспериментальных

спектров ЯМР ядер лиганда ¹⁹F в слабом ферромагнетике FeF₃ позволил получить надежную информацию о знаке вектора Дзялошинского, точнее, параметра d_{FeFe} [20]. В 1977 г. мы показали, что вектор Дзялошинского в парах разных $3d$ -ионов S -типа может иметь разный знак [10], что позволило открыть новое магнитное явление — слабый ферримагнетизм, и новый класс магнитных материалов, слабых ферримагнетиков — систем типа YFe_{1-x}Cr_xO₃ смешанных составов с конкурирующими знаками вектора Дзялошинского и необычными концентрационными и температурными зависимостями намагниченности [21].

Связь величины и ориентации вектора Дзялошинского с геометрией сверхобмена (6) позволила нам найти численные значения углов явного и «скрытого» скоса четырех магнитных подрешеток в редкоземельных ортоферритах [9], что получило подтверждение в экспериментах по ЯМР ⁵⁷Fe [22] и нейтронной дифракции [23]. Была установлена прямая связь неколлинеарности магнитных моментов с кристаллической структурой слабого ферромагнетика.

Возобновление живого интереса к ДМ-взаимодействию в 90-е годы было стимулировано открытием ВТСП-купратов, в частности, слабым ферромагнетизмом, наблюдаемым в родительском купрате La₂CuO₄ [15] и многими другими интересными эффектами, в частности, явлением «индуцированной полем щели» [24]. В отличие от типичных трехмерных систем, таких как ортоферриты, купраты характеризуются низкой размерностью, большим разнообразием геометрии связей Cu–O–Cu, сильными квантовыми эффектами для $s = 1/2$ Cu²⁺-центров и особенно сильной ковалентностью Cu–O, приводящей к сравнимой величине плотности заряда/спина дырок на медных и кислородных узлах.

Несколько групп (см., например, статьи [25–27]) развили микроскопическую теорию Мория для различных 1D- и 2D-купратов, используя разные схемы возмущений, разные типы низкосимметричного кристаллического поля, разные подходы к внутриатомному электрон-электронному отталкиванию. Однако, несмотря на довольно большое количество публикаций и горячие дискуссии (см., например, работу [28]), проблема обменно-релятивистских эффектов, в частности, антисимметричного обмена и связанной с ним проблемы спиновой анизотропии в купратах, остается открытой (см., например, экспериментальные данные и обсуждение в работах [13, 29–31]). Общие недостатки современных подходов к ДМ-взаимодействию в $3d$ -оксидах касаются игнорирования проблемы локализации вектора Дзялошинского и соответствующих «слабых» (анти)ферромагнитных моментов, полного пренебрежения спин-орбитальными эффектами для ионов «немагнитного» кислорода O^{2-} , которые, как обычно полагают, играют лишь косвенную промежуточную роль. С другой стороны, кислородные ^{17}O исследования ЯМР–ЯКР слабого ферромагнетика La_2CuO_4 [32, 33] свидетельствуют, по-видимому, о нетрадиционной локальной «слабоферромагнитной» поляризации кислорода, происхождение которой невозможно объяснить в рамках существующих моделей.

Все описанные выше системы так или иначе были связаны со слабыми ферромагнетиками, где ДМ-взаимодействие проявляется в «скашивании» базовой антиферромагнитной структуры. Однако это взаимодействие может вызывать гелимагнитное искажение ферромагнитного порядка, как в медно-цезиевом хлориде, $CsCuCl_3$, который представляет собой уникальный винтовой (screw) антисегнето-электрический кристалл (см., например, работы [13] и ссылки в них). Фактически, давно известно, что ДМ-взаимодействие может индуцировать длиннопериодические магнитные спиральные структуры в ферромагнитных и антиферромагнитных кристаллах, лишенных инверсионной симметрии. Этот механизм был предложен для металлического $MnSi$ и других кристаллов со структурой $B20$, причем было доказано, что знак ДМ-взаимодействия, а следовательно, и знак спиновой спирали, определяется знаком кристаллической «спирали».

Феноменологически антисимметричное ДМ-взаимодействие в континуальном приближении порождает так называемые инварианты Лифшица — вклады в энергию, линейные по первым

пространственным производным намагниченности $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ [34]

$$m_i \frac{\partial m_j}{\partial x_l} - m_j \frac{\partial m_i}{\partial x_l} \quad (9)$$

(x_l — пространственная координата). Эти киральные взаимодействия стабилизируют локализованные (вихри) и пространственно-модулированные структуры с фиксированным направлением вращения намагниченности [35]. Фактически, это единственный механизм, объясняющий происхождение наноразмерных скирмионных структур в конденсированных средах. Несмотря на явную слабость типичного ДМ-взаимодействия по сравнению с типичными изотропными обменными взаимодействиями, ДМ-взаимодействие может быть центральным ингредиентом в стабилизации сложных магнитных текстур.

Вклад ДМ-взаимодействия в плотность микромагнитной свободной энергии обычно представляют в виде

$$F(\mathbf{r}) = \sum_i \mathbf{D}_i(\mathbf{m}(\mathbf{r})) \cdot \left[\mathbf{m}(\mathbf{r}) \times \frac{\partial \mathbf{m}(\mathbf{r})}{\partial r_i} \right], \quad (10)$$

где вектор Дзялошинского $\mathbf{D}_i(\mathbf{m}(\mathbf{r}))$ считается зависящим от направления намагниченности $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ [36]. В рамках *ab initio*-теории функционала плотности (DFT) ДМ-взаимодействие часто рассчитывается по теории возмущений включением спин-орбитального взаимодействия в расчет спирали с конечным волновым вектором \mathbf{q} и выделением D_j из линейного по q члена в дисперсионном соотношении $E(\mathbf{q})$. Однако почти исключительно теоретические исследования в этом контексте в прошлом были привязаны к чисто локализованным спиновым моделям без учета влияния зарядовых флуктуаций.

В последние годы интерес сместился в сторону других проявлений ДМ-взаимодействия, таких как магнитоэлектрический эффект [37–39], где надежные теоретические предсказания отсутствовали. Все это стимулировало критический пересмотр многих старых подходов к спин-орбитальным эффектам в $3d$ -оксидах, начиная с выбора оптимальной схемы теории возмущений и модели эффективного спинового гамильтониана, подразумевающей обычно лишь косвенную промежуточную роль, которую играют «немагнитные» ионы кислорода.

В этой статье мы представляем обзор микроскопической теории ДМ-взаимодействия, слабого ферро-, антиферро- и ферримагнетизма, а также и других связанных обменно-релятивистских эффектов с акцентом на ортоферриты $RFeO_3$.

Остальная часть статьи организована следующим образом. В разд. 2 мы кратко излагаем основные результаты микроскопической теории изотропных сверхобменных взаимодействий для ионов S -типа, зависимость обменных интегралов от электронной конфигурации магнитных ионов и геометрии сверхобменной связи. Раздел 3 посвящен микроскопической теории ДМ-взаимодействия. Развивая теорию Мориа, мы даем более корректный вывод микроскопического выражения вектора Дзялошинского для $3d$ -ионов S -типа, его величины, ориентации и знака при различных типах (сверх)обменного взаимодействия и кристаллического поля. Здесь мы рассматриваем также и ДМ-взаимодействие с участием редкоземельных ионов. В разд. 4 теоретические предсказания сравниваются с экспериментальными данными для углов явного и скрытого скоса магнитных подрешеток, а также магнитной анизотропии в ортоферритах. В разд. 5 мы рассматриваем нетрадиционные свойства слабого ферромагнетизма как нового типа магнитного упорядочения в системах с конкурирующими знаками вектора Дзялошинского, в частности, особенности $4f$ – $3d$ -взаимодействия в слабых ферромагнетиках $RFe_{1-x}Cr_xO_3$ и необычные спин-переориентационные переходы в слабых ферромагнетиках с немагнитными R -ионами. В разд. 6 мы обсуждаем несколько экспериментальных методов исследования знака вектора Дзялошинского, включая μ SR положительных мюонов и лигандный ЯМР в слабых ферромагнетиках. Последняя часть статьи посвящена обменно-релятивистским эффектам, в частности, обменно-релятивистской двухионной анизотропии (разд. 7), антисимметричному косвенному сверхтонкому взаимодействию — электронно-ядерному аналогу ДМ-взаимодействия (разд. 8), антисимметричной обменно-релятивистской связи «спин-чужая орбита», определяющей необычную магнитооптику слабых ферромагнетиков (разд. 9) и антисимметричной обменно-релятивистской спин-зависимой электрической поляризации (разд. 10). Краткое заключение сделано в разд. 11.

2. МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ИЗОТРОПНОГО СВЕРХОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

ДМ-взаимодействие определяется «орбитально» недиагональным (сверх)обменным взаимодействием

и обычно сопровождается диагональным изотропным (сверх)обмен типа Гейзенберга:

$$\hat{V}_{ex} = J_{12}(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2). \quad (11)$$

Современная микроскопическая теория (сверх)обменной связи разрабатывалась многими физиками, начиная с известных работ Андерсона [40], особенно интенсивно в 1960–70-е г. (см. обзорные статьи [41]). Многочисленные работы, посвященные этой проблеме, указывали на существование многих механизмов обмена, кажущихся сопоставимыми по величине, в частности, для сверхобмена через промежуточный ион лиганда, который является наиболее интересным для сильнокоррелированных систем, таких как $3d$ -оксиды. К сожалению, до сих пор у нас нет надежных оценок параметров обмена, хотя, с другой стороны, у нас нет и надежной экспериментальной информации об их величинах. В связи с этим многие усилия были сосредоточены на фундаментальных вопросах, таких как разработка многоэлектронной теории, орбитальной зависимости [7, 42–44], эффектов кристаллического поля [45], недиагонального обмена [46], обмена в возбужденных состояниях [47], угловой зависимости сверхобменной связи [7]. Неприводимые тензорные операторы (алгебра Рака) оказались очень удобным инструментом как для описания, так и для анализа обменной связи в $3d$ - и $4f$ -системах [7, 42–45].

Первый микроскопический вывод зависимости сверхобменного интеграла от угла связи (см. рис. 2) был выполнен автором в 1970 г. [7] при упрощенных предположениях. Для S -ионов с конфигурацией $3d^5$ (Fe^{3+} , Mn^{2+}) угловая зависимость сверхобменного интеграла имеет вид

$$J_{12}(\theta) = a + b \cos \theta_{12} + c \cos^2 \theta_{12}, \quad (12)$$

где параметры a , b , c зависят от длины связей катион–анион. Параметры a и c определяются вкладом $2p$ -оболочки лигандов, тогда как слагаемое, пропорциональное $\cos \theta_{12}$, определяется вкладом низкоэнергетических межконфигурационных переходов $2p \rightarrow 3s$.

Позднее этот вывод был обобщен для $3d$ -ионов в сильном кубическом кристаллическом поле [11]. Орбитально-изотропный вклад в обменный интеграл для пары $3d$ -ионов с конфигурациями $t_{2g}^{n_1} e_g^{n_2}$ может быть представлен следующим образом:

$$J = \sum_{\gamma_i, \gamma_j} J(\gamma_i \gamma_j) (g_{\gamma_i} - 1) (g_{\gamma_j} - 1), \quad (13)$$

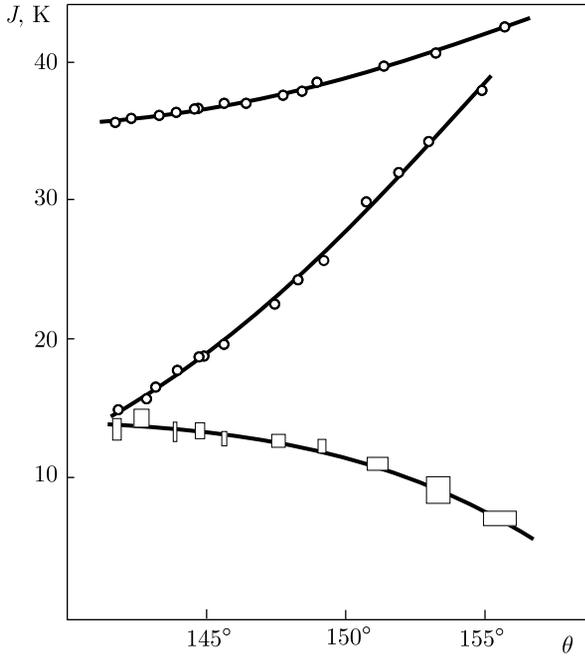


Рис. 2. Зависимость обменных интегралов $\text{Fe}^{3+}-\text{Fe}^{3+}$, $\text{Cr}^{3+}-\text{Cr}^{3+}$, $\text{Fe}^{3+}-\text{Cr}^{3+}$ от угла сверхобменной связи в ортоферритах и ортохромитах [49]

где $g_{\gamma_i}, g_{\gamma_j}$ — эффективные « g -факторы» для γ_i, γ_j соответственно подоболочек ионов 1 и 2:

$$g_{\gamma_i} = 1 + \frac{S(S+1) + S_i(S_i+1) - S_j(S_j+1)}{2S(S+1)}. \quad (14)$$

Вклад кинетического обмена в парциальные обменные параметры $I(\gamma_i\gamma_j)$, определяемые переносом электрона в частично заполненные оболочки, может быть представлен как [11, 45]

$$J(e_g e_g) = \frac{(t_{ss} + t_{\sigma\sigma} \cos \theta)^2}{2U}, \quad J(e_g t_{2g}) = \frac{t_{\sigma\pi}^2}{3U} \sin^2 \theta, \\ J(t_{2g} t_{2g}) = \frac{2t_{\pi\pi}^2}{9U} (2 - \sin^2 \theta), \quad (15)$$

где $t_{\sigma\sigma} > t_{\pi\sigma} > t_{\pi\pi} > t_{ss}$ — положительно определенные интегралы $d-d$ -переноса, U — средняя энергия $d-d$ -переноса (энергия корреляции). Все парциальные обменные интегралы оказываются положительными или антиферромагнитными независимо от значения угла сверхобменной связи, хотя «перекрестный» эффект ss - и $\sigma\sigma$ -связей, пропорциональных $\cos \theta$, в $J(e_g e_g)$ дает ферромагнитный вклад при углах связи $\pi/2 < \theta < \pi$. Следует отметить, что «большой» вклад ферромагнитного потенциально обмена [48] имеет аналогичную угловую зависимость [47].

Некоторые предсказания относительной величины параметров обмена $J(\gamma_i\gamma_j)$ можно сделать, используя соотношение между различными интегралами $d-d$ -переноса:

$$t_{\sigma\sigma} : t_{\pi\sigma} : t_{\pi\pi} : t_{ss} \approx \lambda_\sigma^2 : \lambda_\pi \lambda_\sigma : \lambda_\pi^2 : \lambda_s^2, \quad (16)$$

где $\lambda_\sigma, \lambda_\pi, \lambda_s$ — параметры ковалентности. Упрощенный вклад кинетического обмена (15), связанный с переносом электрона в частично заполненные оболочки, не учитывает внутрицентровых корреляций, которые имеют особое значение для вклада, связанного с переносом электрона в пустые оболочки. Например, соответствующие вклады, связанные с переносом в пустую подоболочку e_g для обменных интегралов $\text{Cr}^{3+}-\text{Cr}^{3+}$ и $\text{Fe}^{3+}-\text{Cr}^{3+}$, имеют вид

$$\Delta J_{CrCr} = -\frac{\Delta E(35)}{6U} \frac{t_{\sigma\pi}^2}{U} \sin^2 \theta;$$

$$\Delta J_{FeCr} = -\frac{\Delta E(35)}{10U} \times \left[\frac{(t_{ss} + t_{\sigma\sigma} \cos \theta)^2}{U} + \frac{t_{\sigma\pi}^2}{U} \sin^2 \theta \right], \quad (17)$$

где $\Delta E(35)$ — разность энергий термов 3E_g и 5E_g для конфигурации $t_{2g}^3 e_g$ (Cr^{2+} -ион). Очевидно, что эти вклады имеют «ферромагнитный знак». В результате, обменный интеграл $J(\text{CrCr})$ может сменить знак при $\theta = \theta_{cr}$:

$$\sin^2 \theta_{cr} = \left(\frac{1}{2} + \frac{3}{8} \frac{\Delta E(35)}{U} \frac{t_{\sigma\pi}^2}{t_{\pi\pi}^2} \right)^{-1}. \quad (18)$$

Теоретическая угловая зависимость сверхобменных интегралов хорошо описывает экспериментальные данные для обменных интегралов $J(\text{FeFe})$, $J(\text{CrCr})$, и $J(\text{FeCr})$ в ортоферритах, ортохромитах и ортоферритах-ортохромитах [49] (см. рис. 2). Подгонка позволяет нам предсказать смену знака для $J(\text{CrCr})$ и $J(\text{FeCr})$ соответственно при $\theta_{12} \approx 133^\circ$ и 170° . Другими словами, сверхобменная связь $\text{Cr}^{3+}-\text{O}^{2-}-\text{Cr}^{3+}$ ($\text{Fe}^{3+}-\text{O}^{2-}-\text{Cr}^{3+}$) становится ферромагнитной при $\theta_{12} \leq 133^\circ$ ($\theta_{12} \geq 170^\circ$). Однако следует отметить, что слишком узкий ($141^\circ-156^\circ$) диапазон углов сверхобменной связи, который мы использовали для подгонки с предположением одинаковых длин связи $\text{Fe}(\text{Cr})-\text{O}$ и средних углов сверхобменных связей для всех систем приводят к значительной неопределенности параметров, в частности, для $J(\text{FeFe})$ и $J(\text{FeCr})$. Кроме того, необходимо отметить большую неопределенность в отношении «экспериментальных»

значений обменных интегралов. Дело в том, что «экспериментальные» обменные интегралы, которые мы использовали, рассчитывались на основе простого приближения среднего поля

$$T_N = \frac{zS(S+1)}{3k_B} J, \quad (19)$$

однако это соотношение дает обменные интегралы ($J = 36.8$ К в YFeO_3), которые могут быть в полтора-два раза меньше полученных другими методами [11, 50, 51]. Так, недавние экспериментальные данные дают для YFeO_3 $J_c = 58.2$ К, $J_{ab} = 53.6$ К [52] или $J_c = J_{ab} = 51.5$ К [53].

Выше мы рассматривали только типичный антиферромагнитный кинетический сверхобменный вклад как результат теории возмущений второго порядка. Однако на самом деле этот вклад реально конкурирует с типичным вкладом ферромагнитного потенциального сверхобмена или обмена Гейзенберга, который является результатом теории возмущений первого порядка. Наиболее важный потенциальный вклад в сверхобмен может быть связан с внутриаомным ферромагнитным обменным взаимодействием Хунда неспаренных электронов на ортогональных лигандных орбиталях, гибридных с d -орбиталями двух ближайших магнитных катионов.

Сильная зависимость сверхобменных d - d -интегралов от расстояния катион-лиганд-катион обычно описывается «правилом Блоха» [54]:

$$\frac{\partial \ln J}{\partial \ln R} = \frac{\partial J}{\partial R} / \frac{J}{R} \approx -10. \quad (20)$$

3. МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЗЯЛОШИНСКОГО – МОРИЯ

3.1. Теория Мория

Первая микроскопическая теория слабого ферромагнетизма была предложена Мория [5], который расширил теорию сверхобмена Андерсона, включив спин-орбитальную связь

$$V_{so} = \sum_i \xi(\mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i).$$

Мория начал с одноэлектронного гамильтониана для d -электронов

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{fm\sigma} \epsilon_m \hat{d}_{fm\sigma}^\dagger \hat{d}_{fm\sigma} + \\ & + \sum_{m \neq m', \sigma} t_{fmf'm'} \hat{d}_{fm\sigma}^\dagger \hat{d}_{f'm'\sigma} + \\ & + \sum_{fm \neq f'm', \sigma\sigma'} \hat{d}_{fm\sigma}^\dagger (\mathbf{C}_{fmf'm'} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \hat{d}_{f'm'\sigma'}, \end{aligned} \quad (21)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{fmf'm'} = & -\frac{\xi}{2} \sum_{m''} \left(\frac{\mathbf{l}_{fmf'm''} t_{f'm''f'm'}}{\epsilon_{m''} - \epsilon_m} + \right. \\ & \left. + \frac{t_{fmf'm''} \mathbf{l}_{f'm''f'm'}}{\epsilon_{m''} - \epsilon_{m'}} \right) \end{aligned} \quad (22)$$

— спин-орбитальная поправка к интегралу переноса. Затем Мория вычислил обобщенный кинетический обмен Андерсона, который содержит как обычный изотропный обмен, так и анизотропные симметричные и антисимметричные члены, т.е. квазидипольную анизотропию и ДМ-взаимодействие соответственно. Выражение для вектора Дзялошинского

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_{ff'} = & \frac{4i}{U} \times \\ & \times \sum_{m \neq m'} [t_{fmf'm'} \mathbf{C}_{f'm'fm} - \mathbf{C}_{fmf'm'} t_{f'm'fm}] \end{aligned} \quad (23)$$

было получено Мория в предположении орбитально-невырожденных основных состояний m и m' соответственно на узлах f и f' . Следует отметить, что спин-операторная форма антисимметричного обмена Дзялошинского – Мория следует из соотношения

$$\mathbf{S}_1(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) + (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)\mathbf{S}_2 = -i[\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2]. \quad (24)$$

Мория установил симметричные ограничения на ориентацию вектора Дзялошинского \mathbf{d}_{ij} . Пусть два иона 1 и 2 расположены соответственно в точках А и В, причем точка С пересекает линию АВ пополам:

1. Когда С — центр инверсии: $\mathbf{d}_{12} = 0$;
2. Когда зеркальная плоскость, перпендикулярная АВ, проходит через С, \mathbf{d}_{12} параллельно зеркальной плоскости или $\mathbf{d}_{12} \perp \text{AB}$;
3. Когда есть зеркальная плоскость, включающая А и В, \mathbf{d}_{12} перпендикулярно зеркальной плоскости;
4. Когда поворотная ось второго порядка $C_2 \perp \text{AB}$ проходит через С, $\mathbf{d}_{12} \perp C_2$;
5. Когда имеется n -кратная ось ($n \geq 2$) вдоль АВ, $\mathbf{d}_{12} \parallel \text{AB}$.

Несмотря на кажущуюся простоту, операторная форма ДМ-взаимодействия (4) вызывает некоторые

вопросы. Во-первых, в отличие от скалярного произведения ($\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$), векторное произведение спиновых операторов $[\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2]$ меняет спиновую мультиплетность, т. е. полный спин $\mathbf{S}_{12} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$, что подчеркивает необходимость квантового описания. Спиновая недиагональность ДМ-взаимодействия влечет за собой очень необычные свойства вектора \mathbf{d}_{12} , несколько напоминающие векторный орбитальный оператор, трансформационные свойства которого не могут быть изолированы от решетки [55]. Кажется, что вектор \mathbf{d}_{12} вообще не преобразуется как обычный вектор.

Другая проблема, вызывающая некоторые вопросы, это структура и локализация вектора \mathbf{d}_{12} и соответствующих спиновых скосов. Очевидно, что вектор \mathbf{d}_{12} должен быть так или иначе связан со спин-орбитальными вкладами, локализованными на узлах 1 и 2. Эти компоненты могут различаться по своей величине и направлению, тогда как операторная форма (4) подразумевает некоторое усреднение как для вектора \mathbf{d}_{12} , так и скоса спиновых моментов на двух узлах.

Мория не учитывал эффекты симметрии и силы кристаллического поля и не уточнял характер (сверх)обменной связи, которая, как мы увидим ниже, может кардинально влиять на направление и величину вектора Дзялошинского вплоть до его обращения в нуль. Кроме того, он использовал очень упрощенную форму (22) поправки на спин-орбитальное возмущение к интегралу переноса (см. соотношение (2.5) в работе [5]). Дело в том, что структура элементов матрицы переноса заряда подразумевает участие нескольких различных локальных конфигураций ($t_{kn} \propto \langle N_1 - 1N_2 + 1 | \hat{H} | N_1N_2 \rangle$). Следовательно, поправки теории возмущения должны быть более сложными, чем (22), по крайней мере, они должны включать спин-орбитальные матричные элементы (и энергии возбуждения!) для одной и двухчастичных конфигураций. В результате это делает спорным вывод автора об эквивалентности двух схем возмущений, основанный на поправках V_{SO} к интегралу переноса и обменному взаимодействию. Другое ограничение теории Мория связано с полным игнорированием спин-орбитального вклада лиганда в ДМ-взаимодействие. Несмотря на эти недостатки, оценка Мория для отношения между модулями вектора Дзялошинского $d = |\mathbf{d}|$ и изотропного обмена J : $d/J \approx \Delta g/g$, где g — гиромагнитное отношение, Δg — его отклонение от значения для свободных электронов, соответственно, в некоторых случаях может быть полезно, однако только для очень грубой оценки.

3.2. Микроскопическая теория взаимодействия Дзялошинского – Мория: сверхобменное взаимодействие S-ионов

Первая микроскопическая теория ДМ-взаимодействия для сверхобменной связи M_1-O-M_2 , предложенная автором [7] (см. также работы [10–13, 56]) предполагала взаимодействие «свободных» ионов с основным состоянием 6S конфигурации $3d^5$ (Mn^{2+} , Fe^{3+}), взаимодействующих через промежуточный анион типа O^{2-} . Окончательное выражение для вектора Дзялошинского имело следующий вид:

$$\mathbf{d}_{12} = d_{12}(\theta_{12})[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2], \quad (25)$$

причем

$$d_{12}(\theta) = d_1(R_{10}, R_{20}) + d_2(R_{10}, R_{20}) \cos \theta_{12}, \quad (26)$$

где первый и второй члены определяются механизмами сверхобмена, связанными соответственно с межконфигурационными возбуждениями $2p \rightarrow 3s$ лигандов и внутриконтфигурационными эффектами $2p-2p$. Следует отметить, что при $\theta = \theta_{cr}$, где

$$\cos \theta_{cr} = -d_1/d_2 \quad (27)$$

вектор Дзялошинского меняет знак.

Однако позже было показано [10, 11, 56], что правильная теория ДМ-взаимодействия даже для ионов S-типа должна учитывать эффекты кристаллического поля. В качестве наиболее наглядного примера мы рассматриваем пару ионов с конфигурацией $3d^5$, таких как Fe^{3+} или Mn^{2+} с основным состоянием 6S в промежуточном октаэдрическом кристаллическом поле, которое приводит к расщеплению термов ${}^{2S+1}L$ на кристаллические термы ${}^{2S+1}L\Gamma$ и смешиванию термов с одинаковой октаэдрической симметрией, т. е. с тем же Γ [57]. Спин-орбитальная связь смешивает основное состояние 6S с термом ${}^4PT_{1g}$, однако этот терм смешивается с другими термами ${}^4T_{1g}$, ${}^4FT_{1g}$ и ${}^4GT_{1g}$. Именно последний эффект оказывается решающим фактором для появления ДМ-взаимодействия. Волновые функции $|4(L)T_{1g}\rangle$ могут быть легко вычислены стандартным методом [57] и имеют следующий вид [11]:

$$\begin{aligned} |4(P)T_{1g}\rangle &= 0.679|4PT_{1g}\rangle - 0.604|4FT_{1g}\rangle + \\ &\quad + 0.418|4GT_{1g}\rangle, \\ |4(F)T_{1g}\rangle &= 0.387|4PT_{1g}\rangle + 0.777|4FT_{1g}\rangle + \\ &\quad + 0.495|4GT_{1g}\rangle, \\ |4(G)T_{1g}\rangle &= -0.604|4PT_{1g}\rangle - 0.169|4FT_{1g}\rangle + \\ &\quad + 0.737|4GT_{1g}\rangle, \end{aligned} \quad (28)$$

Таблица 2. Волновые функции и энергии термов ${}^4T_{1g}$ для иона Fe^{3+} в ортоферритах

Волновая функция	Энергия, см^{-1}
$ {}^4T_{1g}(41)\rangle = 0.988 t_{2g}^4e_g^{14}T_{1g}\rangle - 0.123 t_{2g}^3e_g^{24}T_{1g}\rangle + 0.088 t_{2g}^2e_g^{34}T_{1g}\rangle$	$E(41) = 0.96 \cdot 10^4$
$ {}^4T_{1g}(32)\rangle = 0.058 t_{2g}^4e_g^{14}T_{1g}\rangle + 0.844 t_{2g}^3e_g^{24}T_{1g}\rangle - 0.534 t_{2g}^2e_g^{34}T_{1g}\rangle$	$E(32) = 2.96 \cdot 10^4$
$ {}^4T_{1g}(23)\rangle = -0.140 t_{2g}^4e_g^{14}T_{1g}\rangle - 0.522 t_{2g}^3e_g^{24}T_{1g}\rangle + 0.841 t_{2g}^2e_g^{34}T_{1g}\rangle$	$E(23) = 3.69 \cdot 10^4$

с учетом параметров кристаллического поля и внутриаомных корреляций [57], типичных для ортоферритов [58]: $10Dq = 12200 \text{ см}^{-1}$; $B = 700 \text{ см}^{-1}$; $C = 2600 \text{ см}^{-1}$. Мы видим, что из-за эффекта смешивания термов одинаковой симметрии в кристаллическом поле все три кристаллических члена, ${}^4PT_{1g}$, ${}^4FT_{1g}$, ${}^4CT_{1g}$, будут вносить вклад в ДМ-взаимодействие. Кроме того, результирующий вклад будет определяться смешиванием 4P - 4G [56]. Однако взаимодействие $3d$ -ионов в системах типа оксидов и фторидов чаще принято рассматривать в схеме сильного кристаллического поля. Ниже мы рассмотрим ДМ-взаимодействие для магнитных $3d$ -ионов S -типа с орбитально-невырожденным высокоспиновым основным состоянием в сильном кубическом кристаллическом поле, т.е. для $3d$ -ионов с наполовину заполненными оболочками t_{2g}^3 , $t_{2g}^3e_g^2$, $t_{2g}^6e_g^2$ и основными состояниями соответственно ${}^4A_{2g}$, ${}^6A_{1g}$, ${}^3A_{2g}$ [10, 11, 56]. В частности, для термов ${}^4T_{1g}$ $3d^5$ -ионов в приближении сильного кубического кристаллического поля вместо выражений (28) мы приходим к волновым функциям конфигураций $t_{2g}^{n_1}e_g^{n_2}$, как показано в табл. 2. Используя выражения для спин-орбитальной связи V_{SO} и основного кинетического вклада в параметры сверхобмена, которые определяют ДМ-взаимодействие, после достаточно рутинной алгебры, мы показали, что ДМ-взаимодействие может быть записано в стандартной форме (25), где d_{12} можно записать как [10, 11, 56]

$$d_{12} = X_1Y_2 + X_2Y_1, \quad (29)$$

причем множители X и Y отражают обменно-релятивистскую структуру соответствующего вклада теории возмущений второго порядка и детали электронной конфигурации для иона S -типа. Для обменных множителей X получаем

$$X_i = \frac{(g_{e_g}^{(i)} - 1)}{2U} t_{\pi\sigma} (t_{ss} + t_{\sigma\sigma} \cos \theta) - \frac{(g_{t_{2g}}^{(i)} - 1)}{3U} t_{\pi\pi} t_{\sigma\pi} \cos \theta, \quad (30)$$

где $g_{e_g}^{(i)}$, $g_{t_{2g}}^{(i)}$ — эффективные « g -факторы» (см. выше) соответственно для e_g -, t_{2g} -подоболочек, $t_{\sigma\sigma} > t_{\pi\sigma} > t_{\pi\pi} > t_{ss}$ — положительно определенные интегралы d - d -переноса, U — энергия d - d -переноса (энергия корреляции). Общий вид безразмерных коэффициентов Y , определяемых спин-орбитальными константами и энергиями возбуждения, более сложен (см., например, работу [56]). Коэффициенты X и Y представлены в табл. 3 для $3d$ -ионов S -типа, где ξ_{3d} — спин-орбитальный параметр, $\Delta E_{2S+1\Gamma}$ — энергия возбужденного кристаллического терма ${}^{2S+1}\Gamma$, взаимодействующего с основным состоянием за счет V_{SO} .

Знаки коэффициентов X и Y в табл. 3 предсказаны для довольно больших углов сверхобменной связи $|\cos \theta_{12}| > t_{ss}/t_{\sigma\sigma}$, которые типичны для многих $3d$ -соединений, таких как оксиды, и отношения $\Delta E_{4T_{1g}}(41) < \Delta E_{4T_{1g}}(32)$, типичного для высокоспиновой конфигурации $3d^5$. Возбужденная конфигурация $t_{2g}^2e_g^3$ не дает вклада в ДМ-взаимодействие для $3d^5$ -ионов.

Стоит отметить, что ранее мы выявили и исправили случайную ошибку в знаке параметров X_i , допущенную как в наших предыдущих статьях [10, 11], так и в недавней статье [12]. Здесь и далее мы используем правильные знаки для X_i в (30) и табл. 3 [56].

Довольно простые выражения для множителей X_i и Y_i получены без учета эффектов смешивания/взаимодействия термов ${}^{2S+1}\Gamma$ одинаковой симметрии и вклада пустых подоболочек в обменную связь (см. работу [11]). Тем не менее данные табл. 3 позволяют нам оценить как численное значение, так и знак параметров d_{12} .

Следует отметить, что для критического угла θ_{cr} смены знака вектора Дзялошинского имеем

$$\cos \theta_{cr} = -d_1/d_2 = \lambda_s^2/\lambda_\sigma^2$$

для пар d^8 - d^8 и

$$\cos \theta_{cr} = \lambda_s^2/(\lambda_\sigma^2 - \lambda_\pi^2)$$

для пар d^5 - d^5 . Используя различные экспериментальные данные для параметров ковалентности

Таблица 3. Выражения для коэффициентов X и Y , определяющих величину и знак вектора Дзялошинского в парах $3d$ -ионов S -типа с локальной октаэдрической симметрией. Знаки коэффициентов X_i соответствуют углам сверхобменной связи $\theta > \theta_{cr}$

Основное состояние	X	Знак X	Y	Знак Y	Возбужденное состояние
$3d^3(t_{2g}^3):^4A_{2g}$ V^{2+}, Cr^{3+}, Mn^{4+}	$-\frac{1}{3U}t_{\pi\pi}t_{\sigma\pi}\cos\theta$	+	$\frac{2\xi_{3d}}{3\sqrt{3}}\left(\frac{1}{\Delta E_{4T_{2g}}} + \frac{2}{\Delta E_{2T_{2g}}}\right)$	+	$t_{2g}^2e_g^1$
$3d^5(t_{2g}^3e_g^2):^6A_{1g}$ Mn^{2+}, Fe^{3+}	$-\frac{1}{5U}(t_{\pi\pi}t_{\sigma\pi}\cos\theta - t_{\pi\sigma}(t_{ss} + t_{\sigma\sigma}\cos\theta))$	-	$-\frac{6\xi_{3d}}{5\sqrt{3}}\left(\frac{1}{\Delta E_{4T_{1g}}(41)} - \frac{1}{\Delta E_{4T_{1g}}(23)}\right)$	-	$t_{2g}^4e_g^1, t_{2g}^2e_g^3$
$3d^8(t_{2g}^6e_g^2):^3A_{2g}$ Ni^{2+}, Cu^{3+}	$\frac{1}{2U}t_{\pi\sigma}(t_{ss} + t_{\sigma\sigma}\cos\theta)$	-	$\frac{3\xi_{3d}}{2\sqrt{3}}\left(\frac{1}{\Delta E_{3T_{2g}}} + \frac{1}{\Delta E_{1T_{2g}}}\right)$	+	$t_{2g}^5e_g^3$

(см., например, работу [59]), мы приходим к $d_1/d_2 \sim 1/5 - 1/3$ и $\theta_{cr} \approx 100^\circ - 110^\circ$ для пар $Fe^{3+}-Fe^{3+}$ в оксидах.

Соотношение между различными множителями X при типичных для ортоферритов $RFeO_3$ и ортохромитов $RCrO_3$ геометрии сверхобмена и параметрах ковалентности выглядит как [11]

$$|X_{d^8}| \geq |X_{d^3}| \geq |X_{d^5}|, \quad (31)$$

тем не менее, следует подчеркнуть их зависимость от геометрии сверхобмена и параметров ковалентности. Простое сравнение обменных множителей X (см. (30) и табл. 3) с обменными параметрами $I(\gamma_i\gamma_j)$ (15) свидетельствует о их сравнимой величине. Соотношение (16) позволяет установить более определенное соответствие. При типичных величинах параметра кристаллического поля $10Dq \approx 1.5$ эВ мы получим следующие соотношения между различными множителями Y [11]:

$$|Y_{d^8}| \geq |Y_{d^5}| \geq |Y_{d^3}|, \quad (32)$$

причем $Y_{d^8} \approx 7.0 \cdot 10^{-2}$, $Y_{d^5} \approx -2.5 \cdot 10^{-2}$, $Y_{d^3} \approx 1.5 \cdot 10^{-2}$.

Наибольшее значение коэффициента d_{12} предсказывается для пар d^8-d^8 , а для пар d^5-d^5 можно ожидать гораздо меньшего (может быть, на порядок) значения. Для пар d^3-d^3 этот коэффициент будет, по видимому, несколько выше значения для пар d^5-d^5 . Для разных пар: $d_{12}(d^3-d^5) \approx -d_{12}(d^3-d^3)$; $d_{12}(d^8-d^5) \approx d_{12}(d^5-d^5)$; $d_{12}(d^3-d^8) \geq d_{12}(d^3-d^3)$. Удивительно, но, несмотря на сильную изотропную обменную связь для пар d^5-d^5 и d^5-d^8 , ДМ-взаимодействие для них ожидается быть наименьшим среди пар ионов S -типа. Для пар d^5-d^5 , в частности $Fe^{3+}-Fe^{3+}$, мы имеем два компенсационных эффек-

Таблица 4. Теоретические предсказания знаков векторов Дзялошинского в парах $3d$ -ионов S -типа с локальной октаэдрической симметрией и углом сверхобменной связи $\theta > \theta_{cr}$

$3d^n$	$3d^3(t_{2g}^3)$	$3d^5(t_{2g}^3e_g^2)$	$3d^8(t_{2g}^6e_g^2)$
$3d^3(t_{2g}^3)$	+	-	+
$3d^5(t_{2g}^3e_g^2)$	-	+	+
$3d^8(t_{2g}^6e_g^2)$	+	+	-

та. Во-первых, вклад σ -связи в множитель X частично компенсируется вкладом π -связи, во-вторых, вклад от термина $^4T_{1g}$ конфигурации $t_{2g}^4e_g^1$ частично компенсируется вкладом от термина $^4T_{1g}$ конфигурации $t_{2g}^2e_g^3$.

Теоретические предсказания «исправленного» знака вектора Дзялошинского в парах $3d$ -ионов S -типа с локальной октаэдрической симметрией (правила знаков) представлены в табл. 4. Знаки для пар d^3-d^3 , d^5-d^5 , и d^3-d^8 оказываются одинаковыми, но противоположными знакам для пар d^3-d^5 и d^8-d^8 . Подобно тому, как разные знаки обычного обменного интеграла определяют разный (ферро-антиферро) магнитный порядок, разные знаки векторов Дзялошинского создают возможность неоднородного (ферро-антиферро) упорядочения локальных слабых (анти)ферромагнитных моментов, или локальный явный/скрытый скос магнитных моментов. Новое магнитное явление и новый класс магнитных материалов, которые представляют собой системы типа твердых растворов $YFe_{1-x}Cr_xO_3$ с конкурирующими знаками векторов Дзялошинского, будут рассмотрены ниже (см. разд. 5) подробнее.

3.3. DM-взаимодействие в тригональных гематите $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ и борате FeVO_3

Применяя нашу теорию, предполагающую идеальную октаэдрическую симметрию ионов S -типа, к классическому слабому ферромагнетизму $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, мы приходим к несколько неожиданному выводу, поскольку теория предсказывает, что вклад трех эквивалентных сверхобменных связей $\text{Fe}^{3+}\text{-O}^{2-}\text{-Fe}^{3+}$ для двух FeO_6^{9-} -октаэдров в суммарный вектор Дзялошинского строго обращается в нуль. Точно такой же результат будет получен, если рассмотреть прямой обмен $\text{Fe}^{3+}\text{-Fe}^{3+}$ в системе двух идеальных FeO_6^{9-} -октаэдров, связанных через три общих иона кислорода, когда $\mathbf{R}_{12} \parallel C_3$. Очевидно, что именно этот факт является причиной столь малой величины угла скоса магнитных подрешеток в гематите, который на порядок меньше, чем, например, в ортоферритах RFeO_3 или борате FeVO_3 . Так в чем же истинная природа слабого ферромагнетизма в гематите $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, ставшем исторически первым слабым ферромагнетиком? Каково микроскопическое происхождение ненулевого вектора Дзялошинского, который должен быть направлен вдоль оси симметрии C_3 согласно правилам Мория? Прежде всего, мы должны обратить внимание на тригональные искажения октаэдров FeO_6^{9-} , которые обладают симметрией T_2 и приводят к смешиванию термов ${}^4T_{1g}$ с термами ${}^4A_{2g}$ и ${}^4T_{2g}$. В принципе, лучший способ решить проблему, это использовать систему координат, в которой ось O_z направлена вдоль оси симметрии C_3 , а не обычно применяемую геометрию $O_z \parallel C_4$ [56]. Симметричный анализ показывает, что аксиальное искажение вдоль связи $\text{Fe}_1^{3+}\text{-Fe}_2^{3+}$ может индуцировать DM-взаимодействие с вектором Дзялошинского, направленным вдоль связи, однако только для локально неэквивалентных центров Fe^{3+} , иначе мы приходим к точной компенсации вкладов спин-орбитальных взаимодействий на узлах 1 и 2 [56].

Тригональный гематит $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ имеет ту же кристаллическую симметрию $R\bar{3}c - D_{3d}^6$, что и слабый ферромагнетик FeVO_3 . Кроме того, борат может быть «преобразован» в гематит за счет замещения ионов V^{3+} на Fe^{3+} со смещением как «старых», так и «новых» ионов железа вдоль тригональной оси. В результате мы приходим к появлению дополнительной сильной изотропной (сверх)обменной связи нецентросимметричных октаэдров FeO_6 через три общих кислорода с короткими расстояниями Fe-O (1.942 Å), что определяет очень высокую температуру Нееля $T_N = 948$ К в гематите по сравнению с

$T_N = 348$ К в борате. Однако симметрия D_{3h} этих обменных связей указывает на четкую компенсацию вклада двух ионов Fe в вектор Дзялошинского. Другими словами, слабый ферромагнетизм в гематите $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ определяется DM-взаимодействием для тех же связей Fe-O-Fe , что и в борате FeVO_3 . Однако длина связей Fe-O в гематите (2.111 Å) заметно больше, чем в борате (2.028 Å), что указывает на значительно более слабое DM-взаимодействие. Комбинация более слабого DM-взаимодействия и более сильного изотропного обмена в $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ по сравнению с FeVO_3 действительно объясняет разницу на один порядок в углах скоса магнитных подрешеток.

3.4. DM-взаимодействие с участием редкоземельных ионов

Спин-орбитальное взаимодействие для редкоземельных ионов с валентной конфигурацией $4f^n$ диагонально на базисе $(LS)J$ -мультиплетов, так что обычное DM-взаимодействие

$$\hat{H}_{DM}^{ff} = \sum_{m>n} (\mathbf{d}_{mn} \cdot [\mathbf{S}_m \times \mathbf{S}_n]) = \sum_{m>n} (g_m - 1)(g_n - 1)(\mathbf{d}_{mn} \cdot [\mathbf{J}_m \times \mathbf{J}_n]) \quad (33)$$

($g_{m,n}$ — факторы Ланде) может появиться для сверхобмена $f\text{-O-}f$ только благодаря спин-орбитальному взаимодействию на промежуточном лиганде. Очевидно, что для сверхобмена R-ион — $3d$ -ион мы имеем дополнительный вклад спин-орбитального взаимодействия для $3d$ -иона. DM-взаимодействие R-ион — $3d$ -ион $\text{R}^{3+}\text{-O}^{2-}\text{-Fe}^{3+}$ ($\text{R} = \text{Nd}, \text{Gd}$)

$$\hat{H}_{DM}^{fd} = \sum_{m>n} (\mathbf{d}_{mn} \cdot [\mathbf{J}_m \times \mathbf{S}_n]) \quad (34)$$

рассматривалось теоретически и экспериментально в работах [60, 61].

Эффективное поле на R-ионе может быть представлено в виде суммы ферро- и антиферромагнитного вкладов:

$$\mathbf{H}_{fd} = \alpha \mathbf{F} + \overset{\leftrightarrow}{\beta} \mathbf{G}, \quad (35)$$

где α определяет вклад изотропного обмена $f\text{-}d$, тогда как тензор $\overset{\leftrightarrow}{\beta}$ описывает вклад симметричных и антисимметричных анизотропных взаимодействий $f\text{-}d$. Эти взаимодействия исследовались в GdFeO_3 [60], причем авторы нашли, что

$$\alpha F_z = -0.19;$$

$$\beta_{zx} G_x = (\beta_{zx}^s + \beta_{zx}^a) G_x = -0.05 + 0.21 = 0.16 \quad (36)$$

(в Тесла). Довольно неожиданно оказалось, что антисимметричный антиферромагнитный вклад $\beta_{zx}^a G_x$ в эффективное поле на ионах Gd^{3+} в фазе Γ_4 при $T = 0$ К, который определяется ДМ-взаимодействием $f-d$, является ведущим вкладом. Более того, согласно данным работы [61], в $GdCrO_3$

$$\alpha F_z = -0.13,$$

$$\beta_{zx} G_x = (\beta_{zx}^s + \beta_{zx}^a) G_x = +0.05 - 0.47 = -0.42, \quad (37)$$

т. е. ДМ-взаимодействие $f-d$ имеет еще большую величину, чем в $GdFeO_3$, однако с противоположным знаком, что согласуется с противоположными знаками коэффициента Y для Fe^{3+} и Cr^{3+} (см. табл. 3).

4. ПРЕДСКАЗАНИЯ ТЕОРИИ В СРАВНЕНИИ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

4.1. Взаимодействие Дзялошинского в ортоферритах

Четыре иона Fe^{3+} занимают позиции $4b$ в орторомбической элементарной ячейке ортоферритов $RFeO_3$ (пространственная группа $Pbnm$):

$$1 (1/2, 0, 0); 2 (1/2, 0, 1/2); 3 (0, 1/2, 1/2); 4 (0, 1/2, 0).$$

Классические базисные векторы магнитной структуры для $3d$ -подрешетки определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} 4S\mathbf{F} &= \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_4, \\ 4S\mathbf{G} &= \mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3 - \mathbf{S}_4, \\ 4S\mathbf{C} &= \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 - \mathbf{S}_3 - \mathbf{S}_4, \\ 4S\mathbf{A} &= \mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2 - \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_4. \end{aligned} \quad (38)$$

Здесь \mathbf{G} описывает основную антиферромагнитную компоненту магнитной структуры, \mathbf{F} — вектор ферромагнетизма (явный скос подрешеток), слабые антиферромагнитные компоненты \mathbf{C} и \mathbf{A} описывают скос магнитных подрешеток без суммарного магнитного момента (скрытый скос подрешеток). «Разрешенные» спиновые конфигурации для $3d$ -подрешетки обозначаются как $\Gamma_1 (A_x, G_y, C_z)$, $\Gamma_2 (F_x, C_y, G_z)$, $\Gamma_4 (G_x, A_y, F_z)$, где в скобках фигурируют единственные отличные от нуля компоненты базисных векторов. Отметим, что в литературе можно найти разные варианты нумерации позиций ионов Fe^{3+} (см., например, работы [53, 62]), так что базисные векторы \mathbf{G} , \mathbf{C} , \mathbf{A} могут различаться знаком.

В простейшем классическом приближении оператор симметричных и антисимметричных обменных $d-d$ -взаимодействий в ортоферритах

$$\hat{H} = \sum_{i>j} J_{ij} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) + \sum_{i>j} (d_{ij} \cdot [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j]) \quad (39)$$

можно записать в терминах базисных векторов как свободную энергию следующим образом (см., например, работу [11] и ссылки в ней):

$$\begin{aligned} \Phi &= \frac{J_F}{2} \mathbf{F}^2 + \frac{J_G}{2} \mathbf{G}^2 + \frac{J_C}{2} \mathbf{C}^2 + \frac{J_A}{2} \mathbf{A}^2 + \\ &+ D_x (C_y G_z - C_z G_y) + D_y (F_z G_x - F_x G_z) + \\ &+ D_z (A_x G_y - A_y G_x) + d_x (A_y F_z - A_z F_y) + \\ &+ d_y (C_z A_x - C_x A_z) + d_z (C_x F_y - C_y F_x), \end{aligned} \quad (40)$$

где для энергии, рассчитанной на один ион,

$$\begin{aligned} J_F &= -J_G = S^2 (2J_{ab} + J_c), \\ J_A &= -J_C = S^2 (2J_{ab} - J_c), \\ D_x &= -S^2 \sum_2 d_x(12), \\ D_y &= -S^2 \left(\sum_4 d_y(14) + \sum_2 d_y(12) \right), \\ D_z &= -S^2 \sum_4 d_z(14). \end{aligned} \quad (41)$$

Минимизируя свободную энергию при условии $\mathbf{F}^2 + \mathbf{G}^2 + \mathbf{C}^2 + \mathbf{A}^2 = 1$ и $F, C, A \ll G$, найдем

$$\begin{aligned} F_z &= -\frac{D_y}{J_F - J_G} G_x, & A_y &= \frac{D_z}{J_A - J_C} G_x, \\ F_x &= \frac{D_y}{J_F - J_G} G_z, & C_y &= -\frac{D_x}{J_C - J_G} G_z, \\ A_x &= -\frac{D_z}{J_A - J_C} G_y, & C_z &= \frac{D_x}{J_C - J_G} G_y. \end{aligned} \quad (42)$$

4.2. Явный и скрытый скос магнитных подрешеток в ортоферритах

Рисунок 3 показывает достаточно сложную структуру сверхобменных связей $Fe^{3+}-O^{2-}-Fe^{3+}$ в ортоферритах, что определяет и сложную структурную зависимость векторов Дзялошинского. В табл. 5 представлены структурные факторы $[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2]_{x,y,z}$ для сверхобменных связей иона Fe^{3+} в позиции $(1/2, 0, 0)$ с ближайшими соседями в ортоферритах с численными значениями для $YFeO_3$. Легко видеть, что слабый ферромагнетизм в ортоферритах связан с y -компонентой вектора

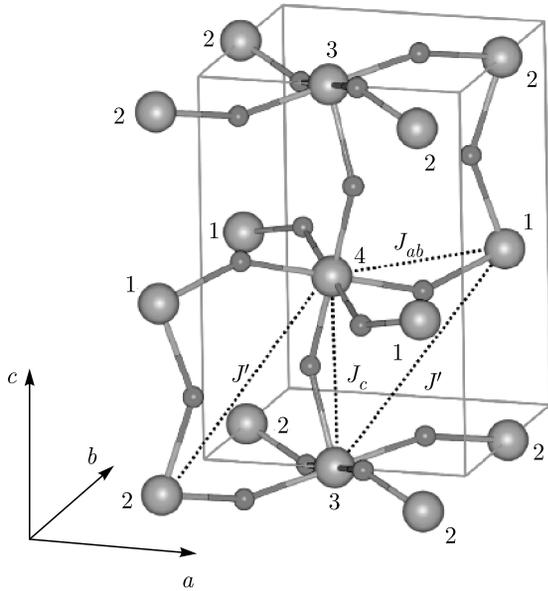


Рис. 3. Структура сверхобменных связей $\text{Fe}^{3+}-\text{O}^{2-}-\text{Fe}^{3+}$ в ортоферритах. J_{ab} и J_c — обменные интегралы для ближайших соседей, J' — обменный интеграл для соседей, следующих за ближайшими. 1, 2, 3, 4 — ионы Fe^{3+} в четырех неэквивалентных позициях. Воспроизведено из работы [53]

Дзялошинского, величина которой составляет всего лишь около трети от его максимальной величины.

В 1975 г. мы использовали простую формулу для вектора Дзялошинского (6) и структурные факторы из табл. 5, чтобы найти связь между кристаллографической и «скошенной» магнитной структурами для четырехподрешеточных ортоферритов RFeO_3 и ортохромитов RCrO_3 [9, 11] (см. рис. 4), где основной антиферромагнитный порядок G-типа сопровождается как явным скосом подрешеток, характеризующимся ферромагнитным вектором \mathbf{F} (слабый ферромагнетизм!), так и двумя типа скрытого скоса подрешеток, \mathbf{A} и \mathbf{C} (слабый антиферромагнетизм!):

$$F_x = \frac{(x_1 + 2z_2)ac}{6l^2} \frac{d}{J} G_z, \quad F_z = -\frac{(x_1 + 2z_2)ac}{6l^2} \frac{d}{J} G_x,$$

$$A_x = \frac{(1/2 + y_2 - x_2)ab}{2l^2} \frac{d}{J} G_y,$$

$$A_y = -\frac{(1/2 + y_2 - x_2)ab}{2l^2} \frac{d}{J} G_x, \quad (43)$$

$$C_y = \frac{(1/2 - y_1)bc}{2l^2} \frac{d}{J} G_z,$$

$$C_z = -\frac{(1/2 - y_1)bc}{2l^2} \frac{d}{J} G_y,$$

где a, b, c — параметры элементарной ячейки, $x_{1,2}, y_{1,2}, z_2$ — кислородные ($\text{O}_{\text{I,II}}$) параметры,

l — средняя длина связи катион-анион. Эти соотношения предполагают усреднение по связям $\text{Fe}^{3+}-\text{O}^{2-}-\text{Fe}^{3+}$ в ab -плоскости и вдоль оси c . Отметим, что $|A_{x,y}| > |F_{x,z}| > |C_{y,z}|$.

Прежде всего, мы приходим к простой связи между кристаллографическими параметрами и магнитным моментом Fe-подрешетки: в единицах $\text{Гс} \cdot \text{г}/\text{см}^3$

$$M_{\text{Fe}} = \frac{4g\mu_B S}{\rho V} |F_{x,z}| = \frac{2g\mu_B S ac}{3l^2 \rho V} (x_1 + 2z_2) \frac{d(\theta)}{J(\theta)}, \quad (44)$$

где ρ и V — соответственно плотность и объем элементарной ячейки. Явный скос магнитных подрешеток, или вектор ферромагнетизма $F_{x,z}$ может быть рассчитан через отношение поля Дзялошинского (H_D) к обменному полю (H_E):

$$F = H_D / 2H_E. \quad (45)$$

Если мы знаем поля Дзялошинского, то сможем рассчитать множитель $d(\theta)$ в ортоферритах следующим образом:

$$H_D = \frac{S}{g\mu_B} \sum_i |d_y(1i)| = \frac{S}{g\mu_B} (x_1 + 2z_2) \frac{ac}{l^2} |d(\theta)|, \quad (46)$$

что дает $|d(\theta)| \approx 3.2 \text{ К} = 0.28 \text{ мэВ}$ в YFeO_3 при $H_D = 140 \text{ кЭ}$ [17]. Это значение находится в хорошем согласии с данными недавних экспериментов [52, 53], которые позволили найти информацию о векторе Дзялошинского на основе измерений спектра спиновых волн. Отметим, что несмотря на то, что $F_z \approx 0.01$ параметр $d(\theta)$ всего лишь на порядок величины меньше обменного интеграла в YFeO_3 .

Наши результаты стимулировали экспериментальные исследования скрытого скоса магнитных подрешеток, или «слабого антиферромагнетизма» в ортоферритах. Как показано в табл. 6, теоретически предсказанные отношения между явным и скрытым скосом магнитных подрешеток хорошо согласуются с экспериментальными данными, полученными для различных ортоферритов с помощью ЯМР [22], рассеяния нейтронов, измерений низкоэнергетических спиновых возбуждений с помощью неупругого рассеяния нейтронов и поглощения терагерцевого излучения [23, 52, 53, 63].

Таблица 5. Структурные множители $[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2]_{x,y,z}$ для сверхобменно-связанных пар $\text{Fe}_1\text{-O-Fe}_{2,4}$ в ортоферритах с численными значениями для YFeO_3 , a, b, c — параметры решетки, l — средняя длина связи Fe–O, x_1, y_1, x_2, y_2, z_2 — кислородные параметры соответственно для позиций $\text{O}(4c)$ и $\text{O}(8d)$

	$[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2]_x$	$[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2]_y$	$[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2]_z$
2	$\frac{(1/2 - y_1)bc}{2l^2} = 0.20$	$-\frac{x_1ac}{2l^2} = -0.55$	0
4	$\pm \frac{z_2bc}{2l^2} = \pm 0.31$	$-\frac{z_2ac}{2l^2} = -0.29$	$\frac{(y_2 - x_2 + 1/2)ab}{2l^2} = 0.41$

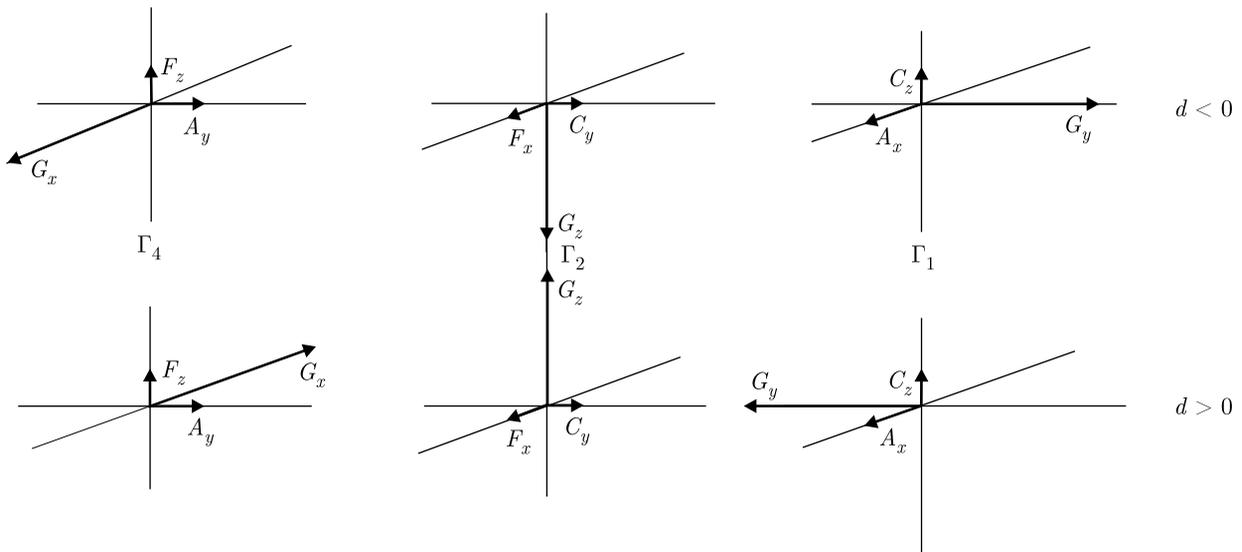


Рис. 4. Базисные векторы магнитной структуры для 3d-подрешетки в ортоферритах RFeO_3 и ортохромитах RCrO_3

4.3. DM-взаимодействие и эффективная магнитная анизотропия

Ниже мы продемонстрируем вклад DM-взаимодействия в эффективную магнитную анизотропию ортоферритов. Классические энергии трех спиновых конфигураций в ортоферритах $\Gamma_1(A_x, G_y, C_z)$, $\Gamma_2(F_x, C_y, G_z)$, и $\Gamma_4(G_x, A_y, F_z)$ при $|F_x| = |F_z| = F$, $|C_y| = |C_z| = C$, $|A_x| = |A_z| = A$ могут быть представлены следующим образом [11]:

$$E_{\Gamma_1} = E_G - 48JS^2F^2 \left[\frac{1}{3} \left(\frac{C}{F} \right)^2 + \frac{2}{3} \left(\frac{A}{F} \right)^2 \right], \quad (47)$$

$$E_{\Gamma_2} = E_G - 48JS^2F^2 \left[1 + \frac{1}{3} \left(\frac{C}{F} \right)^2 \right], \quad (48)$$

$$E_{\Gamma_4} = E_G - 48JS^2F^2 \left[1 + \frac{2}{3} \left(\frac{A}{F} \right)^2 \right], \quad (49)$$

с очевидным соотношением $E_{\Gamma_4} < E_{\Gamma_1} \leq E_{\Gamma_2}$. Знание этих энергий позволяет найти величины соответствующего вклада в константы «внутриплоскостной» анизотропии $E_{an} = k_1 \cos 2\theta$ (ac -, bc -плоскости), $E_{an} = k_1 \cos 2\varphi$ (ab -плоскость):

$$k_1(ac) = \frac{1}{2}(E_{\Gamma_2} - E_{\Gamma_4}), \quad k_1(bc) = \frac{1}{2}(E_{\Gamma_2} - E_{\Gamma_1}),$$

$$k_1(ab) = \frac{1}{2}(E_{\Gamma_4} - E_{\Gamma_1}).$$

Детальный анализ различных механизмов магнитной анизотропии ортоферритов [11, 64] указывает на ведущий вклад DM-взаимодействия. Для всех ортоферритов RFeO_3 этот механизм действительно предсказывает минимальную энергию для конфигурации Γ_4 , которая фактически реализуется как основное состояние для всех ортоферритов, если пренебречь взаимодействием R–Fe. Кроме того, предсказываемое значение константы магнитной

Таблица 6. Скрытый скос магнитных подрешеток в ортоферритах

Ортоферрит	A_y/F_z , теория [9]	A_y/F_z , эксп.	A_y/C_y , теория [9]	A_y/C_y , эксп.
YFeO ₃	1.10	1.10 ± 0.03 [22] 1.23 ± 0.2 [23] 1.1 ± 0.1 [63] 1.14 [52] 1.03 [53]	2.04	?
HoFeO ₃	1.16	0.85 ± 0.10 [63]	2.00	?
TmFeO ₃	1.10	1.25 ± 0.05 [22]	1.83	?
YbFeO ₃	1.11	1.22 ± 0.05 [23]	1.79	2.0 ± 0.2 [22]

анизотропии в плоскости ac для YFeO₃ $k_1(ac) = 2.0 \cdot 10^5$ эрг/см³ достаточно близко к экспериментальному значению $2.5 \cdot 10^5$ эрг/см³ [17]. Интересно, что модель предсказывает близкую энергию для конфигураций Γ_1 и Γ_2 , так что $|k_1(bc)|$ примерно на один порядок меньше, чем $|k_1(ac)|$ и $|k_1(ab)|$ для большинства ортоферритов [11, 64]. Это означает, что анизотропия в плоскости bc будет определяться конкуренцией ДМ-взаимодействия с относительно слабыми вкладами, такими как магнитодипольное взаимодействие и одноионная анизотропия. Следует отметить, что знак и величина $k_1(bc)$ имеют большое значение для определения типа доменных стенок в ортоферритах в их базовой конфигурации Γ_4 (см., например, работу [65]).

5. СЛАБЫЙ ФЕРРИМАГНЕТИЗМ — НОВЫЙ ТИП МАГНИТНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ В СИСТЕМАХ С КОНКУРИРУЮЩИМИ ЗНАКАМИ ВЕКТОРА ДЗЯЛОШИНСКОГО

Первые экспериментальные исследования смешанных ортоферритов-ортохромитов, проведенные в Московском университете в группе Кадомцевой, подтвердили теоретические предсказания относительно знаков векторов Дзялошинского и выявили слабоферримагнитное поведение YFe_{1-x}Cr_xO₃ [21] из-за конкуренции ДМ-взаимодействий Fe-Fe, Cr-Cr и Fe-Cr с антипараллельной ориентацией средних слабоферромагнитных моментов подсистем Fe и Cr в широком диапазоне концентраций. Другими словами, был предсказан новый класс смешанных 3d-систем с конкурирующими знаками вектора Дзялошинского, так называемых слабых ферримагнетиков.

Поперечный слабоферромагнитный момент примесного иона Cr³⁺ в ортоферрите YFeO₃ можно оценить следующим образом:

$$\mathbf{m}_{Cr} = g\mu_B S_{Cr}(2\delta - 1) \mathbf{F}, \quad (50)$$

где безразмерный параметр

$$\delta = \frac{d_{CrFe}}{d_{FeFe}} \frac{I_{FeFe}}{I_{CrFe}} \quad (51)$$

характеризует относительную величину ДМ-взаимодействия примесь-матрица. Сравнивая \mathbf{m}_{Cr} со значением $\mathbf{m}_{Fe} = g\mu_B S_{Fe} \mathbf{F}$ для матрицы, мы видим, что слабоферромагнитный момент для примеси Cr антипараллелен слабоферромагнитному моменту матрицы Fe даже для положительных, но малых $\delta < 1/2$. Однако эффект более выражен для отрицательных значений δ , т. е. для разных знаков d_{CrFe} и d_{FeFe} . Результаты простого расчета в приближении среднего поля (MFA), представленные на рис. 5–7 в сравнении с экспериментальными данными для слабых ферримагнетиков RFe_{1-x}Cr_xO₃, Mn_{1-x}Ni_xCO₃, Fe_{1-x}Cr_xVO₃ [21, 66–70], указывают на нетривиальные концентрационные и температурные зависимости намагниченности, в частности, точки компенсации.

На рис. 5а–в представлены расчетная (MFA) фазовая диаграмма слабого ферримагнетика, концентрационная зависимость низкотемпературной суммарной намагниченности и парциальных вкладов Fe-, Cr-подрешеток в YFe_{1-x}Cr_xO₃, вычисленных при постоянном значении $\delta = -4$. Сравнение экспериментальных данных для суммарной низкотемпературной намагниченности [21] с MFA-расчетами при $\delta = -2$ (рис. 5б) указывает на достаточно хорошее согласие везде, кроме $x \sim 0.5$, где параметр

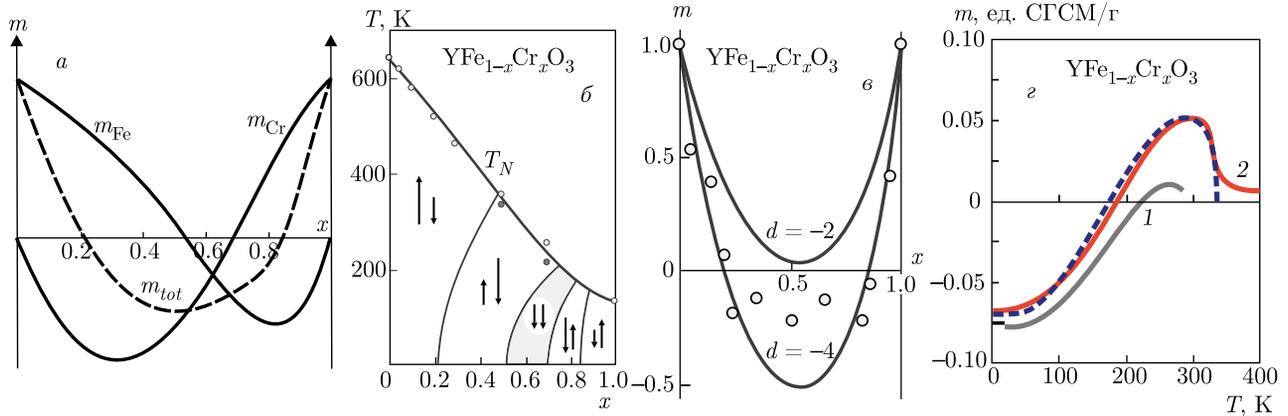


Рис. 5. а) Концентрационная зависимость парциальных вкладов Fe-, Cr-подрешеток в намагниченность $\text{YFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$. б) Фазовая (MFA) диаграмма $\text{YFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ при $\delta = -4$; левая и правая стрелки указывают ориентацию и относительную величину магнитных моментов соответственно Fe- и Cr-подрешеток. «Внешние» и «внутренние» тонкие линии указывают на точки компенсации соответственно полной и парциальных (Fe, Cr) намагниченностей. Экспериментальные значения T_N для моно- и поликристаллических образцов указаны соответственно светлыми и темными кружками. в) Концентрационная зависимость низкотемпературной намагниченности в $\text{YFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$: кружки — экспериментальные данные [21], кривые — расчетные данные при $\delta = -2$ и -4 . г) Температурная зависимость намагниченности в $\text{YFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$: жирные кривые — экспериментальные данные для $x = 0.38$ (кривая 1 — [66]) и для $x = 0.4$ (кривая 2 — [71]), пунктирная кривая — MFA-расчет для $x = 0.4$ [71] при $d_{\text{FeCr}} = -0.39$ К

δ кажется ближе к $\delta = -3$. На рис. 5г сравниваются первые экспериментальные данные по температурной зависимости намагниченности $m(T)$ в слабом ферримагнетике $\text{YFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ ($x = 0.38$) ([66] — кривая 1) с недавними данными для близкого состава с $x = 0.4$ ([71] — кривая 2). Стоит отметить, что недавние MFA-расчеты, выполненные в работе [71] при $d_{\text{FeCr}} = -0.39$ К, дают очень хорошее описание $m(T)$ при $x = 0.4$. Отметим, что авторы [71] обнаружили довольно сильную зависимость параметра d_{FeCr} от концентрации x .

Концентрационная и температурная зависимости намагниченности в $\text{LuFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ хорошо описываются простой моделью MFA в предположении постоянного знака намагниченности и постоянном значении $\delta = -1.5$ (рис. 6 [67]), что, строго говоря, не исключало возможности альтернативного описания зависимости $m(x)$ с двумя точками концентрационной компенсации намагниченности (см. пунктирную линию на рис. 6а). Кроме того, вообще говоря, отсутствие точек концентрационной компенсации для низкотемпературной намагниченности $m(x, T) = 77$ К не означает отсутствия точек компенсации при более высоких температурах. Действительно, намного позже, в 2016 г., авторы [72] наблюдали спонтанное перемагничивание в поликристаллическом $\text{LuFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$ ниже $T_N = 290$ К при температуре компенсации $T_{\text{comp}} = 224$ К, а авторы [73] провели расчеты с

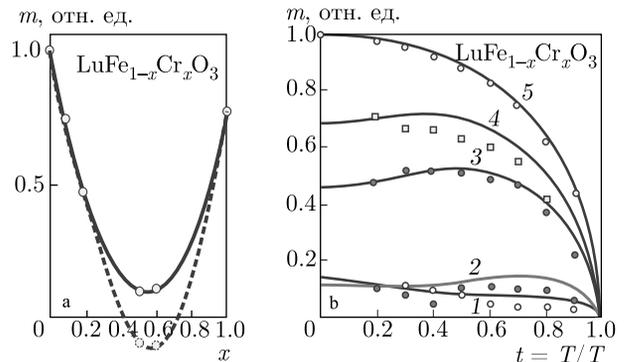


Рис. 6. а) Концентрационная зависимость низкотемпературной ($T = 77$ К) намагниченности $\text{LuFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$: кружки — экспериментальные данные [67], жирные кривые — MFA-расчет при $\delta = -1.5$. б) Температурная зависимость намагниченности $\text{LuFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$: кружки — экспериментальные данные [67] для $x = 0.6$ (1), 0.5 (2), 0.2 (3), 0.1 (4), 0 (5), жирные кривые — MFA-расчет при $\delta = -1.5$

помощью классического метода Монте-Карло для $\text{RFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ с $\text{R} = \text{Y}$ и Lu , сравнив результаты численного моделирования с экспериментами и расчетами MFA. Помимо зависимости $T_N(x)$, эта модель способна воспроизвести смену знака намагниченности, наблюдаемое экспериментально в процессе охлаждения в поле для промежуточных значений x . В отличие от YFeO_3 и YCrO_3 , которые являются слабыми ферромагнетиками с основной магнитной структурой типа G_xF_z ниже T_N , сла-

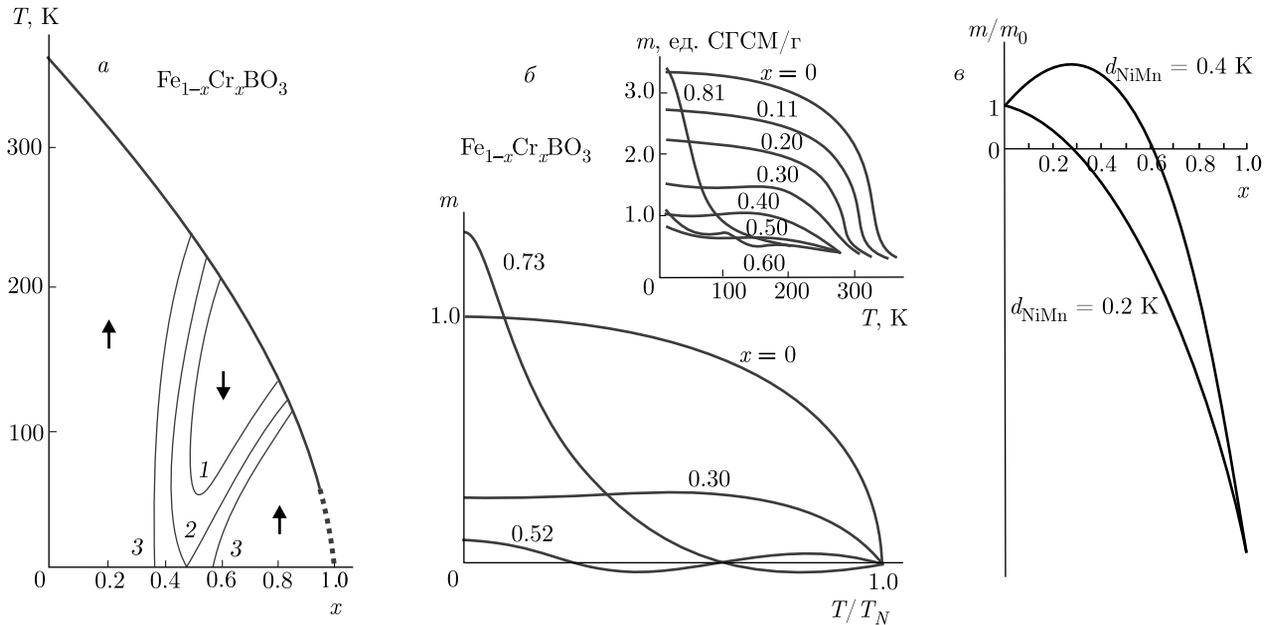


Рис. 7. а) Результаты MFA-моделирования фазовой T - x -диаграммы слабого ферриамгнетика $\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{BO}_3$ [68] при $I_{\text{FeFe}} = I_{\text{FeCr}} = -20.3$ К, $I_{\text{CrCr}} = 2.0$ К, стрелки указывают ориентацию суммарного слабоферримагнитного момента. Кривые 1, 2, 3 указывают точки компенсации при $d_z(\text{FeFe}) = d_z(\text{CrCr}) = 0.67$ К, $d_z(\text{FeCr}) = -0.67$ К (1), -0.75 К (2), -0.90 К (3). б) Результаты MFA-моделирования температурной зависимости суммарной намагниченности в $\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{BO}_3$ [68] при $d_z(\text{FeFe}) = d_z(\text{CrCr}) = -d_z(\text{FeCr}) = 0.67$ К для различных составов, на вставке — экспериментальные данные работы [77] во внешнем магнитном поле 1 Тл. в) Результаты MFA-моделирования концентрационной зависимости низкотемпературной намагниченности в $\text{Mn}_{1-x}\text{Ni}_x\text{CO}_3$ [70] при $d_z(\text{MnNi}) > d_z^{(0)}(\text{MnNi})$ и $d_z(\text{MnNi}) < d_z^{(0)}(\text{MnNi})$

бы ферримагнетики ортоферриты-ортохромиты $\text{YFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ обнаруживают полную или частичную спин-переориентацию типа $G_xF_z - G_zF_x$ в широком диапазоне замещения. Такое неожиданное поведение, обычно типичное для ортоферритов с магнитными редкоземельными ионами (Er, Tm, Dy и т.д.), объясняется, главным образом, сильным уменьшением вклада ДМ-взаимодействия в магнитную анизотропию в плоскости ac при $x = 0.5-0.6$ [74, 75]. В отличие от иттриевой системы ортоферриты-ортохромиты лютеция $\text{LuFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ ($x = 0, 0.1, 0.2, 0.5, 0.6$, и 1.0) сохраняют основную магнитную структуру типа G_xF_z без признаков спонтанного спин-переориентационного перехода. Это различие можно объяснить значительно большим вкладом одноионной анизотропии в k_{ac} в LuFeO_3 по сравнению с YFeO_3 [11, 76].

Обратимся к особенностям других слабых ферримагнетиков. На рис. 7а показана расчетная фазовая диаграмма тригонального слабого ферримагнетика $\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{BO}_3$ [68]. Экспериментальные исследования температурной зависимости намагниченности в интервале от 4.2 до 600 К были проведены для системы твердых растворов $\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{BO}_3$, где

$0 \leq x \leq 0.95$ [77]. Наблюдается быстрое уменьшение намагниченности насыщения с увеличением x при $T = 4.2$ К до 0.40, после чего обнаруживается широкий минимум до $x = 0.60$. Составы в диапазоне $0.40 \leq x \leq 0.60$ демонстрируют необычное поведение намагниченности в зависимости от температуры с максимумами и минимумами на кривых ниже температур Кюри. Рисунок 7б демонстрирует хорошее согласие между экспериментальными данными [77] и нашими MFA-расчетами.

В отличие от смешанных систем d^5-d^3 (Fe-Cr), таких как $\text{YFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ или $\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{BO}_3$ проявление различных ДМ-взаимодействий Fe-Fe, Cr-Cr и Fe-Cr в $(\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x)_2\text{O}_3$ более удивительно из-за различной магнитной структуры «конечных» составов, $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ и Cr_2O_3 и появления ненулевого ДМ-взаимодействие для октаэдров FeO_6 и CrO_6 , связанных через три общих кислорода, «запрещенного» для связи Fe-Fe и Cr-Cr. Все это делает магнитные свойства смешанных составов $(\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x)_2\text{O}_3$ очень необычными [78].

В отличие от смешанных d^5-d^3 -систем $\text{YFe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ или $\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x\text{BO}_3$, где при довольно большом параметре d_{FeCr} появляются две точки

концентрационной компенсации, в d^5-d^8 -системах замещенных ортоферритов типа никель/фтор $RFe_{1-x}Ni_xF_yO_{3-y}$ [69] или $Mn_{1-x}Ni_xCO_3$ с парами $Mn^{2+}-Ni^{2+}$ [70] возможна только единственная точка концентрационной компенсации, независимо от величины параметра d_{MnNi} . Однако характер концентрационной зависимости слабоферритного момента $m(x)$ сильно зависит от его величины. С ростом концентрации $m(x)$ сначала растет или падает в зависимости от того, больше или меньше величина параметра d_{MnNi} некоторого «критического» значения

$$d_{MnNi}^{(0)} = \left(1 + \frac{S_{Mn}}{S_{Ni}} \right) \frac{I_{MnNi}}{2I_{MnMn}} d_{MnMn}.$$

Рисунок 7в наглядно иллюстрирует эту особенность. Следует отметить, что совсем недавно авторы [79] экспериментально обнаружили, что в соответствии с нашей теорией (см. табл. 4) знак вектора Дзялошинского в $MnCO_3$ (d^5-d^5) совпадает со знаком этого вектора в $FeVO_3$ (d^5-d^5), тогда как $NiCO_3$ (d^8-d^8) демонстрирует противоположный знак.

5.1. Особенности $4f-3d$ -взаимодействия в слабых ферритмагнетиках $RFe_{1-x}Cr_xO_3$

Несомненный интерес представляет исследование влияния слабоферритного упорядочения $3d$ -подрешетки на поведение редкоземельной подсистемы в смешанных ферритах-хромитах $RFe_{1-x}Cr_xO_3$. Характер поляризации R-ионов и ее концентрационные и температурные зависимости дают ценную информацию не только о состоянии d -подсистемы, но и о механизмах $4f-3d$ -взаимодействия, прежде всего об относительной роли ферро- и антиферромагнитных вкладов в эффективное поле на R-ионах [61, 75, 80, 81]. Особый интерес, на наш взгляд, представляет система $GdFe_{1-x}Cr_xO_3$ с $4f$ - и $3d$ -ионами S -типа, где может показаться, что именно ферромагнитный вклад за счет изотропного $4f-3d$ -обмена должен играть определяющую роль в поляризации подрешетки Gd. Однако детальный анализ магнитных свойств $GdFeO_3$ и $GdCrO_3$ [60, 61] совершенно неожиданно выявил существенную роль анизотропного обмена S -ионов Gd^{3+} с S -ионами Fe^{3+} и Cr^{3+} и соответственно антиферромагнитного вклада в поляризацию подрешеток Gd с преобладанием антисимметричного вклада, определяемого ДМ-взаимодействием $4f-3d$ (см. (36) и (37)).

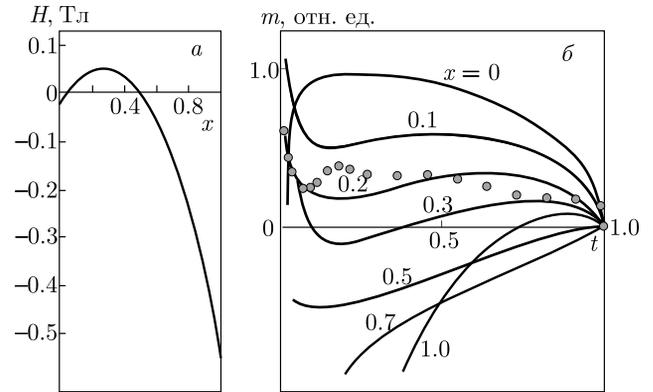


Рис. 8. а) Расчетная концентрационная зависимость среднего эффективного поля на ионах Gd^{3+} в слабом ферритмагнетике $GdFe_{1-x}Cr_xO_3$ при $T = 0$ К. б) Расчетная температурная зависимость спонтанной намагниченности для ряда слабых ферритмагнетиков $GdFe_{1-x}Cr_xO_3$ и крайних составов, $\tau = T/T_N$. Жирные кружки — экспериментальные данные для монокристаллов $GdFe_{0.83}Cr_{0.17}O_3$, $T_N = 550$ К [61]

Знание численных значений параметров изотропного и анизотропного $4f-3d$ -взаимодействия позволило нам вычислить в рамках теории молекулярного поля концентрационные и температурные зависимости среднего эффективного поля H_z , намагниченность подрешетки Gd и полную намагниченность слабого ферритмагнетика $GdFe_{1-x}Cr_xO_3$ во всем диапазоне концентраций x (см. рис. 8) [61]. Обменные интегралы и параметры ДМ-взаимодействия в d -подрешетках выбирались равными соответствующим значениям для слабого ферритмагнетика $YFe_{1-x}Cr_xO_3$.

Концентрационная зависимость $H_z(x)$ при $T = 0$ К имеет очень необычный вид с двумя точками компенсации при малых и относительно больших концентрациях ионов Cr^{3+} . Тогда как при $x \approx 0.5$ компенсация полного магнитного момента все еще наблюдается, при $x = 0.10$ изменение знака H_z приводит к гиперболическому росту $m(T)$ в области низких температур. В то же время расчет показывает, что при $x \approx 0.27$ и $\tau = T/T_N \approx 0.17$ мы приходим к точке компенсации, которая затем при увеличении x «раздваивается» со смещением одной (высокотемпературной) точки компенсации в сторону T_N , а другой (низкотемпературной) в сторону $T = 0$ К. При $x > 0.5$ точки компенсации исчезают и только для составов, непосредственно прилегающих к чистому ортохромиту гадолиния, явление компенсации снова наблюдается, причем с увеличением концентрации ионов Fe^{3+} точка компенса-

ции смещается от $T_{comp} = 110$ К в чистом $GdCrO_3$ к $T_{comp} = T_N$ при $x \approx 0.95$. В целом рассчитанные концентрационные и температурные зависимости намагниченности в $GdFe_{1-x}Cr_xO_3$ удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными [61]. В заключение отметим необходимость дальнейших экспериментальных исследований редкоземельных слабых ферримагнетиков, таких как $GdFe_{1-x}Cr_xO_3$, как с точки зрения изучения различных f - d -взаимодействий, так и возможности поиска новых материалов с инновационными магнитными свойствами.

5.2. Необычная спиновая переориентация в слабых ферримагнетиках

Вклад конкурирующего антисимметричного обмена в магнитную анизотропию слабых ферримагнетиков имеет необычную концентрационную зависимость. Так, если в чистом ортоферрите $YFeO_3$ и ортохромите $YCrO_3$ антисимметричный обмен вносит решающий вклад в стабилизацию магнитной конфигурации Γ_4 , то в слабом ферримагнетике $YFe_{1-x}Cr_xO_3$ он может вызвать спин-переориентационный переход Γ_4 - Γ_2 , характерный для некоторых ортоферритов $RFeO_3$ с магнитными редкоземельными ионами ($R = Nd, Sm, Tb, Ho, Er, Tm, Yb$). На рис. 9 показана концентрационная зависимость вклада DM-взаимодействия в первую константу анизотропии для $YFe_{1-x}Cr_xO_3$ в ac -плоскости при различных значениях параметра δ , рассчитанного в рамках простого приближения среднего поля [74, 75] в пределе низких температур. Характерной особенностью этой зависимости является появление нескольких экстремумов с резким уменьшением вклада в области промежуточных концентраций вблизи $x \sim 0.6$ - 0.7 . Кроме того, как и намагниченность, этот вклад в анизотропию имеет специфическую температурную зависимость [74, 75]. В целом оба эффекта могут приводить к появлению спонтанных спин-переориентационных переходов в слабых ферримагнетиках типа $YFe_{1-x}Cr_xO_3$ с немагнитным «R»-ионом. Действительно, в полном соответствии с теорией такие переходы наблюдались экспериментально, например, спин-переориентационный переход Γ_4 - Γ_2 в $YFe_{0.85}Cr_{0.15}O_3$ [74, 75] (см. рис. 9).

Более удивительная ситуация наблюдалась в слабом ферримагнетике $DyFe_{1-x}Cr_xO_3$ при относительно низкой концентрации ионов Cr. Ионы Dy^{3+} в $DyFeO_3$ стабилизируют конфигурацию $\Gamma_1(G_y)$, так что при $T = 40$ К наблюдается скачкообраз-

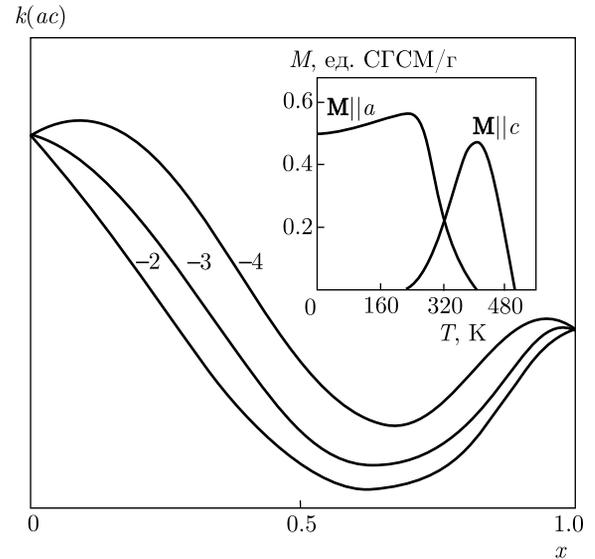


Рис. 9. Концентрационная зависимость вклада DM-взаимодействия в первую константу анизотропии в ac -плоскости при различных значениях параметра δ . На вставке: температурная зависимость намагниченности в слабом ферримагнетике $YFe_{0.85}Cr_{0.15}O_3$ [75], демонстрирующая спин-переориентационный переход Γ_4 - Γ_2 в температурном интервале 240–400 К

ный переход Морина Γ_4 - Γ_1 . Во всех монокристаллах слабых ферримагнетиков $DyFe_{1-x}Cr_xO_3$ ($x = 0.07, 0.10, 0.13, 0.15, 0.36, 0.40$) синтезированных и исследованных в лаборатории Кадомцевой (Московский университет) [74, 75], обнаружен спин-переориентационный переход Морина Γ_4 - Γ_1 в низкотемпературную фазу Γ_1 , за исключением состава с $x = 0.36$, где высокотемпературной фазой неожиданно оказалась фаза Γ_2 . Удивительно, но в составах $x = 0.1$ и $x = 0.13$ переход Морина происходил сложным образом по схеме Γ_4 - Γ_{421} - Γ_{21} - Γ_1 ($x = 0.1$) или Γ_4 - Γ_{421} - Γ_1 ($x = 0.13$) и сопровождался отклонением антиферромагнитного вектора \mathbf{G} в пространство с появлением в узком диапазоне температур проекции магнитного момента на ось b . Никогда ранее такое необычное состояние смешанной конфигурации $\Gamma_{421}(G_x G_y G_z)$ с пространственной ориентацией вектора антиферромагнетизма и появлением «запрещенной» в чистых ортоферритах и ортохромитах b -компоненты магнитного момента ($M_b \propto G_x G_y G_z$) не наблюдалось.

5.3. Недавнее возобновление интереса к слабым ферримагнетикам

Системы с конкурирующим антисимметричным обменом интенсивно исследовались до конца 80-х годов в основном в лаборатории Кадомцевой в Мос-

ковском университете. Возобновление интереса к системам с точкой компенсации в последнее время было вызвано перспективами их применения в магнитной памяти (см., например, работы [71, 82] и ссылки в них). Например, слабый ферримагнетик $\text{YFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$ демонстрирует перемагничивание при малых приложенных полях. Ниже температуры компенсации (T_{comp}) настраиваемое биполярное переключение намагниченности демонстрируется путем изменения величины поля при сохранении его направления. Соединение также демонстрирует как нормальный, так и обратный магнитокалорический эффект соответственно выше и ниже $T = 260$ К. Эти явления, сосуществующие в единой магнитной системе, можно настраивать предсказуемым образом и они могут иметь потенциальное применение в электромагнитных устройствах [82]. Слабые ферримагнетики могут проявлять эффект перестраиваемого обменного смещения (exchange bias, EB) [83].

Недавно EB-эффект с изменением знака был обнаружен в феррите-хромите $\text{LuFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$ [84], который является слабым ферримагнетиком ниже $T_N = 265$ К, демонстрируя антипараллельную ориентацию средних слабоферромагнитных моментов подрешеток Fe и Cr из-за противоположного знака вектора Дзялошинского Fe–Cr по сравнению со знаком для связей Fe–Fe и Cr–Cr [56]. Слабоферромагнитные моменты Fe- и Cr-подрешеток в этом соединении компенсируют друг друга при температуре $T_{\text{comp}} = 230$ К, что приводит к инверсии суммарного магнитного момента и наблюдаемой отрицательной намагниченности при умеренной величине приложенного поля ниже T_{comp} . Разнообразие таких необычных свойств, как высокая температура компенсации, регулируемый положительный/отрицательный EB-эффект ниже/выше T_{comp} и переключение направления намагничивания на противоположное с помощью магнитного поля без изменения его полярности, делает слабый ферримагнетик $\text{LuFe}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{O}_3$ перспективным кандидатом для применения в магнитной памяти.

Сочетание эффекта перемагничивания с магнитоэлектроникой представляет огромный технологический потенциал для приложений в различных устройствах, например, термически поддерживаемых магнитных запоминающих устройствах с произвольным доступом, термомагнитных переключателях и других многофункциональных устройствах с предварительно выбранным и удобным способом настройки.

В настоящее время большое количество магнитных материалов можно рассматривать как сис-

темы с конкурирующим антисимметричным обменом [85], включая новый класс смешанных гелимагнитных сплавов со структурой B20, таких как $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Ge}$, где винтовая природа основной ферромагнитной спиновой структуры определяется конкуренцией DM-взаимодействий Mn–Mn, Fe–Fe, и Mn–Fe. Интересно, что магнитная киральность в смешанном соединении меняет знак при $x_{\text{cr}} \approx 0.75$, вероятно, из-за разного знака векторов Дзялошинского для пар Mn–Mn и Fe–Fe [86].

6. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗНАКА ВЕКТОРА ДЗЯЛОШИНСКОГО

Определение знака вектора Дзялошинского и взаимной ориентации векторов \mathbf{F} и \mathbf{G} в слабых ферромагнетиках имеет фундаментальное значение как с точки зрения микроскопической теории DM-взаимодействия или антисимметричного обмена, так и с практической точки зрения для надежной идентификации параметров различных анизотропных взаимодействий в этих материалах. В частности, для редкоземельных ортоферритов RFeO_3 это касается параметров $4f$ – $3d$ -взаимодействия [60], параметров наведенных и косвенных сверхтонких взаимодействий [87], величины эффективного магнитного поля для μ -мезонов [62]. Знак вектора Дзялошинского определяет направленность спиновой спирали в кристаллах с нецентросимметричной структурой B20.

Как измерить знак взаимодействия вектора Дзялошинского в слабых ферромагнетиках? Согласно работе [19], ответ на этот вопрос может быть дан, если экспериментально определить направление вращения вектора антиферромагнетизма \mathbf{l} вокруг магнитного поля \mathbf{H} в геометрии $\mathbf{H} \parallel \mathbf{d} \parallel$ легкой оси. Однако, как было указано позже (см. работу [88]), предлагаемый авторами мессбауэровский эксперимент с гематитом не дал однозначного результата.

Согласно работе [89] необходимо, прежде всего, приложить достаточно сильное магнитное поле, чтобы получить однодоменное состояние, в котором DM-взаимодействие жестко «пиннует» антиферромагнитное упорядочение в кристаллической решетке. Далее следует использовать методы дифракции на монокристаллах, чувствительные как к кислородным координатам, так и к фазе антиферромагнитного упорядочения. Другими словами, следует наблюдать те брэгговские отражения hkl , для которых интерференция между магнитным рассеянием на магнитных атомах и немагнитным рассеянием на

атомах кислорода является значительной. Есть три подходящих метода: нейтронная дифракция, мессбауэровская γ -дифракция и резонансное рассеяние рентгеновских лучей. Так, знак вектора Дзялошинского в слабом ферромагнетике FeVO_3 был выведен из наблюдаемой интерференции между резонансным и магнитным рентгеновским рассеянием [89].

Авторы работы [88] утверждали, что характер индуцированного полем перехода из антиферромагнитной фазы в скошенную во фториде кобальта CoF_2 обусловлен «знаком» взаимодействия Дзялошинского, и это дает возможность экспериментально определить знак вектора Дзялошинского. Однако на самом деле они рассматривали симметричное взаимодействие Дзялошинского — магнитную анизотропию

$$V_{sym} = -D(m_x l_y + m_y l_x),$$

а не антисимметричное DM-взаимодействие.

На наш взгляд, наиболее надежным экспериментальным методом определения взаимной ориентации векторов ферромагнетизма \mathbf{F} и антиферромагнетизма \mathbf{G} , а следовательно, и знака вектора Дзялошинского, является изучение величины и знака эффективного магнитного поля на лигандах, а также на μ -мезонах в слабых ферромагнетиках.

6.1. Положительные мюоны в ортоферритах как инструмент исследования знака вектора Дзялошинского

В экспериментах по вращению спина мюонов (μSR) спин-поляризованные положительные (анти)мюоны используются для исследования распределения микроскопического поля в межузельных позициях, являющихся центрами локализации μ^+ внутри исследуемого образца. Чрезвычайная чувствительность мюонов к малым магнитным полям, а также отсутствие квадрупольной связи делают этот метод очень перспективным в зондировании магнитного порядка, в частности, и как важную альтернативу рассеянию нейтронов. Этот метод, у которого много общего с ядерным магнитным резонансом, имеет преимущество в применимости практически к любому материалу, но имеет недостаток — междоузлия, где локализуется мюон и характер взаимодействия мюона с матрицей обычно неизвестны [90]. Идентификация места локализации мюона — ключевой исходный ингредиент в нечастых случаях, когда доминирующий вклад во внутреннее магнитное поле вносит дальнедействующее дипольное взаимодействие, которое требует только знания места ло-

кализации, для того чтобы быть вычисленным классическим суммированием по дипольным моментам основной решетки. Таким образом, сравнение прогнозируемых и измеренных локальных полей и может подтвердить идентификацию места локализации мюона, и, в свою очередь, эта оценка дает, например, величину магнитных моментов. Однако существуют дополнительные локальные вклады в поле на мюоне и во многих случаях ими нельзя пренебречь [91].

Магнитодипольное поле может быть аппроксимировано с хорошей точностью в предположении классических моментов \mathbf{M} с центром в атомных позициях магнитных атомов:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}_\mu) = \sum_j \left(\frac{3\mathbf{r}_{\mu j}(\mathbf{M}_j \cdot \mathbf{r}_{\mu j})}{r_{\mu j}^5} - \frac{\mathbf{M}_j}{r_{\mu j}^3} \right), \quad (52)$$

где \mathbf{r}_μ — позиция мюона, \mathbf{M}_j — магнитный момент j -го иона, $r_{\mu j}$ — расстояние между j -м ионом и мюоном. Вклад сверхтонкого контактного поля Ферми, наведенного или косвенного, может быть представлено в следующем виде:

$$H(\mathbf{r}_\mu) = \frac{8\pi}{3} \mu_B \rho_s(\mathbf{r}_\mu), \quad (53)$$

где ρ_s — спиновая плотность в позиции мюона [91].

Первое детальное исследование мюонов в ортоферритах RFeO_3 ($\text{R} = \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Y}, \text{Er}$) было выполнено авторами работы [62]. По их представлениям сверхтонкое поле на мюонном узле в ортоферритах можно объяснить с учетом только дипольных полей. Сравнивая измеренные внутренние магнитные поля с рассчитанными дипольными полями ионов Fe^{3+} , авторы нашли положение стабильного узла мюона, кроме того, установили, что в конфигурации Γ_4 знак G_x должен быть положительным при $F_z > 0$ в соответствии с нашими предыдущими теоретическими предсказаниями [10], поскольку только это предположение приводит к разумному положению позиции мюона. Однако эти результаты подверглись резкой критике в работе [92], авторы которой утверждали, что интерпретация [62] содержит серьезные недоработки: важные детали не разработаны правильно и их анализ не завершен настолько, чтобы подтвердить некоторые из их выводов. В первую очередь это касается вклада косвенного сверхтонкого поля, который нельзя не учитывать. Кроме того, они обратили внимание на необходимость строгого учета соглашения о знаках, маркировки ионов Fe^{3+} и представления спиновых конфигураций, которое неоднозначно в литературе. Все

это ставит под сомнение использование теоретических соотношений, в частности, касающихся взаимной ориентации векторов ферро- и антиферромагнетика, т. е., по сути, знака вектора Дзялошинского.

6.2. ЯМР ядер лигандов в слабых ферромагнетиках и первое надежное определение знака вектора Дзялошинского

Как было показано в нашей статье [20], надежная локальная информация о знаке вектора Дзялошинского, а точнее, параметра Дзялошинского d_{12} , может быть извлечена из данных ЯМР ядер лигандов в слабых ферромагнетиках. Подробно процедура описана для данных ЯМР ^{19}F в слабом ферромагнетике FeF_3 [20].

Ионы F^- в элементарной ячейке FeF_3 занимают шесть позиций [93]. В тригональном базисе это $\pm(x, 1/2-x, 1/4)$, $\pm(1/2-x, 1/4, x)$, $\pm(1/4, x, 1/2-x)$, что соответствует

- i) $\pm(3p(x-1/4), \sqrt{3}p(1/4-x), c/4)$,
- ii) $\pm(3p(1/4-x), \sqrt{3}p(1/4-x), c/4)$,
- iii) $\pm(0, 2\sqrt{3}p(x-1/4), c/4)$

в ортогональном базисе с $O_z \parallel C_3$ и $O_x \parallel C_2$. Каждый ион F^- окружен двумя ионами Fe^{3+} из различных магнитных подрешеток. Здесь мы используем базисные векторы ферромагнетизма \mathbf{F} и антиферромагнетизма \mathbf{G} :

$$2S\mathbf{F} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2, \quad 2S\mathbf{G} = \mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2, \quad \mathbf{F}^2 + \mathbf{G}^2 = 1, \quad (54)$$

где Fe_1^{3+} и Fe_2^{3+} занимают соответственно позиции $(1/2, 1/2, 1/2)$ и $(0, 0, 0)$; FeF_3 — плоскоплоскостной слабый ферромагнетик с векторами \mathbf{F} и \mathbf{G} , лежащими в плоскости (111) с $\mathbf{F} \perp \mathbf{G}$. Два варианта взаимной ориентации векторов \mathbf{F} и \mathbf{G} в базисной плоскости, условно названные соответственно «левой» и «правой», показаны на рис. 10. Энергия ДМ-взаимодействия для связи $\text{Fe}^{3+}-\text{F}^--\text{Fe}^{3+}$ может быть представлена как

$$\begin{aligned} E_{DM} &= -2S^2 d_z(12)(F_x G_y - F_y G_x) = \\ &= -\frac{4\sqrt{3}}{l^2} p^2 \left(x + \frac{1}{4}\right) d(\theta) = \\ &= +0.78S^2 d(\theta)(F_x G_y - F_y G_x). \end{aligned} \quad (55)$$

Другими словами, «левая» и «правая» ориентации базисных векторов реализуются соответственно при $d(\theta) < 0$ и $d(\theta) > 0$.

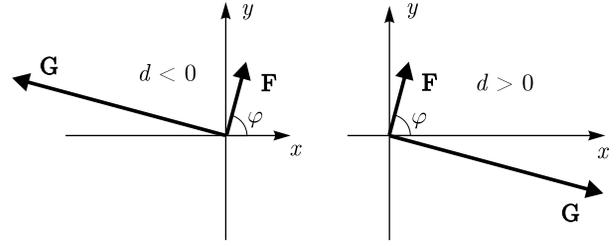


Рис. 10. Два варианта взаимной ориентации векторов \mathbf{F} и \mathbf{G} в базисной плоскости FeF_3

Абсолютная величина ферромагнитного вектора численно равна явному углу скоса магнитных подрешеток, который можно найти, используя известные значения поля Дзялошинского: $H_D = 48.8$ кЭ и обменного поля: $H_E = 4.4 \cdot 10^3$ кЭ [16],

$$F = H_D/2H_E \simeq 5.5 \cdot 10^{-3}. \quad (56)$$

Если мы знаем величину поля Дзялошинского, мы можем рассчитать параметр $d(\theta)$ следующим образом:

$$H_D = \frac{6S}{g\mu_B} |d_z(12)| = \frac{6S}{g\mu_B} 0.39 |d(\theta)| = 48.8 \text{ кЭ}, \quad (57)$$

что дает $|d(\theta)| \simeq 1.1$ К, примерно в три раза меньше, чем в YFeO_3 .

Локальное поле на ядре немагнитного аниона F^- в слабом ферромагнетике FeF_3 , наведенное соседним магнитным ионом Fe^{3+} S-типа, можно представить в виде [94]

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{\gamma_n} \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{A}} \mathbf{S} \quad (58)$$

(γ_n — гиромагнитное отношение, $\gamma_n = 4.011$ МГц/кЭ, \mathbf{S} — спин магнитного иона), где тензор наведенных сверхтонких взаимодействий (HFI) $\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{A}}$ включает два слагаемых: изотропный контактный вклад $A_{ij} = A_s \delta_{ij}$,

$$A_s = \frac{f_s}{2S} A_s^{(0)}, \quad A_s^{(0)} = \frac{16}{3} \pi \mu_B \gamma_n |\varphi_{2s}(0)|^2, \quad (59)$$

и анизотропный вклад

$$A_{ij} = A_p (3n_i n_j - \delta_{ij}), \quad (60)$$

где \mathbf{n} — единичный вектор в направлении связи ядро — магнитный ион, а параметр A_p включает дипольный и ковалентный вклады

$$A_p = A_p^{cov} + A_d, \quad (61)$$

$$\begin{aligned}
A_p^{cov} &= \frac{f_\sigma - f_\pi}{2S} A_p^{(0)}, \\
A_p^{(0)} &= \frac{4}{5} \mu_B \gamma_n \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{2p}, \\
A_d &= \frac{g_s \mu_B \gamma_n}{R^3}.
\end{aligned} \quad (62)$$

Здесь $f_{s,\pi,\sigma}$ — параметры переноса спиновой плотности: магнитный ион — лиганд по соответствующей s -, σ -, π -связи [95]; $|\varphi_{2s}(0)|^2$ — плотность вероятности обнаружения $2s$ -электрона на ядре; $\langle 1/r^3 \rangle_{2p}$ — радиальное среднее.

Наведенные сверхтонкие взаимодействия для ядер ^{19}F во флюоридах исследовались с помощью различных методов — ЯМР, ЭПР и ДЭЯР [94]. Для ядер ^{19}F найдены большие величины как $A_s^{(0)}$, так и $A_p^{(0)}$; $A_s^{(0)} = 4.54 \cdot 10^4$, $A_p^{(0)} = 1.28 \cdot 10^3$ МГц [94], что вместе с 100-процентным природным содержанием, спином ядра $I = 1/2$ и большим гиромангнитным отношением делает изучение наведенных сверхтонких взаимодействий особенно простым и доступным.

Вклад изотропного и анизотропного наведенного сверхтонкого взаимодействия в локальное поле на ядре ^{19}F можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned}
\mathbf{H}(iso) &= -\frac{2S}{\gamma_n} A_s \mathbf{F} = a_F \mathbf{F}, \\
\mathbf{H}(an) &= \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{a}} \mathbf{G}, \quad \hat{a} = -\frac{2S}{\gamma_n} (\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{A}}(1) - \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{A}}(2)).
\end{aligned} \quad (63)$$

Параметры A_s и A_p , необходимые для расчета величин a_F и тензора анизотропии $\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{a}}$, т.е. для расчета «ферро-» и «антиферро-» вкладов в H , можно найти в литературных данных для пары ^{19}F – Fe^{3+} . Например, в $\text{KMgF}_3 \cdot \text{Fe}^{3+}$ ($R_{\text{MgF}} = 1.987 \text{ \AA}$) [96] $A_s = +72$, $A_p = +18$ МГц, в K_2NaFeF_6 ($R_{\text{FeF}} = 1.91 \text{ \AA}$), в $\text{K}_2\text{NaAlF}_6 \cdot \text{Fe}^{3+}$ $A_s = +70.17$, $A_p = +20.34$ МГц [97]. Таким образом, мы ожидаем для FeF_3 $|a_F| \sim 350\text{--}360$ МГц ($a_F < 0$) и $H(iso) \simeq 2$ МГц ($\simeq 0.5$ кЭ).

В отсутствие внешнего магнитного поля частоты ЯМР для ^{19}F в позициях 1, 2, 3 могут быть записаны следующим образом:

$$\begin{aligned}
\nu^2 &= \gamma_n^2 [(\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{a}} \mathbf{G})^2 + (a_F \mathbf{F})^2 + 2a_F \mathbf{F} \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{a}} \mathbf{G}] = \\
&= \gamma_n^2 (a_{xy}^2 + a_F^2 F^2 \pm 2a_F a_{xy} F) + \\
&+ \gamma_n^2 (a_{yz}^2 \mp 4a_F a_{xy} F) \begin{cases} \cos^2 \varphi \\ \cos^2(\varphi + 60^\circ) \\ \cos^2(\varphi - 60^\circ) \end{cases}, \quad (64)
\end{aligned}$$

где компоненты a_{xy} , a_{yz} взяты для ядер ^{19}F в позиции 1; φ — азимутальный угол ферромагнитного вектора \mathbf{F} в базисной плоскости. Формула (64) дает прямую связь между частотами ЯМР ^{19}F и параметрами кристаллической (p, c, x, l) и магнитной

(F, φ, \pm) структур. Особо следует отметить специфическую зависимость частот ЯМР ^{19}F от взаимной ориентации векторов ферро- и антиферромагнетизма, или знака вектора Дзялошинского: верхние знаки в (64) соответствуют «правой ориентации» ($d(\theta) > 0$), а нижние знаки — «левой ориентации» ($d(\theta) < 0$), как показано на рис. 10.

Для минимального и максимального значений частот ЯМР ^{19}F имеем

$$\begin{aligned}
\nu_{min}^\pm &= \gamma_n [a_{xy}^2 + a_F^2 \pm 2a_F a_{xy} F]^{1/2}, \\
\nu_{max}^\pm &= \gamma_n [a_{xy}^2 + a_{yz}^2 + a_F^2 F^2 \mp 2a_F a_{xy} F]^{1/2}.
\end{aligned} \quad (65)$$

Учитывая малость вклада изотропного сверхтонкого взаимодействия, знаки a_F и A_{xy} , мы приходим к оценке

$$\nu_{min}^\pm \simeq \gamma_n (|a_{xy}| \mp |a_F F|) = 2.92 A_p \mp |a_F F|,$$

$$\begin{aligned}
\nu_{max}^\pm &\simeq \\
&\simeq \gamma_n \left([a_{xy}^2 + a_{yz}^2]^{1/2} \pm \frac{|a_{xy}|}{[a_{xy}^2 + a_{yz}^2]^{1/2}} |a_F F| \right) = \\
&= 3.65 A_p \pm 0.8 |a_F F|. \quad (66)
\end{aligned}$$

Таким образом,

$$(\nu_{max} - \nu_{min})^\pm = 0.68 A_p \pm 1.8 |a_F F|. \quad (67)$$

Используя значения A_s и A_p , типичные для связей ^{19}F – Fe^{3+} [96, 97], получим (в МГц)

$$\begin{aligned}
\nu_{min}^+ &= 57.6, \quad \nu_{max}^+ = 75.7, \\
(\nu_{max} - \nu_{min})^+ &= 18.1
\end{aligned} \quad (68)$$

при «правой» ориентации векторов \mathbf{F} и \mathbf{G} (рис. 10) и

$$\begin{aligned}
\nu_{min}^- &= 61.4, \quad \nu_{max}^- = 72.7, \\
(\nu_{max} - \nu_{min})^- &= 11.3
\end{aligned} \quad (69)$$

при «левой» ориентации векторов \mathbf{F} и \mathbf{G} (рис. 10).

Спектр ЯМР ^{19}F в нулевом поле для монокристаллических образцов FeF_3 , который мы смоделировали в предположении пренебрежимо малой плоскостной анизотропии [98], показан на рис. 11 для двух различных взаимных ориентаций векторов \mathbf{F} и \mathbf{G} . Для сравнения приведены экспериментальные спектры ЯМР поликристаллических образцов FeF_3 [99, 100], которые характеризуются одинаковыми граничными частотами, несмотря на довольно различную форму. Очевидно, что теоретически смоделированный спектр ЯМР хорошо согласуется с экспериментальным только для «правой» взаимной

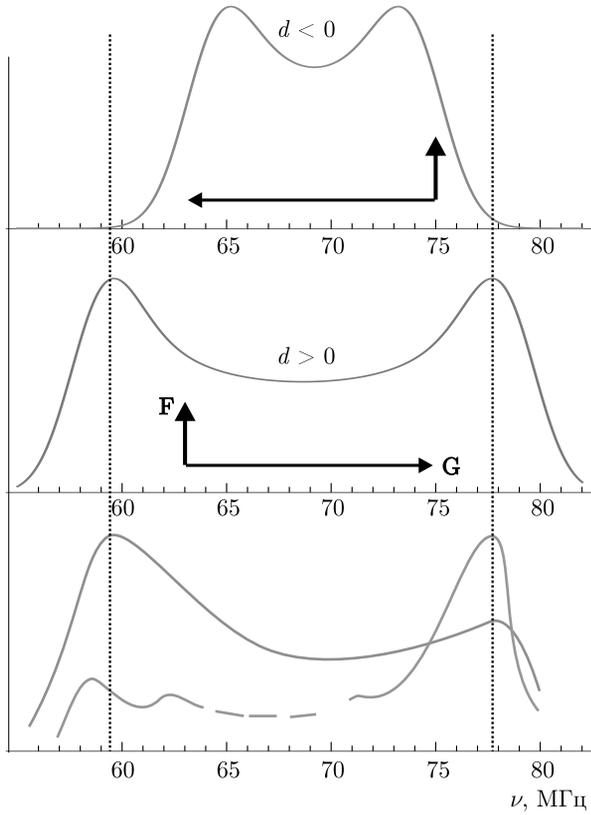


Рис. 11. Смоделированные (верхние панели) и экспериментальные (нижняя панель) спектры ЯМР ядер ^{19}F в нулевом поле для FeF_3

ориентации векторов \mathbf{F} и \mathbf{G} или $d(\text{FeFe}) > 0$, в полном соответствии с нашими теоретическими предсказаниями знаков (см. табл. 4).

Тот же результат, $d(\text{FeFe}) > 0$, следует из данных измерений амплитуд магнитного рассеяния рентгеновских лучей в слабом ферромагнетике FeVO_3 [89].

6.3. Знак вектора Дзялошинского в FeVO_3 и $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$

Используя структурные данные для FeVO_3 [101], мы можем рассчитать z -компоненту вектора Дзялошинского для пар $\text{Fe}_1\text{-O-Fe}_2$ с $\text{Fe}_{1,2}$ в позициях $(1/2, 1/2, 1/2)$, $(0, 0, 0)$ следующим образом:

$$d_z(12) = d_{12}(\theta) [\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2]_z = +\frac{1}{3} \left(\frac{1}{2} - x_h \right) \frac{ab}{l^2} d_{12}(\theta) \approx +0.61 d_{12}(\theta), \quad (70)$$

где $a = 4.626 \text{ \AA}$, $b = 8.012 \text{ \AA}$ — параметры ортогональной элементарной ячейки, $x_h = 0.2981$ — кислородный параметр, $l = 2.028 \text{ \AA}$ — средняя длина связи Fe-O [101].

Аналогично FeF_3 энергия ДМ-взаимодействия для связи $\text{Fe}^{3+}\text{-O}^{2-}\text{-Fe}^{3+}$ может быть записана как

$$E_{DM} = d_z(12) [\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2]_z = -2S^2 d_z(12) (F_x G_y - F_y G_x) = +2 \cdot 0.61 \cdot S^2 d_{12}(\theta) (F_x G_y - F_y G_x). \quad (71)$$

Другими словами, «левая» и «правая» ориентации базисных векторов реализуются соответственно при $d(\theta) < 0$ и $d(\theta) > 0$.

Абсолютная величина ферромагнитного вектора численно равна явному углу скоса подрешеток, который можно найти, используя известные значения поля Дзялошинского: $H_D \approx 100 \text{ кЭ}$ и обменного поля: $H_E \approx 3.0 \cdot 10^3 \text{ кЭ}$ [18, 101],

$$F = H_D / 2H_E \approx 1.7 \cdot 10^{-2}. \quad (72)$$

Если мы знаем поле Дзялошинского, мы можем рассчитать параметр $d_{12}(\theta)$

$$H_D = \frac{6S}{g\mu_B} |d_z(12)| = \frac{6S}{g\mu_B} 0.61 |d(\theta)| = 100 \text{ кЭ}, \quad (73)$$

что дает $|d(\theta)| \approx 1.5 \text{ К}$, величину в два раза меньшую чем в YFeO_3 . Это различие легко объясняется, если учесть различие углов сверхобменной связи в FeVO_3 ($\theta \approx 125^\circ$) и YFeO_3 ($\theta \approx 145^\circ$), т.е. $\cos\theta(\text{FeVO}_3)/\cos\theta(\text{YFeO}_3) \approx 0.7$, что делает эффект компенсации p - d - и s - d -вкладов в коэффициент X (см. табл. 3) более существенным, чем в ортоферрите. Интересно, что структурный множитель $[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2]_z$ в FeVO_3 в 1.6 раза больше средней величины множителя $[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2]_y$ в YFeO_3 .

Знак вектора Дзялошинского в FeVO_3 был недавно экспериментально установлен благодаря использованию новой методики, основанной на интерференции магнитного рассеяния рентгеновских лучей с запрещенным квадрупольным резонансным рассеянием [89]. Авторы обнаружили, что магнитное «закручивание» следует за «скручиванием» промежуточных атомов кислорода в плоскостях между плоскостями железа, т.е. ДМ-взаимодействие вызывает небольшое левое закручивание противоположных спинов атомов в точках $(0, 0, 0)$ и $(1/2, 1/2, 1/2)$. Это означает, что в наших обозначениях вектор Дзялошинского для пары $\text{Fe}_1\text{-O-Fe}_2$ направлен по c -оси, $d_z(12) > 0$, т.е. $d_{12}(\theta) > 0$ в полном соответствии с теоретическими предсказаниями (см. табл. 4).

7. ОБМЕННО-РЕЛЯТИВИСТСКАЯ АНИЗОТРОПИЯ: НЕТРАДИЦИОННЫЕ ОСОБЕННОСТИ ТРАДИЦИОННОЙ ДВУХИОННОЙ ОБМЕННОЙ АНИЗОТРОПИИ

Так называемая квазидипольная двухионная обменная анизотропия (анизотропный обмен)

$$V_{an} = \sum_{m,n,\alpha,\beta} K_{\alpha\beta}(mn) S_{m\alpha} S_{n\beta} \quad (74)$$

с беспшуровым симметричным тензором $K_{\alpha\beta}(mn)$ параметров анизотропии был введен Ван Флеком еще в 1937 г. [102]. Для $S_1 = S_2 = 1/2$ эта анизотропия детально рассматривалась в работах [5] и [103]. С тех пор простой гамильтониан (74) использовался без особых оснований для любых $3d$ -ионов и любых спинов $S \geq 1/2$. Простая квадратичная температурная зависимость эффективной константы анизотропии $K_{TIA}(T) \sim B_S^2(T) \sim m^2(T)$ рассматривалась как свидетельство магнитодипольного или обменно-анизотропного происхождения анизотропии (см., например, ссылки [104, 105]). Однако детальный анализ многоэлектронной обменно-релятивистской анизотропии, являющейся результатом учета эффектов третьего порядка теории возмущений [106, 107]

$$V_{an}(1, 2) \sim \frac{V_{so}(1)V_{ex}(12)V_{so}(2)}{\Delta E^2} + \frac{V_{so}(1)V_{so}(2)V_{ex}(12)}{\Delta E^2} + \frac{V_{so}(1)V_{ex}(12)V_{so}(1)}{\Delta E^2} + \frac{V_{so}(1)V_{so}(1)V_{ex}(12)}{\Delta E^2}, \quad (75)$$

(плюс члены с $1 \leftrightarrow 2$) выявил ряд новых особенностей двухионной анизотропии, не учтенных в традиционных подходах. Прежде всего, это касается тензорной формы анизотропного спинового гамильтониана. Простая квазидипольная форма (74) оправдана только для ионов с $S_m = S_n = 1/2$ и орбитально-невырожденным основным состоянием, тогда как для произвольных спинов тензорная форма усложняется. Так, для ионов S -типа, т.е. ионов с орбитально-невырожденным основным состоянием A_{1g}, A_{2g} в кубическом кристаллическом поле ($\text{Cr}^{3+}, \text{Mn}^{2+}, \text{Fe}^{3+}, \text{Ni}^{2+}, \dots$) получаем эффективный спиновый гамильтониан следующего вида [107]:

$$E_{an} = \sum_{k_1 k_2} \rho_{k_1} \rho_{k_2} \times \left(K_{12}^2(k_1, k_2) \cdot \left[C^{k_1}(\hat{S}_1) \times C^{k_2}(\hat{S}_2) \right]^2 \right), \quad (76)$$

где фигурирует тензорное произведение сферических тензорных гармоник, $\rho_k(T)$ — температурные факторы [108]

$$\begin{aligned} \rho_0 &= 1, \quad \rho_1 = B_S(T) = \frac{\langle S_z \rangle}{S}, \\ \rho_2 &= \frac{\langle 3S_z^2 - S(S+1) \rangle}{S(2S-1)}, \\ \rho_3 &= -\frac{\langle [3S(S+1) - 1] S_z + S S_z^3 \rangle}{S(S-1)(2S-1)} \end{aligned} \quad (77)$$

($\rho_k(T=0) = 1$).

Наряду с квазидипольным членом ($k_1 = k_2 = 1$) в V_{an} появляется ряд недипольных членов с $k_1 k_2 = 20(02), 22$ и $k_1 k_2 = 13(31)$, причем $k_{1,2}$ подчиняются правилу треугольника: $k_{1,2} \leq 2S_{m,n}$. Интересно отметить, что наряду с традиционным спин-зависимым обменом, чисто орбитальный бесспиновый обмен также дает вклад в квазидипольную обменную анизотропию [107].

В приближении среднего поля температурная зависимость эффективных констант обменно-релятивистской анизотропии второго порядка для магнетиков с эквивалентными спинами может быть представлена следующим образом [107]:

$$K(T) = K(0)\rho_1^2 + K_{20}(\rho_2 - \rho_1^2) + K_{22}(\rho_2^2 - \rho_1^2) + K_{13}(\rho_1\rho_3 - \rho_1^2), \quad (78)$$

где температурные факторы $(\rho_2 - \rho_1^2), (\rho_2^2 - \rho_1^2)$ и $(\rho_1\rho_3 - \rho_1^2)$ обращаются в нуль как при $T = 0$ К, так и $T = T_N(T_c)$. Константа K_{11} для традиционной квазидипольной анизотропии определяется как $K_{11} = K(0) - K_{20} - K_{22} - K_{13}$. Отметим, что добавление обычной магнитодипольной и одноионной анизотропии приводит всего лишь к перенормировке констант $K(0)$ и K_{20} , так что выражение (78) представляется универсальной четырехпараметрической формулой для температурной зависимости констант анизотропии второго порядка. Как видно на рис. 12, эта формула позволяет хорошо описать нетривиальную температурную зависимость эффективных констант анизотропии в $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ и Cr_2O_3 . Позднее, этот подход был использован для описания температурной зависимости констант анизотропии в YFeO_3 [110].

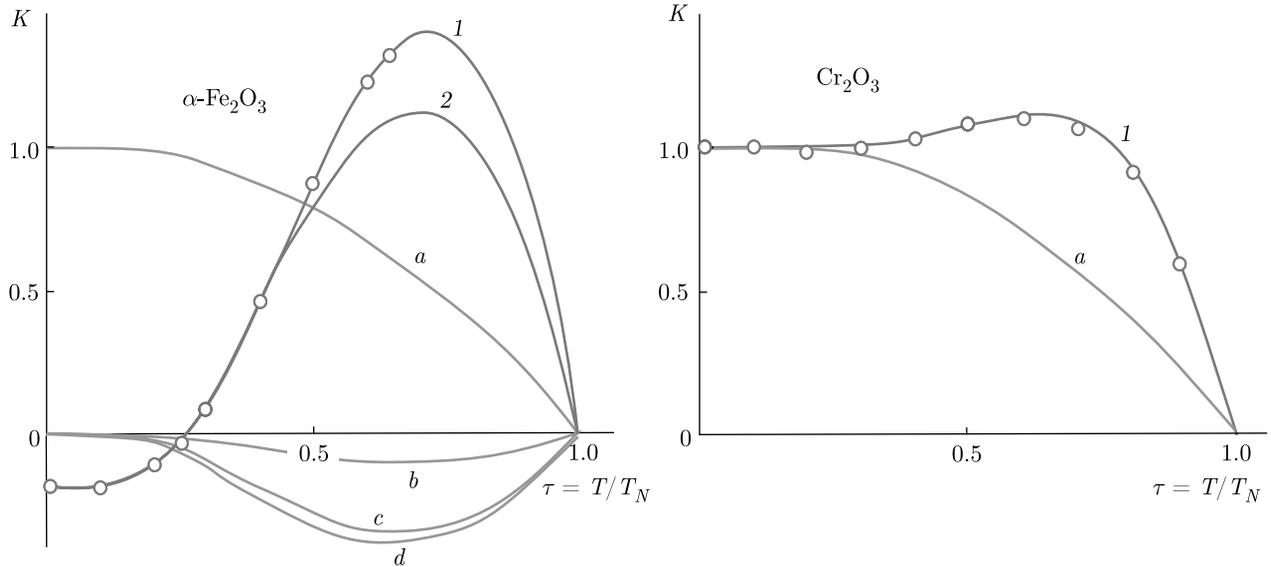


Рис. 12. Температурная зависимость констант эффективной анизотропии в $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ и Cr_2O_3 . Кружки — экспериментальные данные работ [109] и [104] соответственно для $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ и Cr_2O_3 . Кривые 1 представляют результаты подгонки с помощью формулы (78), кривая 2 для гематита показывает результат подгонки с учетом вкладов обычной одноионной и квазидипольной анизотропии. Кривые *a*, *b*, *c*, и *d* демонстрируют температурную зависимость квазидипольного (*a*) и «недипольных» множителей $(\rho_2 - \rho_1^2)$, $(\rho_2^2 - \rho_1^2)$ и $(\rho_1\rho_3 - \rho_1^2)$ соответственно

8. АНТИСИММЕТРИЧНОЕ КОСВЕННОЕ СВЕРХТОНКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ — ЭЛЕКТРОННО-ЯДЕРНЫЙ АНАЛОГ ДМ-ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Детальный анализ данных ЯМР ^{57}Fe в ортоферритах [22] позволил обнаружить антисимметричное косвенное сверхтонкое взаимодействие (antisymmetric supertransferred hyperfine interaction, ASTHF)

$$\hat{H}_{ASTHF} = \sum_{m>n} (\mathbf{a}_{mn} \cdot [\mathbf{I}_m \times \mathbf{S}_n]) \quad (79)$$

как электронно-ядерный аналог антисимметричного ДМ-взаимодействия и найти его вклад в локальное поле на ядрах ^{57}Fe : $H_{ASTHF} \approx 0.26$ Тл, малый в сравнении с соответствующим изотропным вкладом 5.8 Тл [87]. Здесь \mathbf{I} — спин ядра, \mathbf{a}_{mn} — электронно-ядерный аналог вектора Дзялошинского.

Впервые такое электронно-ядерное взаимодействие рассматривалось Ожогиным [111], микроскопическая теория рассматривалась Москвиным [87], показавшим, что экспериментально известная полевая зависимость спектров ЯМР ядер ^{57}Fe в ортоферритах [22] позволяет обнаружить и оценить ASTHF-взаимодействие.

Действительно, с учетом четырехподрешеточной магнитной структуры ортоферрита RFeO_3 с немаг-

нитными R-ионами (La, Y, Lu) локальное поле на ядрах $^{57}\text{Fe}_i$ в одной из 4*b*-позиций можно записать следующим образом:

$$\mathbf{H}_{loc}(i) = a_G(i)\mathbf{G} + a_F(i)\mathbf{F} + a_C(i)\mathbf{C} + a_A(i)\mathbf{A} + \vec{\mathbf{a}}(i)\mathbf{G}, \quad (80)$$

где \mathbf{G} , \mathbf{F} , \mathbf{C} , \mathbf{A} — базисные векторы магнитной структуры, нормированные следующим образом: $\mathbf{G}^2 + \mathbf{F}^2 + \mathbf{C}^2 + \mathbf{A}^2 = 1$. Здесь, первые четыре члена представляют вклад доминирующего изотропного локального и изотропных косвенных сверхтонких взаимодействий, тогда как последний член представляет вклад анизотропных сверхтонких взаимодействий. Здесь и ниже мы учитываем, что $F, C, A \approx 10^{-2}G$, и предполагаем, что анизотропный вклад не превышает величин порядка 1% от основного изотропного вклада $H_0 = a_G G$.

Зависимость частоты ЯМР ^{57}Fe от внешнего поля в магнитной конфигурации $\Gamma_4(G_x, A_y, F_z)$ выглядит как

$$\nu_{\Gamma_4}(\mathbf{h} \parallel \mathbf{c}) = 1 - a_{xx} + (a_{zx}G_x + a_FF_z)h + h^2/2, \quad (81)$$

где все величины a_{zx} , a_F , a_{xx} , h заданы в единицах H_0 (в YFeO_3 при $T = 4.2$ К $H_0 = 551$ кЭ [22]), тогда как ν — в единицах $\nu_0 = \gamma H_0/2\pi$ ($\gamma/2\pi = 0.138$ МГц/кЭ). Полевая производная $(\partial\nu/\partial h)_{h=0}$

$$[\partial\nu_{\Gamma_4}(\mathbf{h} \parallel \mathbf{c})/\partial h]_{h=0} = a_F F_z + a_{zx} G_x, \quad (82)$$

представляет собой сумму ферромагнитного ($a_F F_z$) и антиферромагнитного ($a_{zx} G_x$) вкладов. Приложение магнитного поля параллельно a -оси ($\mathbf{h} \parallel \mathbf{a}$) индуцирует спин-переориентационный переход $\Gamma_4(G_x, A_y, F_z) - \Gamma_2(F_x, C_y, G_z)$, так что для угловой фазы Γ_{42}

$$\nu_{\Gamma_{42}}(\mathbf{h} \parallel \mathbf{a}) = 1 - (a_{xx} G_x^2 \pm 2a_{zx}^{(s)} G_x G_z + a_{zz} G_z^2) + (a_{xz} G_z + a_F F_x \pm a_C G_x) h + h^2/2, \quad (83)$$

где $a_{zx}^{(s)}$ — симметричная часть a_{zx} : $a_{zx}^{(s)} = (a_{zx} + a_{xz})/2$. Знаки \pm в (83) соответствуют ядрам в позициях соответственно 1, 3 и 2, 4 (см. работу [112]). Спиновая переориентация $\Gamma_4 - \Gamma_2$ сопровождается расщеплением частот ЯМР ^{57}Fe с амплитудой

$$\Delta\nu = 2(2a_{zx}^{(s)} G_z + h) G_x, \quad (84)$$

что позволяет найти параметр $a_{zx}^{(s)}$, точнее, его абсолютную величину: $|a_{zx}^{(s)}| = 3.2 \cdot 10^{-3}$ в YFeO_3 [22], $|a_{zx}^{(s)}| = 3.4 \cdot 10^{-3}$ в ErFeO_3 , и $|a_{zx}^{(s)}| = 2.9 \cdot 10^{-3}$ в HoFeO_3 [112].

Экспериментальное значение полевой производной $[\partial\nu_{\Gamma_4}(\mathbf{h} \parallel \mathbf{c})/\partial h]_{h=0} = -10.2 \cdot 10^{-3}$ в YFeO_3 [22] с учетом $a_F = 2H_{STHF}/H_0 - 1 = -0.79$ (H_{STHF} — вклад косвенного сверхтонкого взаимодействия $^{57}\text{Fe}-\text{O}^{2-}-\text{Fe}^{3+}$ в локальное поле) [22] и $F_z = 1.1 \cdot 10^{-2}$ [17] позволяет найти величину $a_{zx} G_x = -1.6 \cdot 10^{-3}$. Окончательно находим, что для $a_{zx}^{(s)} = \pm 3.2 \cdot 10^{-3}$, $a_{zx}^{(a)} = \mp 1.6 \cdot 10^{-3}$ при $F_z > 0$, $G_x < 0$ ($G_x \approx -1$) и $a_{zx}^{(a)} = \mp 4.8 \cdot 10^{-3}$ при $F_z > 0$, $G_x > 0$ ($G_x \approx +1$), т.е. соответственно для $d(\theta) > 0$ и $d(\theta) < 0$. В любом случае антисимметричная и симметричная части анизотропного сверхтонкого взаимодействия в YFeO_3 оказываются сравнимыми по величине. Природа антисимметричной части $\hat{\mathbf{a}}^{\leftrightarrow a}$ может быть связана только с антисимметричным STHF-взаимодействием \hat{H}_{ASTHF} (79), т.е. электронно-ядерным аналогом DM-взаимодействия. Тогда

$$a_{zx}^{(a)}(i) = -\frac{S}{g_n \beta_n} \sum_j a_y(ij). \quad (85)$$

Подобно DM-взаимодействию ASTHF-взаимодействие является результатом совместного действия обобщенного анизотропного STHF-взаимодействия $^{57}\text{Fe}-\text{O}^{2-}-\text{Fe}^{3+}$ [113] и спин-орбитального взаимодействия для ионов Fe^{3+} . Также как спин-спиновое DM-взаимодействие электронно-ядерный аналог вектора Дзялошинского зависит от геометрии связи $^{57}\text{Fe}-\text{O}^{2-}-\text{Fe}^{3+}$

$$\mathbf{a}(ij) = a(\theta) [\mathbf{r}_i \times \mathbf{r}_j], \quad (86)$$

где \mathbf{r}_i , \mathbf{r}_j — единичные радиус-векторы связей катион-анион, а

$$a(\theta) = a_1 + a_2 \cos \theta, \quad (87)$$

где θ — угол связи катион-анион-катион.

Для грубой оценки параметра $a(\theta)$ можно использовать соотношение $a/A_{STHF} \leq \xi/\Delta E$, где ξ — одноэлектронная константа спин-орбитальной связи для $3d$ -электрона; ΔE — энергия возбужденных термов типа 4T_1 для иона Fe^{3+} ; A_{STHF} — параметр изотропного STHF-взаимодействия:

$$\hat{V}_{STHF} = \sum_{i \neq j} A_{STHF}(ij) (\mathbf{I}_i \cdot \mathbf{S}_j). \quad (88)$$

В нашем случае $\xi \leq 5 \cdot 10^2 \text{ см}^{-1}$, $\Delta E \geq 10^4 \text{ см}^{-1}$, так что мы получаем

$$a/A_{STHF} \leq 5 \cdot 10^{-2},$$

что хорошо согласуется с оценками, основанными на экспериментальных данных [22],

$$|a_{zx}^{(a)}/H_{STHF}| \approx 4.6 \cdot 10^{-2}.$$

Это отношение сравнимо с отношением поля Дзялошинского H_D к обменному полю H_E : в YFeO_3 $H_D/H_E \approx 2.2 \cdot 10^{-2}$. Это достаточно естественно, если учесть обменно-релятивистскую природу поля Дзялошинского: $H_D/H_E \propto \xi/\Delta E$, так что $|a_{zx}^{(a)}/H_{STHF}| \propto H_D/H_E$. Другими словами, если H_{STHF} — электронно-ядерный аналог обменного поля, то $H_{ASTHF} = |a_{zx}^{(a)}|$ — электронно-ядерный аналог поля Дзялошинского. В YFeO_3 $H_{STHF} = 58 \text{ кЭ}$, $H_{ASTHF} = 2.6 \text{ кЭ}$ при $G_x > 0$ или $H_{ASTHF} = 0.9 \text{ кЭ}$ при $G_x < 0$. Для грубой оценки электронно-ядерного аналога поля Дзялошинского можно использовать и соотношение $H_{ASTHF} \approx (H_D/H_E) H_{STHF}$.

Антисимметричное STHF-взаимодействие должно наблюдаться и в других слабых ферромагнетиках. Отметим, что для легкоплоскостной фазы ромбоэдрических слабых ферромагнетиков, таких как FeBO_3 , FeF_3 , $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, антиферромагнитный вклад в полевую производную $[\partial\nu(\mathbf{h} \perp \mathbf{C}_3)/\partial h]_{h=0}$ определяется только ASTHF-взаимодействием:

$$[\partial\nu(\mathbf{h} \perp \mathbf{C}_3)/\partial h]_{h=0} = a_{xy}^{(a)} G_y + a_F F_x, \quad (89)$$

что делает его обнаружение и оценку более простым, нежели чем в ортоферритах.

Отметим, что ASTHF-взаимодействие $^{207}\text{Pb}-\text{O}^{2-}-\text{Gd}^{3+}$ было обнаружено с помощью измерений двойного электронно-ядерного резонанса (ENDOR) в $\text{Pb}_5\text{Ge}_3\text{O}_{11}:\text{Gd}^{3+}$ [114], причем его природе можно связать с вкладом спин-орбитального взаимодействия для сильноковалентных связей $\text{Pb}-\text{O}$.

9. АНТИСИММЕТРИЧНАЯ ОБМЕННО-РЕЛЯТИВИСТСКАЯ СВЯЗЬ СПИН-ЧУЖАЯ ОРБИТА И НЕОБЫЧНАЯ МАГНИТООПТИКА СЛАБЫХ ФЕРРОМАГНЕТИКОВ

Интересно, что циркулярные магнитооптические эффекты в слабых ферромагнетиках аномально велики и сравнимы с эффектами в ферритах-гранатах, несмотря на два-три порядка меньшую намагниченность [58, 115, 116]. В работе [117] эта аномалия была связана с новым видом обменно-релятивистских эффектов — взаимодействием спин-чужая орбита, представляющим комбинированный эффект традиционной спин-орбитальной связи на узле и орбитально-недиагональной обменной связи для возбужденного орбитально-вырожденного состояния, билинейная форма которого может быть записана как сумма изотропных, анизотропных антисимметричных и анизотропных симметричных членов соответственно:

$$\hat{V}_{SoO} = \sum_{m>n} \lambda_{mn}^{(0)} (\mathbf{L}_m \cdot \mathbf{S}_n) + \sum_{m>n} (\boldsymbol{\lambda}_{mn} \cdot [\mathbf{L}_m \times \mathbf{S}_n]) + \sum_{m>n} (\mathbf{L}_m \overset{\leftrightarrow}{\lambda}_{mn} \mathbf{S}_n). \quad (90)$$

Стоит отметить, что $\boldsymbol{\lambda}_{mn}$ имеет симметрию вектора Дзялошинского, а последний член имеет симметрию двухионной квазидипольной спиновой анизотропии. Вообще говоря, все три члена могут иметь сравнимую величину.

Интересно, что вклад в билинейное взаимодействие \hat{V}_{SoO} вносят как спин-зависимый, так и спин-независимый чисто орбитальный обмен. Однако спин-зависимый обмен приводит к появлению дополнительных нелинейных спин-квадратичных слагаемых, вклад которых может быть учтен формальной заменой линейного спинового оператора \mathbf{S}_n в (90) на нелинейный оператор \mathbf{S}_{mn} :

$$\hat{S}_q(mn) = \hat{S}_q(n) + \gamma \left[\hat{V}^2(S(m)) \times S^1(n) \right]_q^1 = \hat{S}_q(n) + \gamma \sum_{q_1, q_2} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ q_1 & q_2 & q \end{bmatrix} \times \hat{V}_{q_1}^2(S(m)) S_{q_2}(n), \quad (91)$$

где $V_q^2(S)$ — спиновый неприводимый тензорный оператор второго ранга. В частности,

$$\hat{V}_0^2(S) = 2 \left[\frac{(2S-2)!}{(2S+3)!} \right]^{1/2} (3\hat{S}_z^2 - S(S+1)). \quad (92)$$

Коэффициент γ в (91) может быть рассчитан для определенных термов. Изотропная часть \hat{V}_{SoO} может быть представлена в общем случае как

$$\hat{V}_{SoO}^{iso} = \sum_{mn} \lambda(mn) (\mathbf{L}(m) \cdot \mathbf{S}(n)) + \sum_{m \neq n} \lambda'(mn) (\mathbf{L}(m) \cdot \mathbf{S}(m)) (\mathbf{S}(m) \cdot \mathbf{S}(n)). \quad (93)$$

Подобно вектору Дзялошинского для оценки параметров взаимодействия спин-чужая орбита можно использовать соотношение

$$\lambda(mn) \approx \frac{\lambda' J'}{\Delta E_{ST}}, \quad (94)$$

где λ' и J' — спин-орбитальные константы для термов T_1 , T_2 и недиагональный обменный параметр соответственно, ΔE_{ST} — энергия возбуждения. Простая оценка показывает, что \hat{V}_{SoO} приводит к эффективным магнитным полям, действующим на орбитальные состояния T_1 и T_2 , например, для ионов Fe^{3+} в ферритах, которые могут достигать величин порядка 100 Тл и более.

Мы показали, что антисимметричная обменно-релятивистская связь спин-чужая орбита дает нетрадиционный «антиферромагнитный» вклад в циркулярную магнитооптику для слабых ферромагнетиков, который может превышать обычный «ферромагнитный» член [117, 118] (см. также работу [119]).

Циркулярная магнитооптика определяется вектором гирации \mathbf{g} , дуальным тензору диэлектрической проницаемости ε_{ij} . Например, фарадеевское вращение Θ_F в некубических кристаллах можно записать следующим образом:

$$\Theta_F = A(\mathbf{g} \cdot \mathbf{n}), \quad (95)$$

где \mathbf{n} — единичный вектор в направлении распространения света \mathbf{k} , A — коэффициент, зависящий от

направления \mathbf{k} , поляризации света и главных значений тензора показателей преломления. Вектор гирации имеет те же свойства симметрии, что и вектор ферромагнетизма, что оправдывает известное соотношение

$$\mathbf{g} = \overleftrightarrow{\alpha} \mathbf{F} + \overleftrightarrow{\gamma} \mathbf{H}_{ext}, \quad (96)$$

где вектор гирации — сумма так называемых ферромагнитного и диамагнитного вкладов соответственно. Однако в слабых ферромагнетиках, где ортогональные компоненты векторов ферромагнетизма и антиферромагнетизма могут преобразовываться одинаково, мы получаем дополнительный «антиферромагнитный» вклад. Например, в случае ортоферритов этот член, если пренебречь слабоантиферромагнитными модами, можно записать следующим образом:

$$\Delta \mathbf{g} = \overleftrightarrow{\beta} \mathbf{G} \quad (97)$$

с единственными ненулевыми и, вообще говоря, неравными компонентами β_{zx} и β_{xz} тензора $\overleftrightarrow{\beta}$. Несмотря на основной изотропный вклад (компоненты тензора $\overleftrightarrow{\alpha}$, очевидно, значительно больше, чем компоненты тензора $\overleftrightarrow{\beta}$), соотношение $F \ll G$, типичное для слабых ферромагнетиков, указывает на удивительный эффект появления, возможно, ведущего антиферромагнитного вклада в вектор гирации.

Принято считать, что главную, если не доминирующую, роль в магнитооптическом вращении для видимого и ультрафиолетового света в редкоземельных ортоферритах играют разрешенные электрон-дипольные переходы ${}^6A_{1g} - {}^6T_{1u}$ с переносом заряда $O2p - Fe3d$ в октаэдрических комплексах FeO_6 [58, 118, 120], в частности, из-за орбитального зеемановского расщепления возбужденного термина ${}^6T_{1u}$ с эффективным орбитальным моментом $L = 1$. Помимо обычных орбитального зеемановского

$$V_Z^{orb} = -\beta_e \sum_m (\mathbf{L}_m \cdot \mathbf{H}_{ext})$$

и локального спин-орбитального

$$V_{SO} = \lambda \sum_m (\mathbf{L}_m \cdot \mathbf{S}_m)$$

взаимодействий такое расщепление вызвано нетрадиционным взаимодействием спин-чужая орбита (90). Во всех случаях мы имеем дело с реальным или эффективным орбитальным магнитным полем. Вклад изолированного термина ${}^6T_{1u}$ в вектор гирации можно представить следующим образом [117, 118]:

$$\mathbf{g} = \left(\frac{n_0^2 + 2}{3} \right)^2 \frac{2\pi e^2 f_{AT}}{m\omega_0} \frac{\partial F(\omega, \omega_0)}{\partial \omega_0} \times \left(-N\beta_e \mathbf{H}_{ext} + \lambda_{eff} \sum_m \langle \mathbf{S}_m \rangle + \sum_{m>n} \lambda_{mn}^{(0)} \langle \mathbf{S}_n \rangle - \sum_{m>n} [\lambda_{mn} \times \langle \mathbf{S}_n \rangle] + \sum_{m>n} \overleftrightarrow{\lambda}_{mn} \langle \mathbf{S}_n \rangle \right), \quad (98)$$

где N — число кластеров FeO_6 в единице объема, f_{AT} и $\hbar\omega_0$ — сила осциллятора и энергия перехода ${}^6A_{1g} - {}^6T_{1u}$ соответственно, $F(\omega, \omega_0)$ — дисперсионный фактор. Здесь первый и второй члены определяют обычные «локальные» диамагнитный и изотропный ферромагнитный вклады соответственно, в то время как три других члена, определяемые взаимодействием спин-чужая орбита, дают нетрадиционный «нелокальный» вклад, хотя первый из них дает простую поправку к ферромагнитному члену. Однако второй и третий нелокальные вклады дают новые антисимметричный и симметричный анизотропные антиферромагнитные вклады в вектор гирации соответственно. Их эффект экспериментально изучен в ортоферрите $YFeO_3$ [117]. Анализ зависимости $\Theta_F(\mathbf{H}_{ext})$ позволил определить все вклады в вектор гирации ($\lambda = 0.6328$ мкм):

$$\begin{aligned} \alpha_{zz} F_z &= (0.95 \pm 0.55) \cdot 10^{-3}, \\ \beta_{zx} G_x &= (3.15 \pm 0.55) \cdot 10^{-3}, \\ \alpha_{xx} F_x &= (0.2 \pm 0.7) \cdot 10^{-3}, \\ \beta_{xz} G_z &= (-2.1 \pm 1.0) \cdot 10^{-3}, \\ \gamma_{zz} \approx \gamma_{xx} &= (-1.1 \pm 2.8) \cdot 10^{-6} \text{ кЭ}^{-1}. \end{aligned} \quad (99)$$

Довольно большие ошибки измерений позволяют, тем не менее, с уверенностью определить факт большого, если не доминирующего, антисимметричного антиферромагнитного вклада, связанного с антисимметричным взаимодействием спин-чужая орбита. Наличие спонтанных спин-переориентационных фазовых переходов $\Gamma_4(F_z G_x) \rightarrow \Gamma_2(F_x G_z)$ в некоторых редкоземельных ортоферритах открывает широкие возможности для изучения анизотропии циркулярной магнитооптики [58, 115, 116, 118]. В работе [118] измерен экваториальный эффект Керра в $TmFeO_3$ и $HoFeO_3$ и найдена анизотропия вектора гирации в широком спектральном диапазоне 1.5–4.5 эВ. Магнитооптические спектры были хорошо описаны микроскопической модельной теорией, основанной на доминирующем вкладе переходов с переносом заряда $O2p - Fe3d$ и взаимодействии спин-чужая орбита в октаэдрах FeO_6^{9-} . Исследования продемонстрировали ведущий вклад антисимметричного взаимодействия спин-чужая орбита и

позволили оценить эффективные орбитальные магнитные поля в возбужденных ${}^6T_{1u}$ -состояниях октаэдров FeO_6^{9-} , $H_L \sim 100$ Тл. Эти аномально большие поля можно естественным образом объяснить как результат сильных обменных взаимодействий состояний ${}^6T_{1u}$ с переносом заряда с близлежащими октаэдрами, которые определяются прямым обменом $p-d$. Наличие антиферромагнитного вклада в вектор гирации типично для большого числа многоподрешеточных магнитных материалов, но антисимметричность тензора $\overset{\leftrightarrow}{\beta}$ является специфической особенностью только слабых ферромагнетиков. В случае ромбоэдрических слабых ферромагнетиков, таких как FeVO_3 , FeF_3 или $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, тензор $\overset{\leftrightarrow}{\beta}$, определяющий антиферромагнитный вклад в эффект Фарадея, целиком обусловлен антисимметричным вкладом с учетом требований, накладываемых симметрией кристалла. Так что в таких кристаллах появление антиферромагнитного вклада в вектор гирации полностью определяется антисимметричным взаимодействием спин-чужая орбита.

10. АНТИСИММЕТРИЧНАЯ ОБМЕННО-РЕЛЯТИВИСТСКАЯ СПИН-ЗАВИСИМАЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ

Дзялошинский в 1959 г. теоретически предсказал существование магнитоэлектрического эффекта (МЕ) в антиферромагнетике Cr_2O_3 [121], а годом позже Астров экспериментально зарегистрировал намагниченность, индуцированную электрическим полем [122]. С момента предсказания и открытия МЕ-эффекта в Cr_2O_3 было предложено несколько различных механизмов магнитоэлектрической связи, но настоящий прорыв в этом направлении связан с открытием и изучением мультиферроиков [123].

В настоящее время в основном рассматриваются две различные формы спин-зависимой электрической поляризации кристаллов: билинейная нерелятивистская симметричная спиновая связь [124]

$$\mathbf{P}_s = \sum_{mn} \mathbf{P}_{mn}^s (\mathbf{S}_m \cdot \mathbf{S}_n) \quad (100)$$

и билинейная релятивистская антисимметричная спиновая связь [37, 38]

$$\hat{\mathbf{P}}_a = \sum_{m>n} \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{P}}_{mn} [\mathbf{S}_m \times \mathbf{S}_n]. \quad (101)$$

Строго говоря, $\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{P}}_{mn}$ — тензор второго ранга, антисимметричная часть которого дает вклад в электрическую поляризацию \mathbf{P}_a вида

$$\mathbf{P}_a = \sum_{mn} [\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{P}}_{mn}^a \times [\mathbf{S}_m \times \mathbf{S}_n]]. \quad (102)$$

Эффективные дипольные моменты $\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{P}}_{mn}^{s,a}$ зависят как от геометрии связи, так и от орбитальных состояний ионов m, n .

Если первый член так или иначе связан со спиновым изотропным обменным гейзенберговским взаимодействием (см., например, ссылки [124, 125]), то второй член связывается с антисимметричным ДМ-взаимодействием. Следуя работе [37], электрический диполь \mathbf{P}_a считается индуцированным механизмом спинового тока, поскольку векторное произведение $[\mathbf{S}_m \times \mathbf{S}_n]$ пропорционально спиновому току связи, где вектор Дзялошинского \mathbf{d}_{mn} действует как его векторный потенциал. Именно этот «спин-токовый» вклад ныне часто считается одним из основных механизмов мультиферроизма [126], однако в настоящее время нет надежных теоретических обоснований и экспериментальных доказательств его преобладания над традиционным симметричным изотропным членом [39, 127].

Микроскопическая квантовая теория МЕ-эффекта еще полностью не разработана, хотя было предложено несколько сценариев для конкретных материалов. Авторы работы [37] представили механизм гигантского МЕ-эффекта, теоретически выведенный «в терминах микроскопической электронной модели для неколлинеарных магнетиков». Авторы получили выражение электрического дипольного момента для спиновой пары следующего вида:

$$\mathbf{P}_{ij} = a [\mathbf{R}_{ij} \times [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j]], \quad (103)$$

где \mathbf{R}_{ij} — радиус-вектор связи $i-j$, $\mathbf{S}_{i,j}$ — спиновые моменты, a — некоторый обменно-релятивистский параметр. Однако вывод оригинальной «спин-токовой» модели [37] кажется спорным, поскольку авторы используют физически нереалистичные приближения [127].

Спин-токовая модель может объяснить направление ферроэлектрической поляризации для спин-циклоидных перовскитных манганитов, однако не может объяснить анизотропию поляризации в спин-спиральных LiCu_2O_2 и LiVCuO_4 , направление сегнетоэлектрической поляризации спин-циклоидных делафосситов, таких как AgFeO_2 и $\alpha\text{-NaFeO}_2$, отсутствие поляризации в спин-спиральном NaCu_2O_2 . Эта модель не может объяснить появление ферроэлектрической поляризации, связанной с «винтовым» магнитным упорядочением в нескольких мультиферроиках, включая CuFeO_2 , CuCrO_2 , AgCrO_2 , $\text{Cu}_3\text{Nb}_2\text{O}_8$,

$\text{CaMn}_7\text{O}_{12}$, и $\text{RbFe}(\text{MoO}_4)_2$, потому что вектор распространения $\mathbf{R}_{ij} \parallel [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j]$. Другими словами, для большей части мультиферроиков спин-токовая модель неприменима.

Альтернативный механизм гигантского магнитоэлектрического эффекта в перовскитных манганитах, основанный на антисимметричной магнитоупругой связи, был предложен в работе [38]. Авторы учли сильную зависимость вектора Дзялошинского от угла сверхобменной связи и смещения промежуточного лиганда. Однако здесь мы встречаемся со «слабым» вкладом. Действительно, минимальное значение параметра γ ($\gamma = d\mathbf{D}/d\mathbf{R}$), необходимое для объяснения экспериментального фазового перехода в мультиферроидных манганитах, на два порядка больше разумной микроскопической оценки [38].

Величина макроскопической поляризации \mathbf{P} в немагнитных сегнетоэлектриках, рассчитываемая современными *ab initio*-методами зонной структуры, как правило, исключительно хорошо согласуется с наблюдаемой экспериментально. Однако современные *ab initio*-вычисления для различных мультиферроиков: манганитов HoMnO_3 , TbMn_2O_5 , HoMn_2O_5 , спин-спиральных квазиодномерных купратов LiCuVO_4 и LiCu_2O_2 дают разброс данных в пределах одного-двух порядков с абсолютно неоднозначными и необоснованными значениями поляризации. Действительно, основные отправные точки текущих версий таких спин-поляризованных подходов, как LSDA, исключают любую возможность получить надежную количественную оценку спин-зависимой электрической поляризации в мультиферроиках. Основной недостаток таких спин-поляризованных подходов состоит в том, что они «стартуют» с функционала локальной плотности, который подразумевает наличие большого фиктивного локального одноэлектронного спин-магнитного поля. Считается, что величина поля определяется внутриатомным обменом Хунда, в то время как его ориентация регулируется эффективными молекулярными или обменными полями. Несмотря на предположительно спиновую природу этого поля, оно вызывает нефизически гигантскую спин-зависимую перестройку зарядовой плотности, которую невозможно воспроизвести с помощью любой традиционной техники, работающей со спиновыми гамильтонианами. В таком случае прямое применение схемы LSDA может привести к переоценке эффектов или даже к качественно неверным результатам из-за нефизического эффекта нарушения пространственной симметрии, индуцированного спиновой конфигурацией.

В целом, подход LSDA кажется более или менее оправданным для полуколичественного описания эффектов обменной связи для материалов с классическим коллинеарным магнитным порядком неелевского типа. Однако это может привести к ошибочным результатам для систем и эффектов, в которых нарушение симметрии и квантовые флуктуации имеют принципиальное значение, таких как: неколлинеарные спиновые конфигурации, в частности, в квантовых магнетиках со спином $s = 1/2$, релятивистские эффекты, такие как симметричная спиновая анизотропия, антисимметричное DM-взаимодействие и спин-зависимая электрическая поляризация. В самом деле, правильная трактовка этих эффектов высших порядков теории возмущения требует правильного учета как локальной симметрии, так и квантовых флуктуаций (см., например, работу [31]).

Стандартная микроскопическая теория спин-зависимой электрической поляризации, которая подразумевает вывод эффективных спиновых операторов для нерелятивистских и релятивистских вкладов в электрическую поляризацию в типичной задаче «три центра — два электрона/дырки» на примере связи $\text{Cu}_1\text{—O—Cu}_2$ в купратах была предложена в работах [39, 127]. Авторы использовали хорошо известные стандартные подходы для учета ковалентных эффектов для p - d -связей, внутриатомных корреляций, кристаллического поля и спин-орбитальной связи. Несмотря на то, что описание было сосредоточено на трехузельной системе $\text{Cu}_1\text{—O—Cu}_2$ с двумя дырками, типичной для купратов с тетрагональной локальной симметрией и основным состоянием $\text{Cu}3d_{x^2-y^2}$, обобщение результатов на кластеры $\text{M}_1\text{—O—M}_2$ в других $3d$ -оксидах не представляет особых трудностей. Эффективная электрическая поляризация различается для синглетного и триплетного состояний из-за соответствующей синглет-триплетной разницы в амплитудах гибридизации. Следовательно, мы можем ввести эффективный нерелятивистский обменно-дипольный спиновый оператор

$$\hat{\mathbf{P}}_{12} = \hat{\mathbf{P}}_{12}^{(0)} + \mathbf{\Pi}_{12}(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2) \quad (104)$$

с обменно-дипольным моментом

$$\mathbf{\Pi}_{12} = \langle \mathbf{P} \rangle_{S=1} - \langle \mathbf{P} \rangle_{S=0} \quad (105)$$

и бесспиновый вклад

$$\hat{\mathbf{P}}_{12}^{(0)} = \frac{1}{4} (3\langle \mathbf{P} \rangle_{S=1} + \langle \mathbf{P} \rangle_{S=0}).$$

Нужно отметить, что суммарная локальная электрическая поляризация лежит в плоскости связи $\text{Cu}_1\text{—O—Cu}_2$. Как показано в работе [39] (см. также работы [127]), в общем случае обменно-дипольный момент может быть представлен в виде суперпозиции «продольного» и «поперечного» вкладов:

$$\mathbf{\Pi}_{12} = p_{\parallel} \mathbf{R}_{12} + p_{\perp} \boldsymbol{\rho}_{12} \quad (106)$$

($\mathbf{R}_{12} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$, $\boldsymbol{\rho}_{12} = (\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2)$), где p_{\parallel} не исчезает только при специфической неэквивалентности центров 1 и 2 при отсутствии центра инверсии даже для коллинеарной цепочки Cu—O—Cu .

Спин-орбитальное взаимодействие V_{SO} для ионов меди и кислорода приводит к синглет-триплетному смешиванию, которое дает релятивистский вклад в электрическую поляризацию, представляемый в виде эффективного спинового оператора, или обменно-релятивистского дипольного момента, который можно записать следующим образом:

$$\hat{\mathbf{P}}_{12}^{rel} = -\frac{1}{J_{12}} \mathbf{\Pi}_{12} (\mathbf{D}_{12} \cdot [\hat{\mathbf{s}}_1 \times \hat{\mathbf{s}}_2]) = -\frac{d_{12}(\theta)}{2l^2 J_{12}} \times \\ \times (p_{\parallel} \mathbf{R}_{12} + p_{\perp} \boldsymbol{\rho}_{12}) ([\mathbf{R}_{12} \times \boldsymbol{\rho}_{12}] \cdot [\hat{\mathbf{s}}_1 \times \hat{\mathbf{s}}_2]). \quad (107)$$

Другими словами, антисимметричный обменно-релятивистский вклад в дипольный момент представляет собой суперпозицию двух («продольного» и «поперечного») взаимно ортогональных вкладов, определяемых только геометрией сверхобмена Cu—O—Cu , тогда как «спин-токовый» фактор всего лишь только модулирует его величину.

Антисимметричный обменно-релятивистский дипольный момент типа (107) может служить доминирующим релятивистским вкладом в электрическую поляризацию в $\text{Cu}_1\text{—O—Cu}_2$ или подобных системах. Следует отметить, что оператор обменно-дипольного момента (104) и оператор обменно-релятивистского дипольного момента (107) являются очевидными аналогами соответственно симметричного изотропного обмена Гейзенберга и антисимметричного обмена Дзялошинского–Мория. Следовательно, соотношение $|P_{12}^{rel}| \sim \Delta g/g |\mathbf{\Pi}_{12}|$ — аналог соотношения Мория — кажется разумной оценкой результирующего релятивистского вклада в электрическую поляризацию в кластерах $\text{M}_1\text{—O—M}_2$. В настоящее время предложить более надежную и столь же физически ясную оценку — сложная и, наверно, безнадежная задача. Принимая во внимание типичное значение $\Delta g/g \leq 0.1$, мы можем оценить максимальное значение $|P_{12}^{rel}|$ как $10^{-3} |e| \text{Å}$ ($\sim 10^2$ мкКл/м²), что указывает на то, что

этот обменно-релятивистский механизм вносит относительно слабый вклад в гигантский мультиферроизм с ферроэлектрической поляризацией порядка 10^3 мкКл/м², как в TbMnO_3 [128], хотя он может давать заметный вклад, например, в $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_8$ [129].

В заключение раздела обратим внимание на магнитоэлектрический эффект в ортоферритах RFeO_3 . Их структура $Pbnm$ особенно интересна с точки зрения неколлинеарного магнетизма, однако перовскитная фаза $Pbnm$ неполярна и поэтому ни одно из соединений, кристаллизующихся в этой пространственной группе, не будет проявлять спонтанную электрическую поляризацию. Из чисто симметричных соображений можно показать, что ни спонтанная поляризация, ни линейный, ни квадратичный магнитоэлектрический эффект невозможны, если магнитный порядок включает только спины Fe-узлов. В то же время, спин-скошенные структуры редкоземельных ортоферритов могут демонстрировать ферроэлектричество, если существуют некоторые упорядочения редкоземельной подрешетки, которые сами по себе обеспечивают линейный магнитоэлектрический эффект. Например, GdFeO_3 и DyFeO_3 представляют собой два важных примера таких низкотемпературных мультиферроиков [130]. Интересно отметить, что замена части ионов диспрозия в DyFeO_3 на ионы висмута приводит к появлению сильного квадратичного магнитоэлектрического эффекта, природа которого связана с аномально высокой поляризуемостью ионов Bi^{3+} , приводящей к образованию протяженных облаков локальной электрической поляризации вблизи ионов Bi^{3+} [131].

11. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Взаимодействие Дзялошинского–Мория, или антисимметричный обмен, будучи достаточно простым по форме, приводит к самым разным магнитным явлениям: слабому ферро-антиферро- и слабому поперечному ферромагнетизму в большом количестве магнитных $3d$ -оксидов, мультиферроизму, гелимагнетизму в CsCuCl_3 , спиральным и скирмионным структурам в кристаллах типа MnSi и др. В статье мы представили обзор микроскопической теории ДМ-взаимодействия и связанных обменно-релятивистских эффектов, таких как обменная анизотропия, электронно-ядерное антисимметричное косвенное сверхтонкое взаимодействие, антисимметричные магнитогиротропные эффекты и антисимметричная магнитоэлектрическая связь в

ортоферритах $RFeO_3$ и нескольких типичных слабых ферромагнетиках. Большое внимание было уделено обобщению теории Мориа и выводу вектора Дзялошинского, его величине, ориентации и знаку при различных типах сверхобменного взаимодействия и кристаллического поля. Полученное на микроскопическом уровне выражение для зависимости вектора Дзялошинского от геометрии сверхобмена позволило найти все углы явного и скрытого скоса магнитных подрешеток, т.е. слабые ферро- и антиферромагнитные моды в ортоферритах $RFeO_3$.

Теоретические предсказания были успешно подтверждены различными экспериментальными методами. Основываясь на теоретических выводах относительно знака вектора Дзялошинского, мы предсказали и подробно изучили новое магнитное явление, слабый ферримагнетизм в смешанных слабых ферромагнетиках, таких как $RFe_{1-x}Cr_xO_3$ с конкурирующими знаками векторов Дзялошинского. В отличие от конечных составов, слабые ферримагнетики обладают комплексом необычных магнитных свойств, включая точки концентрационной и температурной компенсации, новые спин-переориентационные переходы, в том числе недавно обнаруженный переход в угловую фазу с пространственной ориентацией вектора антиферромагнетизма и появлением «запрещенной» в ортоферритах и ортохромитах b -компоненты магнитного момента. Слабые ферримагнетики имеют широкие перспективы для практического применения, включая термомагнитные запоминающие устройства с произвольным доступом (MRAM), термомагнитные переключатели и другие многофункциональные устройства.

Как показано, измерения лигандного ЯМР в слабых ферромагнетиках являются эффективным инструментом изучения ДМ-взаимодействия и определения взаимной ориентации векторов ферро- и антиферромагнетизма и, следовательно, установления знака вектора Дзялошинского. Мы рассмотрели ряд обменно-релятивистских взаимодействий, которые так или иначе имеют общую природу со спин-билинейным ДМ-взаимодействием. Так, в результате детального анализа тензорной структуры обменно-релятивистской двухионной анизотропии установлено появление новых недипольных вкладов с нетрадиционной температурной зависимостью. Анализ полевых зависимостей частот ЯМР ^{57}Fe в ортоферритах указал на существование заметного антисимметричного косвенного сверхтонкого взаимодействия как электронно-ядерного аналога ДМ-взаимодействия. Нами установлен новый необычный аналог ДМ-взаимодействия — антисимметричное взаи-

модействие спин-чужая орбита, которое, как показано, может вносить решающий вклад в циркулярную магнитооптику слабых ферромагнетиков. Мы рассмотрели обменно-релятивистский антисимметричный вклад в спин-зависимую электрическую поляризацию для $3d$ -магнетиков и установили его зависимость от геометрии сверхобменной связи магнитных ионов.

Взаимодействие Дзялошинского–Мориа и другие обменно-релятивистские эффекты продолжают оставаться предметом широких теоретических и экспериментальных исследований в физике сильно-коррелированных материалов.

Благодарности. Я благодарен И. Е. Дзялошинскому за поддержку моей работы и стимулирующие обсуждения. Считаю своим долгом отметить, что большая часть работы была сделана в тесном сотрудничестве с А. М. Кадомцевой и другими сотрудниками проблемной лаборатории магнетизма Московского университета. Благодарю Е. В. Синицына и И. Г. Бострем за плодотворное многолетнее сотрудничество, С. В. Малеева, А. К. Звездина, Р. В. Писарева, Б. З. Малкина, М. В. Еремина, А. А. Мухина, Б. С. Цукерблата, Ш.-Л. Дрекслера, Р. Е. Уолстедта, В. Е. Дмитриенко за стимулирующие дискуссии.

Финансирование. Работа выполнена в рамках Программы 211 правительства Российской Федерации (соглашение № 02.А03.21.0006) и проекта № FEUZ-2020-0054 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

ЛИТЕРАТУРА

1. И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **32**, 1547 (1957) [Sov. Phys. JETP **5**, 1259 (1957)]; I. Dzyaloshinsky, J. Phys. Chem. Sol. **4**, 241 (1958).
2. T. Smith, Phys. Rev. **8**, 721 (1916).
3. L. M. Matarrese and J. W. Stout, Phys. Rev. **94**, 1792 (1954).
4. А. С. Боровик-Романов, М. П. Орлова, ЖЭТФ **31**, 579 (1956) [Sov. Phys. JETP **4**, 531 (1957)].
5. T. Moriya, Phys. Rev. Lett. **4**, 228 (1960); Phys. Rev. **120**, 91 (1960).
6. F. Keffer, Phys. Rev. **126**, 896 (1962).
7. А. С. Москвин, ФТТ **12**, 3209 (1970) [Sov. Phys. Solid State, USSR **12**, 2593 (1971)].

8. А. С. Москвин, Е. В. Сеницын, ФТТ **14**, 2535 (1972).
9. А. С. Москвин, Е. В. Сеницын, ФТТ **17**, 2495 (1975) [Sov. Phys. Solid State **17**, 2495 (1975)].
10. А. С. Москвин, И. Г. Бострем, ФТТ **19**, 2616 (1977) [Sov. Phys. Solid State **19**, 1532 (1977)].
11. А. С. Москвин, Дисс.... докт. физ.-мат. наук, Москва, МГУ (1984).
12. A. S. Moskvin, J. Magn. Mater. **400**, 117 (2016).
13. A. S. Moskvin, Condens. Matter. **4**(4), 84 (2019).
14. P. J. Flanders and J. P. Remeika, Philos. Mag. **11**, 1271 (1965); F. Bodker, M. F. Hansen, C. B. Koch, K. Lefmann, and S. Morup, Phys. Rev. B **61**, 6826 (2000).
15. T. Thio, T. R. Thurster, N. W. Preyer, P. J. Picone, M. A. Kastner, H. P. Jenssen, D. R. Gabbe, C. Y. Chen, R. J. Birgeneau, and A. Aharony, Phys. Rev. B **38**, 905 (1988).
16. Б. Ю. Котюжанский, Л. А. Прозорова, Изв. АН СССР, серия физ. **44**, 1409 (1980).
17. S. Jacobs, H. F. Burne, and L. M. Levinson, J. Appl. Phys. **42**, 1631 (1971).
18. Б. Ю. Котюжанский, Л. А. Прозорова, ЖЭТФ **81**, 1913 (1981).
19. В. И. Ожогин, С. С. Якимов, Р. А. Восканян, В. Я. Гамлицкий, Письма в ЖЭТФ **8**, 256 (1968) [JETP Lett. **8**, 157 (1968)].
20. А. С. Москвин, ФТТ **32**, 1644 (1990) [Sov. Phys. Solid State **32**, 959 (1990)].
21. А. М. Кадомцева, А. С. Москвин, И. Г. Бострем и др., ЖЭТФ **72**, 2286 (1977).
22. H. Luetgemeier, H. G. Bohn, and M. Brajczewska, J. Magn. Mater. **21**, 289 (1980).
23. В. П. Плахтий, Ю. П. Черненко, Я. Швейцер, М. Н. Бедризова, ЖЭТФ **80**, 2465 (1981) [JETP **53**, 1291 (1981)]; V. P. Plakhtii, Yu. P. Chernenkov, M. N. Bedrizova, and J. Schweizer, AIP Conference Proceedings **89**, 330 (1982); V. P. Plakhtii, Yu. P. Chernenkov, and M. N. Bedrizova, Sol. St. Commun. **47**, 309 (1983).
24. M. Oshikawa and I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **79**, 2883 (1997); I. Affleck and M. Oshikawa, Phys. Rev. B **60**, 1038 (1999-II).
25. D. Coffey, T. M. Rice, and F. C. Zhang, Phys. Rev. B **44**, 10 112 (1991); N. E. Bonesteel, T. M. Rice, and F. C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **68**, 26844 (1992); N. E. Bonesteel, Phys. Rev. B **47**, 11302 (1993-I).
26. W. Koshibae, Y. Ohta, and S. Maekawa, Phys. Rev. B **47**, 3391 (1993); Phys. Rev. B **50**, 3767 (1994).
27. L. Shekhtman, O. Entin-Wohlman, and A. Aharony, Phys. Rev. Lett. **69**, 836 (1992).
28. W. Koshibae, Y. Ohta, and S. Maekawa, Phys. Rev. Lett. **71**, 467 (1993); L. Shekhtman, O. Entin-Wohlman, and A. Aharony, Phys. Rev. Lett. **71**, 468 (1993).
29. I. Tsukada, X. F. Sun, S. Komiyama, A. N. Lavrov, and Y. Ando, Phys. Rev. B **67**, 224401 (2003).
30. M. Hücker, V. Kataev, J. Pommer, U. Ammerahl, A. Revcolevschi, J. M. Tranquada, and B. Büchner, Phys. Rev. B **70**, 214515 (2004).
31. A. S. Moskvin, ЖЭТФ **131**, 1048 (2007) [JETP **104**, 911 (2007)].
32. R. E. Walstedt, B. S. Shastry, and S. W. Cheong, Phys. Rev. Lett. **72**, 3610 (1994); R. E. Walstedt and S. W. Cheong, Phys. Rev. B **64**, 014404 (2001).
33. A. S. Moskvin, Phys. Rev. B **75**, 054505 (2007).
34. И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **46**, 1420 (1964) [Sov. Phys. JETP **19**, 960 (1964)].
35. U. K. Rössler, A. N. Bogdanov, and C. Pfeleiderer, Nature **442**, 797 (2006).
36. F. Freimuth, S. Blügel, and Y. Mokrousov, J. Phys.: Condens. Matter **26**, 104202 (2014).
37. H. Katsura, N. Nagaosa, and A. V. Balatsky, Phys. Rev. Lett. **95**, 057205 (2005).
38. I. E. Sergienko, Cengiz Şen, and E. Dagotto, Phys. Rev. B **73**, 094434 (2006).
39. A. S. Moskvin and S.-L. Drechsler, Phys. Rev. B **78**, 024102 (2008).
40. P. W. Anderson, Phys. Rev. **79** (1950) 350; *ibid* **115**, 2 (1959).
41. P. W. Anderson, In: Magnetism, ed. by G. T. Rado and H. Suhl, N-Y, V.I, 25 (1963); Solid State Phys. **14**, 99 (1963); K. W. H. Stevens, Phys. Rep. **24**, 1 (1976); G. Van Kalker, W. W. Schmidt, and R. Block, Phys. B **97**, 315 (1979); N. Fuchikami and Y. Tanabe, J. Phys. Soc. Jpn. **45**, 1559 (1978).
42. V. V. Druzhinin and A. S. Moskvin, Physics of Metals and Metallography-USSR **26**, 32 (1968).
43. P. M. Levy, Phys. Rev. **177**, 509 (1969); G. M. Copland and P. M. Levy, Phys. Rev. B **1**, 3043 (1970).

44. I. Veltrusky, Czechoslovak J. Phys. **25**, 101 (1975).
45. А. А. Сидоров, А. С. Москвин, В. В. Попков, ФТТ **18**, 3005 (1976).
46. A. S. Moskvina and V. V. Druzhinin, Opt. Spectr.-USSR **29**, 478 (1970).
47. A. S. Moskvina and A. S. Luk'yanov, Sov. Phys. Solid State **19**, 701 (1977).
48. S. Freeman, Phys. Rev. B **7**, 3960 (1973).
49. A. S. Moskvina, N. S. Ovanesyan, and V. A. Trukhtanov, Hyperfine Interactions **1**, 265 (1975).
50. R. M. Hornreich, S. Shtrikman, B. M. Wanklyn, and I. Yaeger, Phys. Rev. B **13**, 4046 (1976).
51. S. E. Hahn, A. A. Podlesnyak, G. Ehlers, G. E. Granroth, R. S. Fishman, A. I. Kolesnikov, E. Pomjakushina, and K. Conder, Phys. Rev. B **89**, 014420 (2014).
52. K. Park, H. Sim, J. C. Leiner, Y. Yoshida, J. Jeong, S. Yano, J. Gardner, P. Bourges, M. Klicpera, V. Sechovský, M. Boehm, and J.-G. Park, J. Phys.: Condens. Matter **30**, 235802 (2018).
53. K. Amelin, U. Nagel, R. S. Fishman, Y. Yoshida, Hasung Sim, Kisoo Park, Je-Geun Park, and T. Room Phys. Rev. B **98**, 174417 (2018).
54. D. Bloch, J. Phys. Chem. Sol. **27**, 881 (1966).
55. V. E. Dmitrienko, E. N. Ovchinnikova, J. Kokubun, and K. Ishida, Письма в ЖЭТФ **92**, 424 (2010) [JETP Lett. **92**, 383 (2010)].
56. A. S. Moskvina, J. Magn. Magn. Mater. **463**, 50 (2018).
57. S. Sugano, Y. Tanabe, and H. Kamimura, *Multiplets of Transition-Metal Ions in Crystals*, Academic Press, New York (1970).
58. F. J. Kahn, P. S. Pershan, and J. P. Remeika, Phys. Rev. **186**, 891 (1969).
59. B. C. Tofield and B. F. E. Fender, J. Phys. Chem. Sol. **31**, 2741 (1970).
60. D. V. Belov, A. K. Zvezdin, A. M. Kadomtseva, I. B. Krynetski, A. S. Moskvina, and A. A. Mukhin, Fizika tverdogo tela **23**, 2831 (1981) [Sov. Phys. Solid State **23**, 1654 (1981)].
61. А. М. Кадомцева, А. П. Агафонов, И. А. Зорин, А. С. Москвин, Т. Л. Овчинникова, В. А. Тимофеева, ЖЭТФ **84**, 1432 (1983) [JETP **57**, 833 (1983)].
62. E. Holzschuh, A. B. Denison, W. Kundig, P. F. Meier, and B. D. Patterson, Phys. Rev. B **27** 5294 (1983).
63. D. G. Georgieva, K. A. Krezhov, and V. V. Nietza, Sol. St. Commun. **96**, 535 (1995).
64. А. М. Кадомцева, А. П. Агафонов, М. М. Лукина и др., ЖЭТФ **81**, 700 (1981).
65. А. В. Залесский, А. М. Савинов, И. С. Желудев, А. Н. Иващенко, ЖЭТФ **68**, 1449 (1975) [JETP **41**, 723 (1975)].
66. А. М. Кадомцева, В. Н. Милов, А. С. Москвин, М. Пардави-Хорват, ФТТ **20**, 817 (1978) [Sov. Phys. Solid State **20**, 474 (1978)].
67. E. V. Sinityn, A. M. Kadomtseva, A. S. Moskvina, I. G. Bostrem, V. A. Timofeeva, and O. V. Kazakevich, Sov. Phys. Solid State **25**, 161 (1983).
68. A. S. Moskvina and M. A. Vigura, Sov. Phys. Solid State **28**, 1268 (1986).
69. А. М. Кадомцева, И. Г. Бострем, Л. М. Васильева, И. В. Крынetskii, М. М. Лукина, and А. С. Москвин, Sov. Phys. Solid State **22**, 1146 (1980).
70. A. S. Moskvina, M. A. Vigura, and A. P. Agafonov, Sov. Phys. Solid State **28**, 1631 (1986).
71. N. Dasari, P. Mandal, A. Sundaresan, and N. S. Vidhyadhiraja, Europhys. Lett. **99**, 17008 (2012).
72. F. Pomiro, R. D. Sánchez, G. Cuello, A. Maignan, C. Martin, and R. E. Carbonio, Phys. Rev. B **94**, 134402 (2016).
73. O. V. Billoni, F. Pomiro, S. A. Cannas, C. Martin, A. Maignan, and R. E. Carbonio, J. Phys.: Condens. Matter **28**, 476003 (2016).
74. A. P. Agafonov, I. A. Zorin, A. M. Kadomtseva, A. S. Moskvina, and V. A. Timofeeva, Sov. Phys. Solid State **26**, 1292 (1984).
75. А. М. Кадомцева and А. С. Москвин, Acta Phys. Polonica A **68**, 303 (1985).
76. А. А. Mukhin, D. Travkin, E. Egoyan, S. P. Lebedev, A. S. Prokhorov, A. M. Balbashov, and Yu. Parsegov, J. Magn. Magn. Mater. **140-144**, 2141 (1995).
77. Michael P. O'Horo and Olaf Muller, J. Appl. Phys. **49**, 1516 (1978).
78. G. P. Vorob'ev, A. M. Kadomtseva, A. S. Moskvina, Yu. F. Popov, and V. A. Timofeeva, Phys. Sol. St. **39**, 97 (1997).
79. V. E. Dmitrienko, E. N. Ovchinnikova, S. P. Collins, G. Nisbet, G. Beutier, Y. O. Kvashnin, V. V. Mazurenko, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, K. A. Kozlovskaya, F. Wilhelm, F. de Bergevin, J. Kokubun, and A. Rogalev, VI Euro-Asian Symposium "Trends

- in MAGnetism"(EASTMAG-2016): Abstracts. – Krasnoyarsk, Kirensky Institute of Physics, Russian Academy of Sciences, Siberian Branch (2016), p.290.
80. A. M. Kadomtseva, M. M. Lukina, A. S. Moskvin, and N. A. Khafizova, *Sov. Phys. Solid State* **20**, 1235 (1978).
81. A. S. Moskvin, G. G. Artem'ev, A. M. Kadomtseva, T. M. Ledneva, M. M. Lukina, and T. L. Ovchinnikova, *Sov. Phys. Solid State* **33**, 366 (1991).
82. Mao Jinhua, Sui Yu, Zhang Xingquan et al., *Appl. Phys. Lett.* **98**, 192510 (2011).
83. T. Bora, P. Saravanan, and S. Ravi, *J. Supercond. Nov. Magn.* **26**, 1645 (2013).
84. I. Fita, V. Markovich, A. S. Moskvin, A. Wisniewski, R. Puzniak, P. Iwanowski, C. Martin, A. Maignan, Raúl E. Carbonio, M. U. Gutowska, A. Szewczyk, and G. Gorodetsky, *Phys. Rev. B* **97**, 104416 (2018).
85. A. Kumar and S. M. Yusuf, *Phys. Rep.* **556**, 1 (2015).
86. S. V. Grigoriev, N. M. Potapova, S.-A. Siegfried, V. A. Dyadkin, E. V. Moskvin, V. Dmitriev, D. Menzel, C. D. Dewhurst, D. Chernyshov, R. A. Sadykov, L. N. Fomicheva, and A. V. Tsvyashchenko, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 207201 (2013).
87. А. С. Москвин, *ЖЭТФ* **90**, 1734 (1986) [*JETP* **63**, 1015 (1986)].
88. Г. К. Чепурных, О. Г. Медведовская, О. А. Никитина, *ФНТ* **26**, 108 (2000) [*Low Temp. Phys.* **26**, 81 (2000)].
89. V. E. Dmitrienko, E. N. Ovchinnikova, S. P. Collins, G. Nisbet, and G. Beutier, *J. Phys.: Conference Series* **519**, 012003 (2014); V. E. Dmitrienko, E. N. Ovchinnikova, S. P. Collins, G. Nisbet, G. Beutier, Y. O. Kvashnin, V. V. Mazurenko, A. I. Lichtenstein, and M. I. Katsnelson, *Nature Phys.* **10**, 202 (2014).
90. Ifeanyi John Onuorah, Pietro Bonfa, and Roberto De Renzi, *Phys. Rev. Mater.* **3**, 073804 (2019).
91. Ifeanyi John Onuorah, Pietro Bonfa, and Roberto De Renzi, *Phys. Rev. B* **97**, 174414 (2018).
92. C. Boekema, R. L. Lichti, and K. J. Rugg, *Phys. Rev. B* **30**, 6766 (1984).
93. M. A. Hepworth, K. H. Jack, R. D. Peacock, and G. J. Westland, *Acta Cryst.* **10**, 63 (1957).
94. E. A. Turov and M. P. Petrov, *Nuclear Magnetic Resonance in Ferro and Antiferromagnetics*, John Wiley & Sons, Incorporated (1972).
95. A. J. Jacobson, L. McBride, and B. E. F. Fender, *J. Phys. C: Sol. St. Phys.* **7**, 783 (1974).
96. T. P. P. Hall, W. Hayes, R. W. H. Stevenson, and J. Wilkens, *J. Chem. Phys.* **38**, 1977 (1963).
97. C. D. Adam, *J. Phys. C: Sol. St. Phys.* **14**, L105 (1981).
98. R. Wolfe, A. G. Kurtzig, and R. C. Le Crow, *J. Appl. Phys.* **41**, 1218 (1970).
99. М. П. Петров, А. П. Паугурт, Г. А. Смоленский, *Письма в ЖЭТФ* **15**, 305 (1972) [*JETP Letters-USSR* **15**, 214 (1972)].
100. A. V. Zalesskii, V. V. Vanchikov, V. G. Krivenko, and A. N. Ivashchenko, *Phys. Stat. Sol. (a)* **54**, 471 (1979).
101. R. Diehl, *Sol. Stat. Com.* **17**, 743 (1975); R. Diehl, W. Tantz, B. I. Nolang, and W. Wetling, *Growth and Properties of Iron Borate, FeBO3 //Current Topics in Materials Science. - Uppsala, 1984. - V.11. - Ch.3. - P.241.*
102. I. N. Van Vleck, *Phys. Rev.* **52**, 1178 (1937).
103. K. Yosida, *J. Appl. Phys.* **39**, 511 (1960).
104. S. Foner, *Phys. Rev.* **130**, 183 (1963).
105. P. J. Besser, A. H. Morrish, and C. W. Searle, *Phys. Rev.* **153**, 263 (1967).
106. A. E. Nikiforov, V. Ya. Mitrofanov, and A. N. Men, *Phys. St. Sol. (b)* **45**, 65 (1971).
107. А. С. Москвин, И. Г. Бострем, М. А. Сидоров, *ЖЭТФ* **104**, 2499 (1993) [*JETP* **77**, 127 (1993)].
108. H. B. Callen, *Phys. Rev.* **130**, 890 (1963).
109. К. С. Александров, Л. Н. Безматерных, Г. В. Козлов, С. П. Лебедев, А. А. Мухин, А. С. Прохоров, *ЖЭТФ* **92**, 1042 (1981) [*Sov. Phys. JETP* **65**, 591 (1981)].
110. А. Е. Егоян, А. А. Мухин, *ФТТ* **36**, 1715 (1994).
111. В. И. Ожогин, *Дисс... канд. физ.-мат. наук, Институт физических проблем, Москва* (1965).
112. А. С. Карначев, Ю. И. Клечин, Н. М. Ковтун и др., *ЖЭТФ* **78**, 1176 (1980) [*Sov. Phys. JETP* **51**, 592 (1980)].
113. A. S. Moskvin, N. S. Ovanesyan, and V. A. Trukhtanov, *Hyperfine Interact.* **3**, 429 (1977); **5**, 13 (1977).
114. А. И. Рокеах, А. С. Москвин, Н. В. Легких, Ю. А. Шерстков, *ЖЭТФ* **93**, 1789 (1987) [*Sov. Phys. JETP* **66**, 1021 (1987)].
115. W. J. Tabor, A. W. Anderson, and L. G. van Uitert, *J. Appl. Phys.* **41**, 3018 (1970).

116. М. В. Четкин, Ю. И. Щербаков, А. П. Воленко, Л. Д. Шевчук, ЖЭТФ **67**, 1027 (1974) [Sov. Phys. JETP **40**, 509 (1974)].
117. А. В. Зенков, В. В. Кричевцов, А. С. Москвин и др., ЖЭТФ **96**, 1397 (1989) [JETP **69**, 792 (1989)].
118. Yu. P. Gaydukov, A. V. Zenkov, S. V. Koptsik et al., JETP Lett. **51**, 228 (1990); G. S. Krinchik, A. S. Moskvin, E. A. Ganshina, S. V. Koptsik, A. Yu. Trifonov, and A. V. Zenkov, Advances in Magneto-Optics II, Proc. 2nd Int. Symp. Magneto-Optics, Fizika Nizkih Temperatur, **18**, Supplement, No..S1, 5 (1992); E. A. Ганьшина, А. В. Зенков, Г. С. Кринчик, А. С. Москвин, А. Ю. Трифонов, ФТТ **33**, 1122 (1991) [Sov. Phys. Solid State **33**, 637 (1991)]; E. A. Ганьшина, А. В. Зенков, Г. С. Кринчик, А. С. Москвин, М. М. Нишанова, ФТТ **34**, 3319 (1992) [Sov. Phys. Solid State **34**, 1776 (1992)]; A. S. Moskvin, A. V. Zenkov, E. A. Ganshina, G. S. Krinchik, and M. M. Nishanova, J. Phys. Chem. Sol. **54**, 101 (1993).
119. В. Е. Зубов, ФТТ **34**, 2098 (1992).
120. А. С. Москвин, Р. В. Писарев, ФНТ **36**, 613 (2010).
121. И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **37**, 881 (1960) [Sov. Phys. JETP **10**, 628 (1960)].
122. Д. Н. Астров, ЖЭТФ **38**, 984 (1960) (Sov. Phys. JETP **11**, 708 (1960)).
123. M. Fiebig, J. Phys. D: Appl. Phys. **38**, R123 (2005).
124. Y. Tanabe, T. Moriya, and S. Sugano, Phys. Rev. Lett. **15**, 1023 (1965).
125. V. V. Druzhinin and A. S. Moskvin, Sov. Phys. Solid State **11**, 1088 (1969).
126. S.-W. Cheong and M. Mostovoy, Nature Mater. **6**, 13 (2007).
127. A. S. Moskvin and S.-L. Drechsler, Europhys. Lett. **81**, 57004 (2008); Eur. Phys. J. B **71**, 331 (2009); A. S. Moskvin, Yu. D. Panov, and S.-L. Drechsler, Phys. Rev. B **79**, 104112 (2009); Yu. D. Panov, A. S. Moskvin, N. S. Fedorova, and S.-L. Drechsler, Ferroelectrics **442:1**, 27 (2013).
128. T. Kimura, N. Goto, H. Shintani, T. Arima, and Y. Tokura, Nature London **426**, 55 (2003); N. Hur, S. Park, P. A. Sharma, J. S. Ahn, S. Guha, and S.-W. Cheong, Nature London **429**, 392 (2004).
129. G. Lawes, A. B. Harris, T. Kimura, N. Rogado, R. J. Cava, A. Aharony, O. Entin-Wohlman, T. Yildirim, M. Kenzelman, C. Broholm, and A. P. Ramirez, Phys. Rev. Lett. **95**, 087205 (2005).
130. E. Bousquet and A. Cano, J. Phys.: Condens. Matter **28**, 123001 (2016).
131. Г. П. Воробьев, А. М. Кадомцева, З. А. Казей, М. М. Лукина, А. С. Москвин, Ю. Ф. Попов, Письма в ЖЭТФ **55**, 448 (1992) [JETP Lett. **55**, 459 (1992)].

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ СОЕДИНЕНИЙ FeAlO_3 И FeSiO_3

*Е. Д. Чернов, А. В. Лукоянов, В. И. Анисимов**

*Уральский федеральный университет
620002, Екатеринбург, Россия*

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

Поступила в редакцию 30 октября 2020 г.,
после переработки 30 октября 2020 г.
Принята к публикации 1 ноября 2020 г.

Изучаются свойства оксидных соединений железа FeAlO_3 и FeSiO_3 , которые встречаются в нижней мантии Земли. Выполнены расчеты электронной структуры соединений в рамках метода DFT+U на основе приближения обобщенной градиентной поправки с учетом электронных корреляций. Целью работы является исследование влияния электронных корреляций в $3d$ -оболочке ионов переходного металла железа на электронную структуру и магнитные свойства соединений FeAlO_3 и FeSiO_3 . Рассмотрено формирование ферро- и антиферромагнитного упорядочения магнитных моментов ионов железа в FeAlO_3 и FeSiO_3 . Проведен сравнительный анализ параметров электронной структуры и магнитных характеристик, выявлены основные характеристики, такие как величины энергетической щели, магнитных моментов ионов, на которые влияет учет электронных корреляций. Проведено сравнение полученных теоретических результатов с опубликованными в научной литературе предыдущими результатами теоретических работ и известными экспериментальными данными.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040052

1. ВВЕДЕНИЕ

Соединение $\text{Mg}_{1-x}\text{Fe}_x\text{SiO}_3$ (минерал бриджманит) в нижней части земной мантии характеризуется невысоким содержанием железа, по данным различных исследований $x = 0.1\text{--}0.2$ [1]. Высокотемпературные эксперименты показывают, что бриджманит с концентрацией железа 28 % стабилен при давлении 50 ГПа. Фазовая диаграмма [2] показывает стабильность соединения с содержанием железа 65 % при 88 ГПа и температуре 1000 °С, а также с содержанием железа 50 % при давлениях 85–108 ГПа и температуре 1800–2330 К. Данный минерал кристаллизуется в орторомбической искаженной структуре перовскита, за исключением самого нижнего тонкого слоя мантии, где он принимает структуру постперовскита. Понимание свойств бриджманита

осложнено не только искажениями структуры, но и изменениями химического состава, а также изменениями валентности ионов железа. Ионы магния в бриджманите Mg^{2+} занимают додэкаэдрические позиции A , а ионы кремния Si^{4+} занимают октаэдрические позиции B . Экспериментальные исследования содержащего алюминий бриджманита предполагают, что атомы алюминия появляются в решетке сразу в позициях A и B , замещая в них Mg и Si соответственно. Для замещения Mg на $\text{Fe}^{3+}(A)$ и кремния на $\text{Al}(B)$ наиболее энергетически выгодной является высокоспиновая конфигурация железа $S = 5/2$ во всем диапазоне условий нижней мантии Земли [3]. Нижняя мантия показана на схеме строения Земли на рис. 1.

Конечный член ряда железосодержащих соединений $(\text{Mg}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{SiO}_3$ для $x = 1$ — ферросилит FeSiO_3 , кристаллизуется в орторомбической $Pbca$ и двух моноклинных $P2_1/c$ и $C2/c$ структурах. Кристалл ортоферросилита FeSiO_3 возможно получить синтетически при давлениях 1.8–4.5 ГПа

* E-mail: via@imp.uran.ru

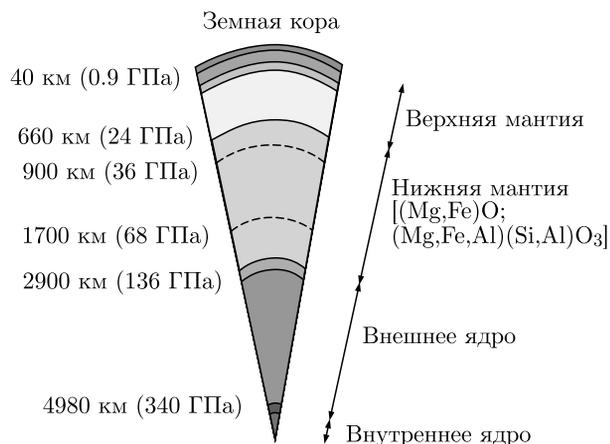


Рис. 1. (В цвете онлайн) Схема строения Земли

и температурах 1150–1400 °С. Имеющиеся теоретические исследования спиновых переходов в зависимости от давления в железосодержащем бриджманите [4], а также FeSiO_3 [5], проведенные в рамках теории функционала плотности (приближения LDA и GGA), дали довольно широкий диапазон давлений, необходимых для спинового перехода (77–1000 ГПа). Следует заметить, что значительная часть данного диапазона рассчитанных давлений переходов не характерна для нижней части мантии Земли (1000 ГПа и 284 ГПа [4, 5]). Теоретические исследования методом DFT+DMFT для моноклинной экспериментальной структуры, соответствующей высоким температурам и давлениям, предсказали наличие спинового перехода типа кроссовер ионов железа Fe^{2+} в диапазоне давлений 100–150 ГПа при 1200 К [6], а расчеты для более высоких температур предсказали недостижимость низкоспинового состояния в ионах железа Fe^{2+} , что согласуется с экспериментальными данными для Fe^{2+} бриджманита. Вместе с тем для соединений железа FeAlO_3 и FeSiO_3 имеется достаточно мало экспериментальных и теоретических данных об электронной структуре и магнитных свойствах.

2. МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Для проведения расчетов электронной структуры соединений FeAlO_3 и FeSiO_3 был использован пакет компьютерных программ Quantum Espresso [7]. В расчетах волновые функции были разложены по плоским волнам для стандартных ультрамягких псевдопотенциалов из библиотеки Quantum Espresso. Обменно-корреляционный потенциал брался в приближении обобщенной градиентной по-

Таблица 1. Координаты атомов соединения FeAlO_3 в единицах постоянной решетки

Тип атома	x	y	z
Fe1	0.185	0.1518	0.1533
Fe2	0.1731	0.4666	0.3688
Al1	0.1729	0.1528	0.5706
Al2	0.1845	0.84	0.3741
O1	0.4822	0.177	−0.0083
O2	0.0101	0.0089	0
O3	0.3419	−0.0019	0.2711
O4	0.3445	0.6629	0.2654
O5	0.3451	0.3317	0.2433
O6	0.0089	0.3273	0.5115

правки (GGA) версии Педью–Бурке–Эрнзенхофа (PBE) [8] и в методе DFT+U [9]. Интегрирование в обратном пространстве проводилось по сетке k -точек $8 \times 8 \times 8$. Для достижения нужной сходимости по полной энергии при самосогласовании был выбран энергетический предел cutoff для плоских волн 60Ry.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ ДЛЯ FeAlO_3

Соединение FeAlO_3 кристаллизуется в орторомбической $Pna2_1$ -структуре групп симметрии (номер 33 в списке кристаллографических групп). Параметры элементарной ячейки составляют $a = 4.984 \text{ \AA}$, $b = 8.554 \text{ \AA}$, $c = 9.241 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Координаты всех неэквивалентных атомов FeAlO_3 приведены в табл. 1. Координаты остальных атомов элементарной ячейки были получены путем учета симметрии соединения. Приведенные выше параметры решетки для соединения FeAlO_3 взяты из работы [10].

Графики полных и парциальных плотностей состояний (Density of states — DOS) представлены на рис. 2 в случае антиферромагнитного упорядочения. Для антиферромагнитного упорядочения магнитных моментов ионов Fe наблюдается перераспределение электронных плотностей. Плотности состояний для проекций спинов «вверх» и «вниз» очень близки. В зоне проводимости можно отметить на-

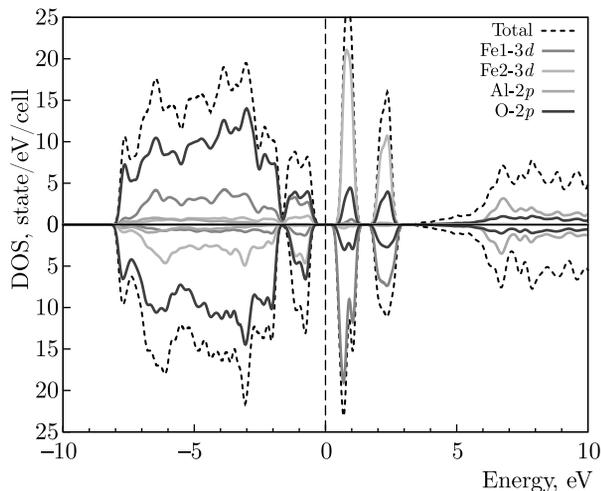


Рис. 2. (В цвете онлайн) Плотности электронных состояний FeAlO_3 в случае антиферромагнитного упорядочения магнитных моментов ионов Fe в приближении GGA. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

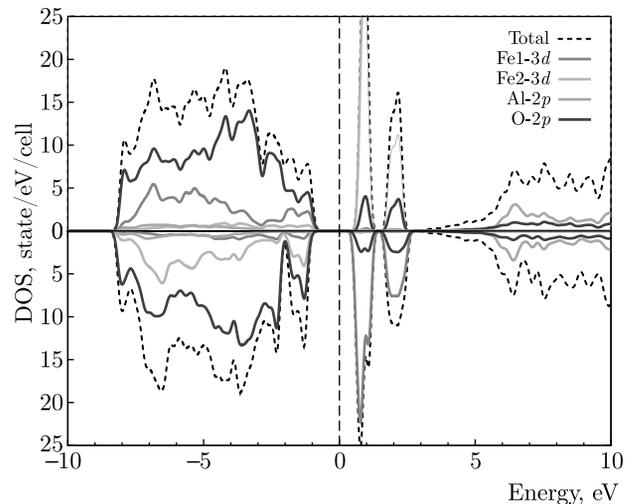


Рис. 3. (В цвете онлайн) Плотности состояний FeAlO_3 при $U = 1$ эВ и АФМ-упорядочении магнитных моментов ионов Fe. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

Таблица 2. Магнитные моменты отдельных ионов в соединении FeAlO_3 при ферромагнитном (ФМ) и антиферромагнитном (АФМ) упорядочении магнитных моментов ионов Fe в приближении GGA. Величины указаны в магнетонах Бора

Ионы	ФМ	АФМ
Fe1	3.70	3.49
Fe2	3.68	-3.46
Al	0	0
O	0.09-0.39	-0.06-0.07

личие структуры из двух максимумов, локализованных при 1 эВ и 2.5 эВ, пики в основном сформированы 3d-электронами Fe, но также мы видим, что непосредственное участие в формировании пиков принимают 2p-электроны O. Стоит отметить, что максимумы в проекции спина «вверх» имеют большую интенсивность. В общем случае плотности электронных состояний для разных проекций спина имеют одинаковый характер.

В табл. 2 приведены значения магнитных моментов для соединения FeAlO_3 . Магнитный момент кислорода имеет величину между -0.06 и $0.39 \mu_B$, величина магнитного момента для ионов алюминия составляет менее $0.01 \mu_B$. Кроме того, из-за гибридизации p-орбиталей кислорода с d-орбиталями же-

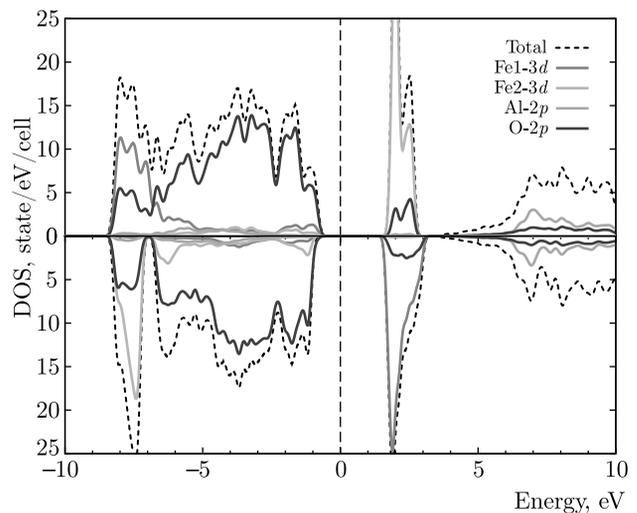


Рис. 4. (В цвете онлайн) Плотности состояний FeAlO_3 при $U = 4$ эВ и АФМ-упорядочении магнитных моментов ионов Fe. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

леза при изменении магнитного момента железа будет изменяться также магнитный момент кислорода. Полученные значения магнитных моментов для ионов O близки. Магнитные моменты ионов Fe достаточно близки. Но необходимо учесть сравнение полных энергий, которое приведено ниже и показало, что для FeAlO_3 более стабильным является антиферромагнитное упорядочение.

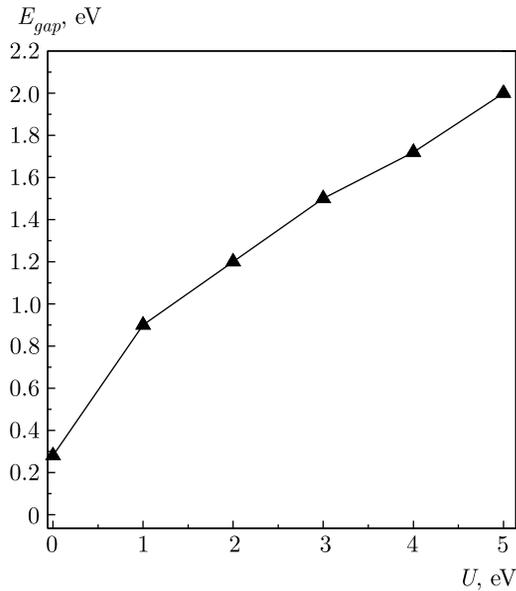


Рис. 5. Зависимость ширины энергетической щели соединения FeAlO_3 от параметра U в АФМ-случае

Как в случае расчетов при антиферромагнитном упорядочении магнитных моментов ионов Fe, видно, что электронная плотность состояний соединения FeAlO_3 характерна для диэлектрика с переносом заряда, данные представлены на рис. 3, 4. В случае $U = 1$ эВ (рис. 5) наблюдается значительное расширение энергетической щели и ее значение составляет 0.9 эВ. Перераспределение электронной плотности привело к исчезновению отдельного пика на краю валентной зоны в случае спина «вверх», к смещению двух максимумов в зоне проводимости по направлению друг к другу и их увеличению как для спина «вверх», так и для спина «вниз».

При увеличении параметра U в FeAlO_3 до 4 эВ наблюдается перераспределение плотности $3d$ -электронов Fe в сторону низких энергий валентной зоны. Наряду с перераспределением электронной плотности в валентной зоне, происходит перераспределение электронной плотности и в зоне проводимости, а именно, на ее краю два отдельных пика, образованные $3d$ -электронами Fe, начинают объединяться.

В ходе расчетов электронной структуры была обнаружена интересная особенность ионов Fe. Во всех расчетах электронной структуры FeAlO_3 электронная конфигурация ионов железа Fe^{2+} ($3d^6$), что видно по числу $d = 5.86$ электронов. Из полученных результатов, представленных на рис. 6 и 7, видно, что орбитали полностью заполнены состояниями с одной проекцией спина — «вверх». В случае

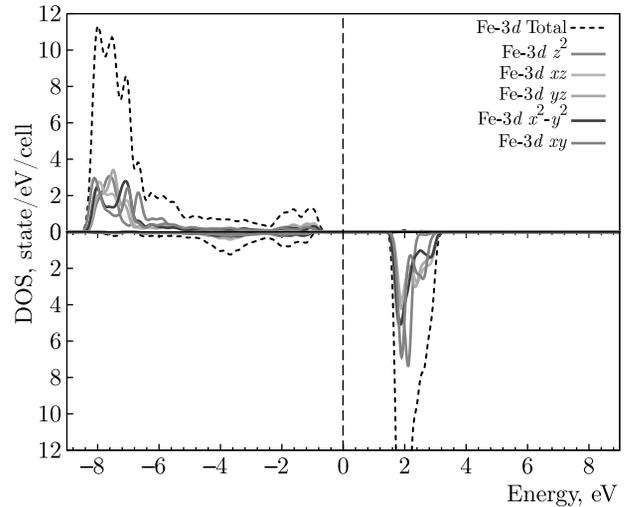


Рис. 6. (В цвете онлайн) Плотности состояний ионов железа Fe1 в соединении FeAlO_3 при $U = 4$ эВ и АФМ-упорядочении магнитных моментов ионов Fe. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

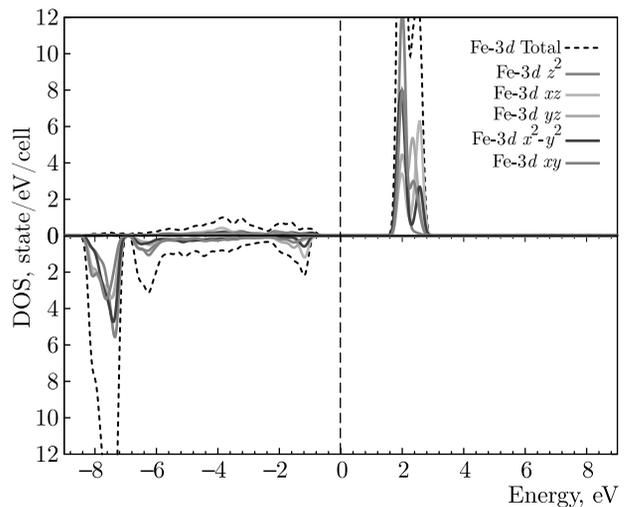


Рис. 7. (В цвете онлайн) Плотности состояний ионов железа Fe2 в соединении FeAlO_3 при $U = 4$ эВ и АФМ-упорядочении магнитных моментов ионов Fe. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

проекции спина «вверх» полная заселенность $3d$ -состояний иона Fe1 равна $4.96e$ (с орбитальными заселенностями 1.00, 0.99, 0.99, 0.99, 0.99e). Оставшиеся $0.84e$ в $3d$ -оболочке Fe1 заполняют состояния с проекцией спина «вниз», для всех $3d$ -орбиталей заселенности маленькие: 0.10, 0.20, 0.20, 0.17, 0.15e. Заселенности $3d$ -орбиталей иона Fe2 являются идентичными заселенностям $3d$ -орбиталей иона Fe1. Но

Таблица 3. Сравнение магнитных моментов отдельных ионов в соединении FeAlO₃ при $U = 1$ эВ при ФМ- и АФМ-упорядочениях. Величины указаны в магнетонах Бора

Ионы	ФМ	АФМ
Fe1	3.87	3.73
Fe2	3.84	-3.70
Al	0	0
O	0.09-0.39	-0.07-0.06

Таблица 4. Сравнение магнитных моментов отдельных ионов в соединении FeAlO₃ при $U = 4$ эВ при ФМ- и АФМ-упорядочениях. Величины указаны в магнетонах Бора

Ионы	ФМ	АФМ
Fe1	3.93	3.85
Fe2	3.91	-3.83
Al	0	0
O	0.07-0.33	-0.06-0.07

в силу АФМ-упорядочения заселенности для проекций спина «вверх» и «вниз» поменяются местами — заселенности для проекции спина «вниз» будут максимальными.

Значения магнитных моментов ионов в FeAlO₃, полученные в результате расчетов, представлены в табл. 3, 4. При сравнении полученных значений для ФМ- и АФМ-упорядочений видно, что в случае ФМ-упорядочения значения магнитных моментов ионов Fe больше, чем при АФМ-упорядочении, такая же тенденция наблюдается и для ионов O. Также для каждого из случаев упорядочения наблюдается тенденция увеличения магнитных моментов ионов Fe с увеличением параметра кулоновского взаимодействия. Для ионов O получился противоположный результат — в случае ФМ-упорядочения значения магнитных моментов уменьшаются, а в АФМ-случае остаются неизменными. Что касается ионов Al, то значения магнитных моментов также составляют менее чем $0.01\mu_B$ в ФМ- и АФМ-случаях упорядочения ионов Fe. Полученные результаты хорошо согласуются с результатами предыдущего расчета: $3.69\mu_B$ [11], а также с результатами эксперимента: $3.4 \pm 0.2\mu_B$ [10].

Таблица 5. Значения полных энергий для FeAlO₃ в АФМ- и ФМ-упорядочениях магнитных моментов ионов Fe и их разности

Тип магнитн. упорядочения	U , эВ	E , Ry	ΔE , Ry
АФМ	0	-2900.3378	0
	1.0	-2896.6972	0
	2.0	-2896.3899	0
	3.0	-2896.1226	0
	4.0	-2895.8658	0
ФМ	0	-2900.0874	0.2504
	1.0	-2896.5299	0.1673
	2.0	-2896.2465	0.1434
	3.0	-2895.9967	0.1259
	4.0	-2895.7548	0.1110

В табл. 5 представлено сравнение полных энергий между ФМ- и АФМ-упорядочениями. Из полученных результатов видно, что более энергетически выгодным является АФМ-упорядочение.

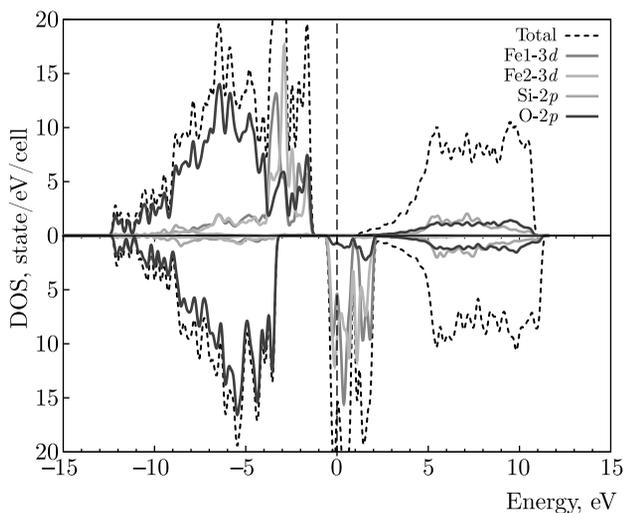
4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ ДЛЯ FeSiO₃

Соединение FeSiO₃ в данной работе будем рассматривать в низкотемпературной моноклинной фазе $P2_1/c$ (номер 14 в списке кристаллографических групп). Параметры элементарной ячейки составляют: $a = 9.485 \text{ \AA}$, $b = 9.081 \text{ \AA}$, $c = 5.235 \text{ \AA}$, $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta = 103.207^\circ$. Координаты всех неэквивалентных атомов FeSiO₃ приведены в табл. 6. Координаты остальных атомов элементарной ячейки были получены путем учета симметрии соединения. Ячейка содержит 8 атомов железа (4 первого типа Fe1 и 4 второго типа Fe2), 8 атомов кремния (4 первого типа Si1 и 4 второго типа Si2) и 24 атома кислорода. Атом Fe первого типа имеет окружение из шести атомов O в форме октаэдра, второго типа — тетраэдра из O. Атомы Si обоих типов имеют окружение из четырех атомов O в форме тетраэдра. Приведенные выше конфигурации решетки для соединения FeSiO₃ были взяты из статьи [12].

Графики полных и парциальных плотностей состояний представлены на рис. 8 в случае ферромагнитного упорядочения в соединении FeSiO₃. В случае ферромагнитного упорядочения магнитных моментов ионов Fe для спина «вверх» уровень Ферми

Таблица 6. Координаты атомов соединения FeSiO_3 (в единицах постоянной решетки)

Тип атома	x	y	z
Fe1	0.7512	0.3462	0.025
Fe2	0.2744	0.4855	0.4983
Si1	0.4546	0.3384	0.2461
Si2	0.0531	0.1666	0.31
O1	0.629	0.338	0.307
O2	0.121	0.663	0.258
O3	0.375	0.496	0.21
O4	0.133	0.019	0.246
O5	0.394	0.234	-0.009
O6	0.108	0.298	0.138

**Рис. 8.** (В цвете онлайн) Плотности состояний FeSiO_3 в случае ФМ-упорядочения магнитных моментов ионов Fe в приближении GGA. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

расположен в энергетической щели, ширина которой составляет 1.5 эВ. В валентной зоне наблюдается пик плотности электронных состояний. Как видно из графика, основной вклад в верхнюю часть валентной зоны вносят $3d$ -электроны Fe. В случае спина «вниз», напротив, пик электронных состояний, который находится в зоне проводимости, приходится на уровень Ферми. Основной вклад в него вносят

Таблица 7. Сравнение магнитных моментов отдельных ионов в соединении FeSiO_3 в ФМ- и АФМ-упорядочениях магнитных моментов ионов Fe в приближении GGA. Величины указаны в магнетонах Бора

Ионы	ФМ	АФМ
Fe1	3.47	3.42
Fe2	3.23	-3.20
Si	0	0
O	0.02–0.11	-0.02–0.05

$3d$ -электроны Fe. Стоит заметить, что пик находится в зоне проводимости, а это значит, что соединение способно пропускать ток, но только с одной проекцией — «вниз». Из этого следует, что соединение является полуметаллом.

В табл. 7 приведены значения магнитных моментов для соединения FeSiO_3 . Как и в случае с FeAlO_3 , можно ожидать, что магнитный момент кислорода будет иметь значение между 0.02 и 0.11 магнетонов Бора. Для ионов кремния величина магнитного момента составляет менее $0.01 \mu_B$. Значения магнитных моментов ионов Fe в случае ферромагнитного и антиферромагнитного упорядочений близки между собой. Но необходимо учесть полные энергии, приведенные для сравнения в табл. 10. Сравнение показало, что для FeSiO_3 более стабильным является ФМ-упорядочение. Таким образом, для магнитных упорядочений с минимальной полной энергией, которые соответствуют основному состоянию в соединениях FeAlO_3 и FeSiO_3 , величины магнитных моментов достаточно близки.

В расчетах для соединения FeSiO_3 с учетом электронных корреляций в случае ферромагнитного упорядочения ионов Fe при разных параметрах U были получены различные характеры электронных плотностей. На рис. 9 для $U = 1$ эВ видно, что соединение FeSiO_3 проявляет свойства полуметалла и может пропускать ток только с проекцией спина «вниз». На краю зоны проводимости мы можем наблюдать два максимума, образованные $3d$ -электронами Fe, один из которых находится на уровне Ферми, другой — в интервале 0.5–2.5 эВ.

В дальнейшем при увеличении параметра кулоновского взаимодействия до 4 эВ (рис. 10) происходит раздвижка электронных состояний на уровне Ферми, в результате чего образуется энергетическая

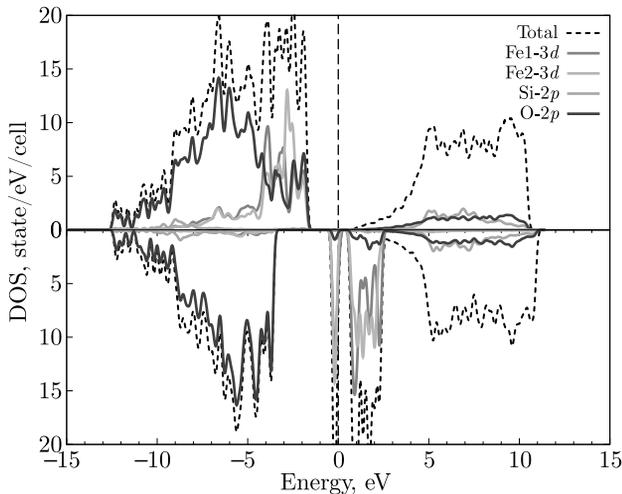


Рис. 9. (В цвете онлайн) Плотности состояний FeSiO₃ при $U = 1$ эВ и ФМ-упорядочении магнитных моментов ионов Fe. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

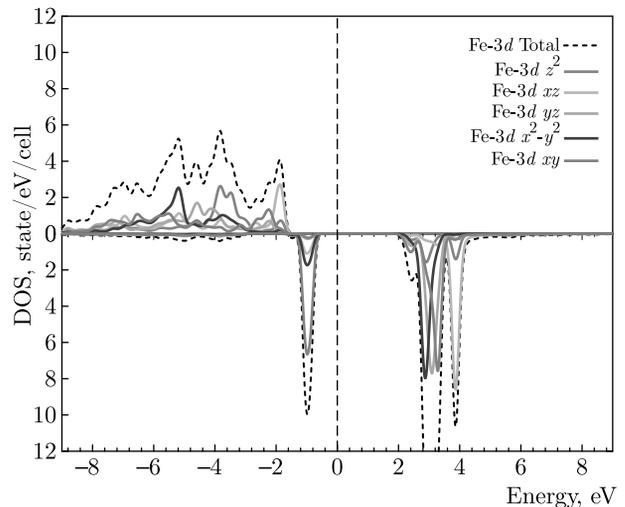


Рис. 11. (В цвете онлайн) Плотности состояний ионов железа Fe1 в соединении FeSiO₃ при $U = 4$ эВ и ФМ-упорядочении магнитных моментов ионов Fe. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

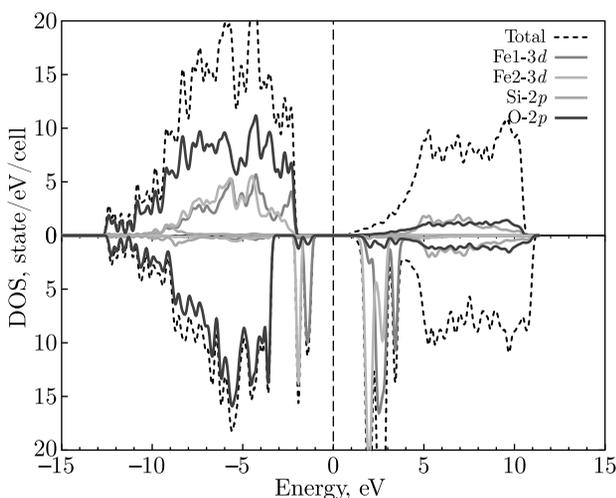


Рис. 10. (В цвете онлайн) Плотности состояний FeSiO₃ при $U = 4$ эВ и ФМ-упорядочении магнитных моментов ионов Fe. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

щель, и соединение начинает проявлять свойства изолятора.

Рассмотрим результаты расчетов в случае ферромагнитного упорядочения магнитных моментов ионов Fe в FeSiO₃, представленные на рис. 9, 10. На нижних частях графиков, соответствующих проекции спина «вниз», есть два максимума, которые образованы $3d$ -электронами Fe1 и Fe2. Максимум, образованный $3d$ -электронами Fe1, находится на краю валентной зоны, а максимум, образованный

$3d$ -электронами Fe2, — на краю зоны проводимости. Стоит заметить, что в случае проекции спина «вверх» максимумы находятся вблизи уровня Ферми, но на самом уровне находится энергетическая щель.

В случае расчетов для FeSiO₃ электронная конфигурация ионов железа такая же, как и в соединении FeAlO₃, но из-за более низкой симметрии моноклинной структуры вырождение уровней снимается, поэтому один электрон в проекции вниз садится полностью на одну орбиталь, хорошо отделенную еще в РВЕ-расчетах из-за моноклинной структуры. И остальные орбитали выше и ниже по энергии тоже хорошо отделены, что мы и видим на рис. 11 и 12. В случае проекции спина «вверх» полная заселенность $3d$ -состояний иона Fe1 равна $4.98e$ (с орбитальными заселенностями 1.00, 0.99, 1.00, 1.00, 0.99 e). Оставшиеся $1.21e$ в $3d$ -оболочке Fe1 заполняют состояния с проекцией спина «вниз», главным образом относящиеся к $3d_{z^2}$ -орбитали иона Fe1 с заселенностью $0.68e$, для остальных $3d$ -орбиталей заселенности маленькие: 0.17, 0.07, 0.20, 0.09 e . Заселенности $3d$ -состояний иона Fe2 полностью идентичны заселенностям $3d$ -состояний иона Fe1. С одинаковыми спиновыми направлениями в случае ФМ-упорядочения и противоположными в случае АФМ-упорядочения.

Значения магнитных моментов, полученные в результате расчетов, представлены в табл. 8, 9. При сравнении полученных значений для ФМ- и АФМ-упорядочений видно, что в случае ФМ-упо-

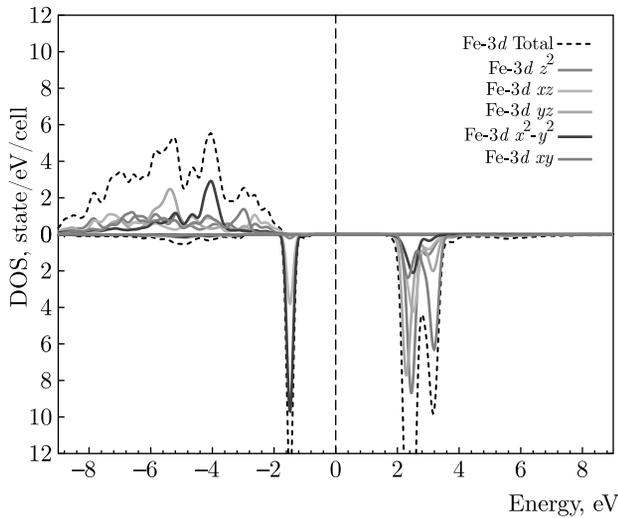


Рис. 12. (В цвете онлайн) Плотности состояний ионов железа Fe2 в соединении FeSiO₃ при U = 4 эВ и ФМ-упорядочении магнитных моментов ионов Fe. График смещен относительно уровня Ферми (вертикальная штриховая линия)

Таблица 8. Сравнение магнитных моментов ионов в соединении FeSiO₃ при U = 1 эВ при ФМ- и АФМ-упорядочениях. Величины указаны в магнетонах Бора

Ионы	ФМ	АФМ
Fe1	3.54	3.45
Fe2	3.29	-3.33
Si	0	0
O	0.01-0.07	-0.01-0.02

Таблица 9. Сравнение магнитных моментов ионов в соединении FeSiO₃ при U = 4 эВ при ФМ- и АФМ-упорядочениях. Величины указаны в магнетонах Бора

Ионы	ФМ	АФМ
Fe1	3.50	3.49
Fe2	3.38	-3.38
Si	0	0
O	0.01-0.04	-0.01-0.01

Таблица 10. Сравнение полных энергий для FeSiO₃ для ФМ- и АФМ-упорядочений магнитных моментов ионов Fe

Тип магнитн. упорядочения	U, эВ	E, Ry	ΔE, Ry
ФМ	0	-2876.8092	0
	1.0	-2873.1691	0
	2.0	-2872.9778	0
	3.0	-2872.8857	0
	4.0	-2872.7702	0
АФМ	0	-2876.7595	0.0497
	1.0	-2873.1517	0.0174
	2.0	-2873.0046	0.0268
	3.0	-2872.8821	0.0036
	4.0	-2872.7587	0.0115

рядочения значения магнитных моментов ионов Fe больше, чем при АФМ-упорядочении, такая же тенденция наблюдается и для ионов O, для ионов Si значения магнитных моментов составили менее 0.07μ_B. По мере увеличения параметра кулоновского взаимодействия магнитные моменты в ФМ-случае остаются практически неизменными и составляют порядка 3.5μ_B. При АФМ-упорядочении, наоборот, величина магнитного момента ионов Fe увеличивается и стремится к значениям, близким к значениям в случае ФМ-упорядочения.

В табл. 10 представлено сравнение полных энергий в случаях ФМ- и АФМ-упорядочений для FeSiO₃. Из полученных результатов видно, что более энергетически выгодным является ФМ-упорядочение, хотя выигрыш в энергии составляет порядка сотых, а при U = 3 эВ — тысячных. Видно, что при увеличении параметра кулоновского взаимодействия будет увеличиваться значение полной энергии. Полученные результаты хорошо согласуются с результатами предыдущего расчета: 3.8 ± 0.1μ_B [6], а также с результатами эксперимента: 4.0 ± 0.1μ_B [13].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе были выполнены расчеты электронной структуры оксидных соединений железа FeAlO₃ и FeSiO₃, которые встречаются в нижней мантии Земли. Расчеты проведены в

рамках приближения обобщенной градиентной поправки, а также при помощи метода DFT+U с учетом электронных корреляций. Рассмотрено формирование ферро- и антиферромагнитного упорядочения магнитных моментов ионов железа в FeAlO_3 и FeSiO_3 . Обнаружено, что в FeAlO_3 и FeSiO_3 при увеличении параметра U открывается энергетическая щель. В отличие от FeAlO_3 , где энергетическая щель присутствует уже в расчетах GGA для антиферромагнитного упорядочения магнитных моментов ионов Fe, в соединении FeSiO_3 энергетическая щель открывается при достаточно больших значениях параметра U . При увеличении параметра кулоновского взаимодействия U для FeAlO_3 как в случае ФМ-, так и в случае АФМ-упорядочения, энергетическая щель увеличивается пропорционально параметру U . В результате расчетов были получены значения магнитных моментов Fe для соединений FeAlO_3 и FeSiO_3 . Для расчетов с учетом электронных корреляций наблюдается тенденция увеличения магнитного момента Fe при увеличении параметра U . Сравнение полных энергий для каждого из соединений показало, что самым энергетически выгодным состоянием для FeAlO_3 является АФМ-упорядочение магнитных моментов Fe, а для FeSiO_3 — ФМ-упорядочение магнитных моментов Fe в соответствии с экспериментальными данными.

Финансирование. Результаты исследований, представленные в разд. 3, получены при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научных проектов №№ 19-52-18008, 20-02-00234. Результаты исследований, представленные в разд. 4, получены в рамках государственного задания Министерства образования и науки России (тема «Электрон», № АААА-А18-118020190098-5).

ЛИТЕРАТУРА

1. Z. Mao, F. Wang, J.-F. Lin, S. Fu, J. Yang, X. Wu, T. Okuchi, N. Tomioka, V. B. Prakapenka, Y. Xiao, and P. Chow, *Amer. Mineralogist* **102**, 357 (2017).
2. R. Jeanloz and A. B. Thompson, *Rev. Geophys.* **21**, 51 (1983).
3. H. Hsu, Y. G. Yu, and R. M. Wentzcovitch, *Earth Planet. Sci. Lett.* **359**, 34 (2012).
4. S. Stackhouse, J. P. Brodholt, and G. D. Price, *Earth Planet. Sci. Lett.* **253**, 282 (2007).
5. R. E. Cohen, I. I. Mazin, and D. G. Isaak, *Science* **275**, 654 (1997).
6. A. A. Dyachenko, A. O. Shorikov, A. V. Lukoyanov, and V. I. Anisimov, *Phys. Rev. B* **93**, 245121 (2016).
7. P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 465901 (2017).
8. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
9. V. I. Anisimov, F. Aryasetiawan, and A. I. Lichtenstein, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 767 (1997).
10. F. Bouree, J. L. Baudour, E. Elbadraoui, J. Musso, C. Laurent, and A. Rousset, *Acta Crystallogr. Sec. B Struct. Sci.* **52**, 217 (1996).
11. R. Caracas, *Phys. Earth Planet. Interiors* **182**, 10 (2010).
12. D. A. H. Jones, A. B. Woodland, and R. J. Angel, *Amer. Mineralogist* **79**, 1032 (1994).
13. S. G. Eeckhout, E. de Grave, A. Lougear, M. Gerdan, C. A. McCammon, A. X. Trautwein, and R. Vochten, *Amer. Mineralogist* **86**, 957 (2010).

ПЬЕЗОМАГНЕТИЗМ В ФЕРРОМАГНИТНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

*В. П. Минеев**

*Université Grenoble Alpes, CEA, IRIG, PHELIQS
F-38000, Grenoble, France*

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

Поступила в редакцию 18 ноября 2020 г.,
после переработки 18 ноября 2020 г.
Принята к публикации 19 ноября 2020 г.

Появление намагниченности при приложении механического напряжения и создание упругой деформации при наложении магнитного поля — два фундаментальных свойства пьезомагнитных материалов. Симметрия сверхпроводящих ферромагнетиков UGe_2 , $URhGe$, $UCoGe$ допускает пьезомагнетизм. В дополнение к обычным пьезомагнитным свойствам, имеющим место как в нормальном, так и в сверхпроводящем состоянии, сверхпроводящее состояние этих пьезомагнетиков имеет свою специфику. В отличие от обычных сверхпроводников, в урановых ферромагнетиках критическая температура перехода в сверхпроводящее состояние меняет свою величину при изменении направления поля на противоположное.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040064

Пьезомагнетизм — это появление намагниченности кристалла при приложении механического напряжения. Другое проявление этого же свойства — возникновение деформации кристалла, линейной по наложенному на кристалл магнитному полю [1]. Пьезомагнетизм возможен в магнитных материалах, симметрия которых (магнитный класс) содержит операцию обращения времени лишь в комбинациях с поворотами или отражениями или не содержит эту операцию вовсе [2]. Первые примеры таких веществ были указаны И. Е. Дзялошинским [3]. Вскоре после этого пьезомагнетизм был открыт в антиферромагнитных флюоридах кобальта и марганца [4]. Более поздние исследования этого явления и ссылки можно найти в работе [5].

Операция обращения времени в сочетании с поворотами встречается не только в магнитных классах антиферромагнитных материалов. Такая симметрия имеет место, например, в ферромагнитных кристаллах с орторомбической структурой и силь-

ным спин-орбитальным взаимодействием, фиксирующим направление спонтанной намагниченности вдоль одной из осей второго порядка, скажем, вдоль направления z . Группа симметрии такого кристалла состоит из вращения на угол π вокруг оси z и вращений на угол π вокруг осей x и y в сочетании с операцией обращения времени R , изменяющей направление спонтанной намагниченности на противоположное, а также операций инверсии I , отражения σ_h в плоскости, перпендикулярной оси z , и отражений σ_x , σ_y в плоскостях, перпендикулярных осям x и y , в сочетании с операцией R :

$$D_{2h}(D_2) = (E, C_2^z, RC_2^x, RC_2^y, I, \sigma_h, R\sigma_x, R\sigma_y). \quad (1)$$

Это группа точечной симметрии ферромагнитных соединений урана UGe_2 , $URhGe$ и $UCoGe$, интенсивно изучавшихся в течение двух последних десятилетий (см. недавние обзоры [6, 7]). Здесь следует уточнить, что в работе [7] в качестве точечной группы ферромагнитного состояния данных веществ была неверно указана группа

$$D_2(C_2) = (E, C_2^z, RC_2^x, RC_2^y),$$

* E-mail: vladimir.mineev@cea.fr

являющаяся подгруппой группы $D_{2h}(D_2)$ Однако это не приводит к модификациям теории сверхпроводящих состояний, развитой в работе [7]. Дело в том, что параметры порядка сверхпроводящих состояний, соответствующие неприводимым и неэквивалентным копредставлениям A и B группы $D_{2h}(D_2)$, задаются теми же формулами, что и для группы $D_2(C_2)$ (см. уравнения (6) и (7) в работе [7]).

Инвариантный по отношению к преобразованиям группы (1) термодинамический потенциал, линейный по магнитному полю и компонентам тензора напряжений, имеет вид

$$\Phi = -\lambda_x \sigma_{xz} H_x - \lambda_y \sigma_{yz} H_y - (\lambda_{z1} \sigma_{xx} + \lambda_{z2} \sigma_{yy} + \lambda_{z3} \sigma_{zz}) H_z. \quad (2)$$

При приложении к кристаллу механических напряжений, направленных вдоль осей орторомбической симметрии, кристалл приобретает дополнительную намагниченность

$$M_z = -\frac{\partial \Phi}{\partial H_z} = (\lambda_{z1} \sigma_{xx} + \lambda_{z2} \sigma_{yy} + \lambda_{z3} \sigma_{zz}), \quad (3)$$

что вызывает увеличение доли объема ферромагнитных доменов, намагниченность которых параллельна намагниченности, индуцированной сжатием кристалла.

Поперечные компоненты намагниченности возникают при приложении к кристаллу скручивающих напряжений:

$$M_x = -\frac{\partial \Phi}{\partial H_x} = \lambda_x \sigma_{xz}, \quad M_y = -\frac{\partial \Phi}{\partial H_y} = \lambda_y \sigma_{yz}. \quad (4)$$

Наложение магнитного поля вдоль направления z вызывает появление продольных деформаций

$$u_{xx} = -\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{xx}} = \lambda_{z1} H_z, \quad (5)$$

$$u_{yy} = -\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{yy}} = \lambda_{z2} H_z, \quad (6)$$

$$u_{zz} = -\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{zz}} = \lambda_{z3} H_z, \quad (7)$$

а вдоль направлений x и y — деформаций кручения

$$u_{xz} = -\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{xz}} = \lambda_x H_x, \quad u_{yz} = -\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{yz}} = \lambda_y H_y. \quad (8)$$

Перечисленные свойства ферромагнитных кристаллов UGe_2 , $URhGe$ и $UCoGe$ аналогичны свойствам других пьезомагнетиков. С понижением температуры эти вещества переходят в сверхпроводя-

щее состояние, обладающее специфическими пьезомагнитными свойствами. Формирование сверхпроводящего состояния в данных ферромагнитных металлах происходит по крайней мере в двух зонах проводимости, расщепленных обменным взаимодействием, и описывается многокомпонентным параметром порядка [7–9]. Чтобы не перегружать изложение соответствующими громоздкими вычислениями, мы продемонстрируем проявление пьезомагнетизма в сверхпроводящем состоянии, используя простейшую однокомпонентную модель сверхпроводимости.

Рассмотрим фазовый переход в сверхпроводящее состояние в магнитном поле \mathbf{H} , лежащем в плоскости xz . В достаточно больших магнитных полях можно пренебречь действующим на заряды электронов внутренним полем, вызванным спонтанной намагниченностью, и рассматривать кристалл как однодоменный. Функционал свободной энергии, квадратичный по параметру порядка сверхпроводника η , имеет вид

$$F = \int dV \left\{ \alpha |\eta|^2 + \tilde{K}_x D_x \eta (D_x \eta)^* + \tilde{K}_y D_y \eta (D_y \eta)^* + \tilde{K}_z D_z \eta (D_z \eta)^* + \frac{1}{2} \lambda H_x [D_x \eta (D_z \eta)^* + D_z \eta (D_x \eta)^*] \right\}, \quad (9)$$

Здесь

$$\tilde{K}_i = K_i + \lambda_i H_z, \quad i = x, y, z. \quad (10)$$

Компоненты вектора $\mathbf{D} = -i\nabla + (2\pi/\phi_0)\mathbf{A}$ — операторы «длинных» производных, $\phi_0 = \pi \hbar c/e$ — квант магнитного потока и компоненты вектор-потенциала $A_x = -H_z y$, $A_y = 0$, $A_z = H_x y$. Все члены этого функционала инвариантны по отношению к преобразованиям группы (1).

Выражение для коэффициента $\alpha = \alpha_0(T - T_{c0})$ включает «критическую температуру» T_{c0} , определяемую спаривающим взаимодействием. Спаривающее взаимодействие в урановых ферромагнетиках зависит от магнитного поля, и величина T_{c0} зависит от магнитного поля [7]. Будучи зависимой от величины и направления поля, «критическая температура» T_{c0} не меняется при замене направления поля на противоположное:

$$T_{c0}(\mathbf{H}) = T_{c0}(-\mathbf{H}). \quad (11)$$

Настоящая же критическая температура перехода в сверхпроводящее состояние в магнитном поле определяется как зависимостью от поля величины T_{c0} так и орбитальным эффектом, к рассмотрению которого мы и переходим.

Соответствующее функционалу (9) уравнение Гинзбурга – Ландау есть

$$\begin{aligned} \alpha\eta - \tilde{K}_x \left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{2\pi i}{\phi_0} H_z y \right)^2 \eta - \\ - \tilde{K}_y \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} - \tilde{K}_z \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{2\pi i}{\phi_0} H_x y \right)^2 \eta - \\ - \lambda H_x \left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{2\pi i}{\phi_0} H_z y \right) \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{2\pi i}{\phi_0} H_x y \right) \eta = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Решение этого уравнения можно искать в виде

$$\eta(x, y, z) = \exp(iq_x x + iq_z z) \psi(y). \quad (13)$$

Для определения верхнего критического поля достаточно рассмотреть решение при $q_x = q_z = 0$. В этом случае функция $\psi(y)$ находится из уравнения

$$\alpha\psi + \left(\frac{2\pi F}{\phi_0 \tilde{K}_y} \right)^2 y^2 \psi - \tilde{K}_y \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = 0, \quad (14)$$

где

$$\begin{aligned} F = F(\mathbf{H}) = \\ = \left\{ \tilde{K}_y \left[\tilde{K}_x H_z^2 + \tilde{K}_z H_x^2 - \lambda H_z H_x^2 \right] \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (15)$$

Функция

$$\psi(y) = \exp \left(- \frac{\pi F}{\phi_0 \tilde{K}_y} y^2 \right) \quad (16)$$

есть решение уравнения (14) при условии выполнения соотношения

$$F(\mathbf{H}) = - \frac{\phi_0}{2\pi} \alpha, \quad (17)$$

которое также можно переписать, как уравнение для зависимости температуры перехода в сверхпроводящее состояние от магнитного поля:

$$\begin{aligned} T_c(\mathbf{H}) = T_{c0}(\mathbf{H}) - \frac{2\pi}{\phi_0 \alpha_0} \times \\ \times \left\{ \tilde{K}_y \left[\tilde{K}_x H_z^2 + \tilde{K}_z H_x^2 - \lambda H_z H_x^2 \right] \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (18)$$

Откуда видно, что за исключением направления поля вдоль оси x критическая температура меняет величину при замене направления поля на противоположное,

$$T_c(\mathbf{H}) \neq T_c(-\mathbf{H}). \quad (19)$$

Таким образом, в работе показано, что в ферромагнитных кристаллах UGe_2 , $URhGe$ и $UCoGe$ во внешнем магнитном поле возникают деформации (5)–(8), прямо пропорциональные величине поля, а в отсутствие поля намагниченность кристаллов может быть индуцирована приложением механического напряжения (3), (4). В отличие от обычных сверхпроводников, в урановых ферромагнетиках температура перехода в сверхпроводящее состояние в магнитном поле (18) меняется при замене направления внешнего поля на противоположное.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Физматлит, Москва (2016) [L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media*, Pergamon Press, Oxford (1984)].
2. Б. А. Тавгер, В. М. Зайцев, ЖЭТФ **30**, 564 (1956) [Sov. Phys. JETP **3**, 430 (1956)].
3. И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **33**, 807 (1957) [Sov. Phys. JETP **6**, 621 (1958)].
4. А. С. Боровик-Романов, ЖЭТФ **36**, 1954 (1959) [Sov. Phys. JETP **11**, 786 (1960)].
5. M. Jaime, A. Saul, M. Salamon, V. S. Zapf, N. Harrison, T. Durakiewicz, J. C. Lashley, D. A. Andersson, C. R. Stanek, J. L. Smith, and K. Gofryk, *Nature Comm.* **8**, 99 (2017).
6. D. Aoki, K. Ishida, and J. Flouquet, *J. Phys. Soc. Jpn.* **88**, 022001 (2019).
7. В. П. Минеев, УФН **187**, 129 (2017) [Phys.-Usp. **60**, 121 (2017)].
8. V. P. Mineev, *Физика низких температур [Low Temperature Physics]* **44**, 663 (2018).
9. V. P. Mineev, *Ann. Phys. (NY)* **417**, 168139 (2020).

АНИЗОТРОПИЯ МАГНИТНЫХ ФАЗ КУБИЧЕСКИХ ГЕЛИМАГНЕТИКОВ

*В. А. Чижиков**

*Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук
119333, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 20 ноября 2020 г.,
после переработки 20 ноября 2020 г.
Принята к публикации 3 декабря 2020 г.

Магнитные фазы кубических хиральных ферромагнетиков с взаимодействием Дзялошинского–Мория (MnSi , Cu_2OSeO_3) исследуются в рамках микроскопического и феноменологического подходов. Показано, что взаимодействие магнитных моментов атомов с локальным кристаллическим полем приводит к возникновению кубического анизотропного члена в энергии Ландау–Лифшица вида $M_x^4 + M_y^4 + M_z^4$ (M — поле намагниченности). Этот член отвечает за существование геликоидальной фазы при близком к нулю магнитном поле, а в более высоких полях может вносить вклад в устойчивость магнитной фазы A . Проведено моделирование фазы A при разных магнитных полях. Показано, что при включении магнитного поля спирали в геликоидальной фазе приобретают эллиптическую и коническую составляющие.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040076

1. ВВЕДЕНИЕ

Спиральный порядок в природе возникает в очень непохожих друг на друга системах, от физики конденсированного состояния до биологии [1], и служит важным примером примитивной самоорганизации. Эта самоорганизация может создавать довольно сложные структуры, такие как голубые фазы в холестерических жидких кристаллах [2, 3] или скирмионные текстуры в хиральных кубических магнетиках (MnSi , MnGe , $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, Cu_2OSeO_3 и др.) [4–9]. При этом в физике столь различных систем наблюдается замечательное сходство [10–12]. Тем не менее в каждом отдельном случае за возникновение макроскопической спирали ответственны свои собственные микроскопические механизмы, и требуется приложить немалые усилия для их отыскания. В частности, необходимо установить взаимосвязь между параметрами локальных взаимодействий в системе и ее конечной структурой. Например, первый вопрос — что определяет период и направление спиралей? С другой стороны, описание микроскопи-

ческой спиновой структуры важно как для приложений (спинтроника, мультиферройки [13–15]), так и для фундаментальных проблем, таких как топологический эффект Холла [16].

Начиная с открытия хиральных магнитных свойств MnSi в 1976 г. [17, 18] по сегодняшний день наиболее часто используемым методом описания и предсказания закрученных магнитных структур остается феноменологическая теория, основанная на свободной энергии Ландау–Лифшица с добавочным членом, впервые предложенным Дзялошинским [19, 20]. Однако данный подход, в котором используются наши знания о симметрии физической системы, ничего не может сказать о значениях входящих в свободную энергию коэффициентов и о том, как они связаны с реальными межатомными взаимодействиями.

Микроскопические теории, такие как модель классического гейзенберговского ферромагнетика со спин-орбитальным членом, изначально разработанная Мория [21, 22], в свою очередь обладают тем недостатком, что количество переменных, включающее спины всех магнитных атомов, бесконечно, и поэтому эти модели сложно использовать в любых аналитических расчетах. Тем не менее, несмотря на некоторые сомнения в справедливости модели Гей-

* E-mail: chizhikov@crys.ras.ru

зенберга для зонных магнетиков, она часто используется для численного моделирования [12, 23–25]. Для этой модели необходимо знать параметры межспиновых взаимодействий: константы J_{ij} изотропного обмена между i -м и j -м атомами и (псевдо)векторы \mathbf{D}_{ij} антисимметричного обмена Дзялошинского – Мория. Эти параметры можно получить двумя способами: из сравнения теоретических результатов с экспериментальными данными и посредством вычислений *ab initio* [26, 27].

Два этих подхода, микроскопический и феноменологический, на протяжении многих лет использовались для описания одних и тех же магнитных структур, хорошо дополняя друг друга. Тем не менее осуществить корректный переход от одной модели к другой долго не удавалось даже для такого простого случая, как MnSi. Здесь переход, в частности, подразумевает выражение констант, входящих в энергию Ландау – Лифшица континуальной модели, через параметры J_{ij} , \mathbf{D}_{ij} гейзенберговской модели. Обратный переход, очевидно, неоднозначен в силу большого числа микроскопических параметров. В работах [28, 29] такой переход был впервые осуществлен для кристаллов MnSi в приближении взаимодействия ближайших соседей. Важным побочным результатом этой работы стало предсказание и описание антиферромагнитных спиновых скосов, которые являются неотъемлемой особенностью магнитной структуры закрученных ферромагнетиков, влияющей на волновое число k спиновых спиралей. Далее подход был сначала расширен за счет учета взаимодействий со следующими соседями в MnSi [30] и, наконец, обобщен на случай других кубических гелимагнетиков, включая Cu_2OSeO_3 [31]. Для мультиферроика Cu_2OSeO_3 спиновые скосы играют дополнительную важную роль, осуществляя связь магнитной структуры с электрической поляризацией [32].

Однако программа объединения микроскопического и феноменологического описаний кубических хиральных ферромагнетиков пока остается не вполне завершенной. Хотя высокая симметрия кристаллической решетки и позволяет в отдельных случаях полагать магнитные свойства системы изотропными, слабая кубическая анизотропия может проявлять себя, например, в ориентации магнитной структуры относительно кристаллических осей. Анизотропные члены вносят меньший вклад в энергию Ландау – Лифшица, чем взаимодействие Дзялошинского – Мория, тем не менее именно они отвечают за существование геликоидальной фазы в слабом магнитном поле. В данной работе

будет показано, как микроскопические причины, в частности взаимодействие спинов с локальным кристаллическим полем, могут вызывать появление анизотропных членов в энергии. Также будут рассмотрены некоторые следствия анизотропии, в том числе ориентация спиралей в геликоидальной фазе, преимущественные направления намагничивания конической фазы и вклад анизотропии в устойчивость фазы A кубических гелимагнетиков.

2. КУБИЧЕСКИЕ ХИРАЛЬНЫЕ ФЕРРОМАГНЕТИКИ

Гелимагнетики представляют собой особый подвид магнитных кристаллов, в которых локальное упорядочение спинов (ферро-, ферри- или антиферромагнитное) сопровождается закруткой на масштабах, много больших элементарной ячейки. Причиной столь необычного поведения может служить, например, конкуренция между ферро- и антиферромагнитными обменными взаимодействиями на фрустрированной решетке спинов. В данной работе мы сосредоточимся на другой возможной причине появления закрученных магнитных структур, а именно, на антисимметричном обмене Дзялошинского – Мория. Рассмотрим ряд условий, способствующих возникновению гелимагнетизма такого рода.

1) Низкая симметрия межатомных связей обуславливает возникновение взаимодействия Дзялошинского – Мория между магнитными атомами. Заметим, что внутри одного кристаллического класса более низкой симметрией атомных позиций и связей обладают кристаллы несимморфных групп.

2) Отсутствие зеркальной и инверсионной симметрии приводит к возникновению магнитных спиралей с определенным направлением закрутки — правых или левых геликоид. В принципе, закрутка может возникать и в кристаллах с центром инверсии как следствие спонтанного нарушения симметрии. Однако в первом случае дополнительного нарушения симметрии не требуется и спиральные структуры возникают закономерно.

3) Поскольку взаимодействие Дзялошинского – Мория является слабым спин-орбитальным эффектом, оно проявляется лучше на фоне ослабленного изотропного обмена. Как следствие, гелимагнетики обычно имеют низкую температуру перехода от парамагнитного порядка к магнитному.

Рассмотренные в данной работе кристаллы, MnSi и Cu_2OSeO_3 , удовлетворяют вышеперечисленным условиям. Оба обладают кубической хиральной

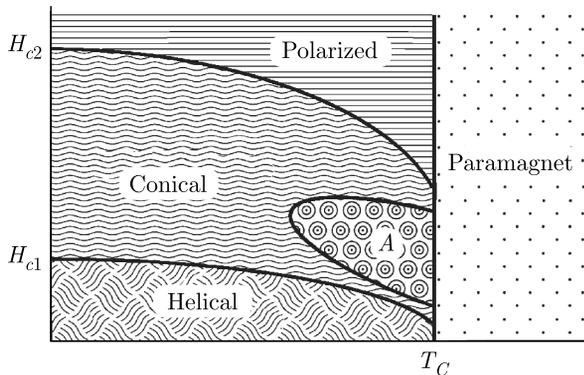


Рис. 1. Фазовая диаграмма кубического хирального ферромагнетика. Ниже критической температуры T_C существует ряд фаз, зависящих от магнитного поля. Критические поля H_{c1} и H_{c2} разделяют геликоидальную, коническую и поляризованную ферромагнитную фазы. Вблизи точки Кюри находится область существования загадочной фазы A с двойной закруткой

несимморфной пространственной группой $P2_13$ и низкой температурой перехода из парамагнитной в упорядоченную ферро- (MnSi , $T_C = 29$ К) или ферри- (Cu_2OSeO_3 , $T_C = 58$ К) магнитную фазу.

Другое замечательное свойство этих кристаллов заключается в том, что, благодаря высокой точечной симметрии, спиновые спирали могут почти свободно ориентироваться магнитным полем вдоль произвольного направления. Вследствие этого в кубических гелимагнетиках наблюдается интересное фазовое разнообразие [8, 9].

2.1. Фазовая диаграмма

В кристаллах типа MnSi и Cu_2OSeO_3 температуру фазового перехода из парамагнитного состояния в магнитное часто называют точкой Нееля, подразумевая при этом, что, благодаря пространственным осцилляциям поля намагниченности, суммарный магнитный момент геликоидальной фазы равен нулю. Однако правильнее было бы определить магнитное состояние не как антиферромагнетик, а как «закрученный ферромагнетик» и, соответственно, температуру перехода как точку Кюри, поскольку это состояние характеризуется ненулевой локальной намагниченностью, а периоды осцилляций во много раз превышают параметр элементарной ячейки кристалла. Это, в частности, позволяет отличить данный случай от случая «закрученного антиферромагнетика», который также встречается в природе [33].

На рис. 1 схематично изображена фазовая диаграмма хирального кубического ферромагнетика. При температурах намного ниже точки Кюри выделяют три фазы — геликоидальную, коническую и поляризованную ферромагнитную — с фазовыми переходами по магнитному полю между ними. Эти фазы, различающиеся главным образом по поведению магнитной восприимчивости, структурно весьма похожи. Действительно, геликоидальную и поляризованную структуры можно считать частными случаями конической: в первой из них равна нулю высота конуса, во второй — радиус его основания. Фактически геликоида приобретает коническую составляющую уже при приложении минимального магнитного поля, а критическое значение поля H_{c1} определяется, как будет обсуждаться позднее, переориентацией оси спирали вдоль направления поля.

Наиболее интригующей фазой безусловно является так называемая фаза A , возникающая вблизи точки Кюри при промежуточных значениях магнитного поля [34–41]. Расположение на фазовой диаграмме позволяет предположить, что за появление фазы A отвечают механизмы, схожие с теми, что приводят к появлению голубых фаз в холестерических жидких кристаллах. В настоящий момент считается установленным, что фаза A представляет собой треугольную решетку стабилизированных полем линейных топологических дефектов — скирмионов (рис. 2а) [4–7, 35, 42, 43]. Намагниченность в фазе A закручена вокруг ориентированных вдоль магнитного поля ядер скирмионов, а на самих ядрах — опрокинута против поля. Очевидная энергетическая невыгодность этого опрокидывания компенсируется выгодой от двойной закрутки поля намагниченности, что углубляет аналогию с голубыми фазами. На рис. 2б показана элементарная ячейка магнитной структуры фазы A с элементами симметрии. Компонента намагниченности вдоль поля обозначена цветовым градиентом, проекция поля намагниченности на плоскость — стрелками. Всем осям симметрии соответствуют сингулярности, в которых намагниченность строго параллельна магнитному полю: осям b — вихри-скирмионы, осям 3 — вихри, осям 2 — антивихри (2π -дисклинации). Кроме того, симметрия включает магнитные псевдооси $2'$, перпендикулярные полю. Магнитная группа $p62'2'$ [44].

2.2. Микроскопический и феноменологический подходы

Закрученные магнитные структуры хиральных кубических ферромагнетиков, таких как MnSi и

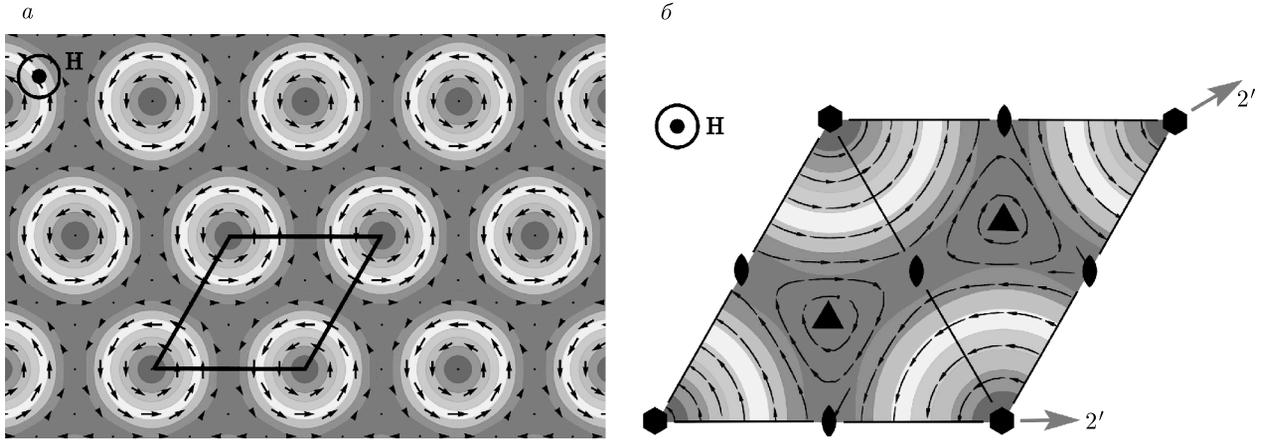


Рис. 2. (В цвете онлайн) Фаза А хирального кубического ферромагнетика (а) и ее элементарная ячейка с элементами симметрии (б). Цветовой градиент обозначает проекцию намагниченности на направление магнитного поля: красный — по полю, синий — против поля. Стрелки — проекции поля намагниченности на плоскость, перпендикулярную полю

Cu_2OSeO_3 , могут описываться в рамках микроскопического подхода, основанного на энергии Гейзенберга [23], либо феноменологически с энергией Ландау – Лифшица [45, 46]. Энергия гейзенберговского магнетика имеет вид

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j (-J_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + \mathbf{D}_{ij} \cdot [\mathbf{s}_i \times \mathbf{s}_j]) - g\mu_B \sum_i \mathbf{H} \cdot \mathbf{s}_i, \quad (1)$$

где суммирование ведется по магнитным атомам (i) и их соседям (j), \mathbf{s} — классические спины ($|\mathbf{s}| = 1$), J_{ij} — константы изотропного обмена, \mathbf{D}_{ij} — псевдовекторы Дзялошинского – Мориа. В работах [28–31] был осуществлен переход от соотношения (1) к выражению для плотности энергии Ландау – Лифшица:

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \mathcal{J} \frac{\partial \boldsymbol{\mu}}{\partial r_\alpha} \frac{\partial \boldsymbol{\mu}}{\partial r_\alpha} + \mathcal{D} \boldsymbol{\mu} \cdot [\nabla \times \boldsymbol{\mu}] - M_0 \mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\mu}, \quad (2)$$

где $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{M}/M$ — направление вектора намагниченности; здесь предполагается, что плотность магнитного момента имеет постоянное абсолютное значение $|\mathbf{M}(\mathbf{r})| \approx M_0$, что практически верно при температурах достаточно ниже точки Кюри. Коэффициенты \mathcal{J} и \mathcal{D} вычисляются согласно формулам [31]

$$\mathcal{J} = \frac{1}{6} \sum_i \sum_j J_{ij} \tilde{r}_{ij}^2, \quad (3)$$

$$\mathcal{D} = -\frac{1}{6} \sum_i \sum_j \mathbf{D}_{ij} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{ij}, \quad (4)$$

где суммирование по i теперь ведется по атомам внутри элементарной ячейки. Здесь $\tilde{\mathbf{r}}_{ij} = \tilde{\mathbf{r}}_j - \tilde{\mathbf{r}}_i$ — расстояния между некоторыми идеальными положениями двух атомов, также называемыми «обменными» [30, 31], которые находятся из системы уравнений

$$\sum_j J_{ij} \tilde{\mathbf{r}}_{ij} = 0. \quad (5)$$

Заметим, что константы \mathcal{J} и \mathcal{D} не могут зависеть от реальных координат атомов, поскольку реальные координаты не входят в выражение для энергии (1). При выводе формул (2)–(4) за единицу длины принимался период кристаллической решетки. Предполагается, что изменения магнитной структуры происходят на масштабах, много больших элементарной ячейки кристалла. Плотность энергии в произвольных единицах измерения длины есть $\mathcal{E}/V_{u.c.}$, где $V_{u.c.}$ — объем ячейки.

Формулы (3) и (4) позволяют вычислить из первых принципов волновое число магнитных спиралей, $k = \mathcal{D}/\mathcal{J}$. В закрученных ферромагнетиках $\mathcal{J} > 0$ и знак k , определяющий направление закрутки геликоид, совпадает со знаком псевдоскаляра \mathcal{D} . Таким образом, выражение (4) устанавливает связь между структурной хиральностью кристалла и хиральностью его магнитных свойств. Эта связь исследовалась экспериментально и теоретически в целом ряде работ [47–52].

Есть одна особенность микроскопической спиновой структуры, которая не описывается феноменологической теорией. Она заключается в том, что каждый спин \mathbf{s}_i отклоняется от направления по-

ля намагниченности $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}_i)$ в точке, где он находится [29]:

$$\mathbf{s}_i = \boldsymbol{\mu} + \Delta\mathbf{s}_{i\perp} + \Delta\mathbf{s}_{i\parallel}, \quad (6)$$

где $\Delta\mathbf{s}_{i\perp}$ — перпендикулярный к $\boldsymbol{\mu}$ малый скос, а $\Delta\mathbf{s}_{i\parallel} = -(\Delta\mathbf{s}_{i\perp})^2\boldsymbol{\mu}/2$ — вызванное скосом уменьшение проекции спина на направление намагниченности. В первом приближении имеем

$$\Delta\mathbf{s}_{i\perp} = ((\tilde{\mathbf{r}}_i - \mathbf{r}_i) \cdot \nabla)\boldsymbol{\mu} + [\boldsymbol{\rho}_i \times \boldsymbol{\mu}], \quad (7)$$

где первое слагаемое связано с разницей реальных и обменных координат атомов, а второе описывает скосы спинов из-за взаимодействия Дзялошинского–Мория; углы скосов $\boldsymbol{\rho}$ вычисляются из уравнений [31]

$$\sum_j J_{ij}(\boldsymbol{\rho}_i - \boldsymbol{\rho}_j) = \sum_j \mathbf{D}_{ij}. \quad (8)$$

Скосы дают вклад в энергию (2), учтенный в константах \mathcal{J} и \mathcal{D} .

3. ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ МАГНИТНЫХ ФАЗ

Выражение (2) для плотности энергии содержит несколько физических констант, что создает впечатление многопараметричности задачи. Можно, однако, перейти к безразмерным величинам, используя замены

$$\mathbf{r}_{new} = \frac{\mathcal{D}}{\mathcal{J}}\mathbf{r}_{old}, \quad \mathcal{E}_{new} = \frac{\mathcal{J}}{\mathcal{D}^2}\mathcal{E}_{old}$$

и вводя параметр

$$\mathbf{h} \equiv \frac{\mathcal{J}M_0}{\mathcal{D}^2}\mathbf{H} = \frac{\mathbf{H}}{H_{c2}},$$

где H_{c2} — критическое поле, выше которого магнитная структура вырождается до однородной. Тогда формула (2) преобразуется к виду

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \frac{\partial \boldsymbol{\mu}}{\partial r_\alpha} \frac{\partial \boldsymbol{\mu}}{\partial r_\alpha} + \boldsymbol{\mu} \cdot [\nabla \times \boldsymbol{\mu}] - \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\mu}, \quad (9)$$

и задача становится однопараметрической, причем все нетривиальные магнитные фазы, включая геликоидальную, коническую фазы и фазу A , помещаются в диапазоне $0 \leq h < 1$.

Приравнивая нулю вариацию энергии магнитной структуры, получаем

$$\int \delta \mathcal{E} dV = - \int (\mathbf{h}_{eff} \cdot \delta \boldsymbol{\mu}) dV = 0, \quad (10)$$

где

$$\mathbf{h}_{eff}(\boldsymbol{\mu}) = \Delta \boldsymbol{\mu} - 2[\nabla \times \boldsymbol{\mu}] + \mathbf{h} \quad (11)$$

— действующее на $\boldsymbol{\mu}$ эффективное локальное поле.

Поскольку $|\boldsymbol{\mu}| = 1$, то $\delta \boldsymbol{\mu} \perp \boldsymbol{\mu}$ и равенство (10) выполняется, если $\mathbf{h}_{eff} \parallel \boldsymbol{\mu}$, или

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{h}_{eff}/h_{eff}, \quad (12)$$

где знак выбран таким образом, чтобы соответствовать известному решению для конической спирали, когда $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{h}_{eff}$.

Энергия (9) является «изотропной» в том смысле, что она не зависит от ориентации магнитной структуры относительно кристаллических осей. Тем не менее известные решения (11), (12), такие как геликоида, коническая фаза и фаза A , имеют более низкую симметрию, чем сами уравнения. Изотропия же уравнений приводит к тому, что эти низкосимметричные решения могут быть ориентированы произвольным образом относительно кристалла. Как будет показано в разд. 5, добавление к выражению (9) анизотропных членов может привести к выбору преимущественной ориентации решений. В данном разделе мы ограничимся рассмотрением изотропного случая, не считая нескольких общих замечаний, которые необходимо сделать, говоря о геликоидальной фазе.

3.1. Коническая фаза

С точностью до констант и дивергентных членов плотность энергии (9) можно переписать в виде

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu} + [\nabla \times \boldsymbol{\mu}] - \mathbf{h})^2 + \frac{1}{2}(\nabla \cdot \boldsymbol{\mu})^2. \quad (13)$$

Очевидно, что энергия имела бы минимум для совместного решения уравнений

$$\boldsymbol{\mu} + [\nabla \times \boldsymbol{\mu}] = \mathbf{h}, \quad \nabla \cdot \boldsymbol{\mu} = 0. \quad (14)$$

Такое решение существует и представляет собой закрученную вдоль поля коническую спираль:

$$\boldsymbol{\mu} = \sin \theta (\mathbf{e}_1 \cos z + \mathbf{e}_2 \sin z) + \mathbf{e}_3 \cos \theta, \quad (15)$$

где $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ — ортонормированный базис, $z \equiv \mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_3$ — координата вдоль оси спирали, $\mathbf{e}_3 \parallel \mathbf{h}$ и $\cos \theta = h$. Заметим, что двойная закрутка вектора $\boldsymbol{\mu}$ может оказаться локально более выгодной, однако, благодаря пространственным фрустрациям, глобальный минимум энергии достигается на структуре, закрученной вдоль одного направления. Среднее значение магнитного момента направлено вдоль поля, $\langle \boldsymbol{\mu} \rangle = \mathbf{h}$, и, таким образом, коническая фаза имеет скалярную магнитную восприимчивость $\chi_c = 1$ ($\chi_c = M_0/H_{c2}$ в размерных величинах).

Подставляя выражение (15) в (9), получим плотность энергии конической спирали:

$$\mathcal{E}_c = -\frac{1}{2} - \frac{h^2}{2}. \quad (16)$$

При $h \geq 1$ конус схлопывается ($\cos \theta = 1$) и коническая фаза переходит в поляризованную. При этом магнитная восприимчивость резко убывает, $\chi \rightarrow 0$, и ее отличие от нуля теперь обусловлено сохраняющимися скосами магнитных моментов, которые медленно уменьшаются при увеличении поля.

3.2. Геликоидальная фаза

В области малых магнитных полей, $h \lesssim h_{c1} \equiv H_{c1}/H_{c2} \ll 1$, вследствие кубической анизотропии кристалла ось магнитной геликоиды выстраивается вдоль кристаллографического направления $\langle 100 \rangle$ или $\langle 111 \rangle$ в зависимости от знака коэффициента при анизотропном члене [45, 46]. Как правило, структура распадается на домены, характеризующиеся выбором одного из эквивалентных направлений оси. Направление магнитного поля может не совпадать с направлением волнового вектора, что должно приводить к искажению геликоиды. Так, если магнитное поле перпендикулярно оси, то геликоида переходит в эллиптическую спираль, подобную той, что возникает в холестерических и хиральных смектических жидких кристаллах при схожих условиях [53]. В случае, когда поле направлено вдоль геликоиды, появляется коническая спираль с высотой конуса $\langle \boldsymbol{\mu} \rangle = \mathbf{h}$. Легко предположить, что при произвольной взаимной ориентации поля и оси спирали в области малых h будет возникать коническо-эллиптическая спираль, описываемая выражением

$$\boldsymbol{\mu} = \sin \theta (\mathbf{e}_1 \cos \varphi + \mathbf{e}_2 \sin \varphi) + \mathbf{e}_3 \cos \theta, \quad (17)$$

где ось спирали направлена по $\mathbf{e}_3 \equiv \mathbf{n}$ и при $\mathbf{h} = (h_\perp, 0, h_\parallel)$ в базисе $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$ тригонометрические функции φ выражаются через эллиптические функции Якоби:

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= 2\operatorname{sn}^2(\lambda z; m) - 1, \\ \sin \varphi &= -2\operatorname{sn}(\lambda z; m)\operatorname{cn}(\lambda z; m), \end{aligned} \quad (18)$$

где z — координата вдоль оси спирали. Минимизируя энергию, в первом приближении по малому параметру h получим

$$\cos \theta \approx h_\parallel, \quad m \approx 4h_\perp, \quad \lambda \approx 1/2 + h_\perp/2 \quad (19)$$

(см. Приложение). Средний по структуре магнитный момент имеет коническую составляющую

$\cos \theta$ вдоль оси \mathbf{n} и эллиптическую составляющую $\langle \cos \varphi \rangle \approx m/8$ вдоль \mathbf{e}_1 :

$$\langle \boldsymbol{\mu} \rangle = (\langle \cos \varphi \rangle, 0, \cos \theta) \approx (h_\perp/2, 0, h_\parallel), \quad (20)$$

или, в произвольной установке,

$$\langle \boldsymbol{\mu} \rangle = \frac{\mathbf{h}}{2} + \frac{(\mathbf{h} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}}{2}. \quad (21)$$

Средняя по коническо-эллиптической спирали плотность энергии равна

$$\langle \mathcal{E}_{ce} \rangle = -\frac{1}{2} - \frac{3h^2}{8} - \frac{h^2}{8} \cos 2\gamma, \quad (22)$$

где γ — угол между магнитным полем и направлением оси спирали.

В многодоменной структуре при $h \rightarrow 0$ и одинаковой встречаемости доменов с разными \mathbf{n} усреднение выражения (21) по точечной группе 23 дает $\langle \boldsymbol{\mu} \rangle = 2\mathbf{h}/3$ (использовано $\langle n_\alpha n_\beta \rangle_{23} = (1/3)\delta_{\alpha\beta}$), т. е. магнитная восприимчивость геликоидальной фазы составляет две трети от восприимчивости конической фазы. Этот результат был получен экспериментально [54–56]. При увеличении h домены постепенно переориентируются в направлении магнитного поля, и магнитная восприимчивость должна испытать скачок вблизи $h = h_{c1}$, для того чтобы намагниченность могла выйти на режим $\langle \boldsymbol{\mu} \rangle = \mathbf{h}$ для конической спирали. Из выражения (21) тензор магнитной восприимчивости спирали в близком к нулю магнитном поле может быть записан как

$$\chi_{\alpha\beta} = \chi_\parallel n_\alpha n_\beta + \chi_\perp (\delta_{\alpha\beta} - n_\alpha n_\beta),$$

$$\chi_\parallel = \chi_c, \quad \chi_\perp = \chi_c/2.$$

В работах [56, 57] этот результат был получен в приближении среднего поля.

4. ФАЗА А

Наибольший интерес у исследователей вызывает фаза А, устойчивая в ограниченной области фазовой диаграммы T – H [35, 36, 38–40]. По шкале температур она представлена в узкой области ниже точки Кюри, что роднит ее с голубыми фазами холестерических жидких кристаллов. Очевидно, как и в случае холестериков, для устойчивости фазы А важна возможность изменения абсолютной величины параметра порядка (здесь — намагниченности) вблизи критической температуры. По магнитному полю фаза А расположена вблизи $H_{c2}/2$ и снизу и сверху

ограничена конической фазой. Нейтронографические исследования показывают, что фаза A раскладывается на три перпендикулярные полные спирали с углами $2\pi/3$ между ними [35–37, 40, 41]. Структурно ее часто описывают как треугольную решетку линейных топологических дефектов — скирмионов, обладающую гексагональной симметрией [7, 35, 42, 43]. Оси скирмионов параллельны полю, а намагниченность меняется в плоскости, перпендикулярной полю.

Распределение намагниченности в фазе A можно разложить в ряд Фурье:

$$\boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (23)$$

где векторы \mathbf{k} раскладываются по базису обратной решетки:

$$\mathbf{k}_1 = k_0(1, 0, 0), \quad \mathbf{k}_2 = k_0 \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0 \right),$$

k_0 — волновое число главных спиралей, видимых в нейтронографическом эксперименте. Условие действительности поля $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{r})$ сводится к $\boldsymbol{\mu}_{-\mathbf{k}} = \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}}^*$.

Усредняя плотность энергии (9) по пространству, находим выражение

$$\langle \mathcal{E} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} (k^2 |\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}}|^2 + i\mathbf{k} \cdot [\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}}^*]) - \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\mu}_0, \quad (24)$$

которое в отсутствие дополнительных условий легко минимизируется спиральями вида

$$\operatorname{Re} \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}} \perp \operatorname{Im} \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}} \perp \mathbf{k}, \quad |\operatorname{Re} \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}}| = |\operatorname{Im} \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}}|.$$

Однако дополнительное усложнение вытекает из условия унимодулярности поля $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{r})$, которое записывается в виде свертки:

$$\sum_{\mathbf{k}'} \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \cdot \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}'} = \begin{cases} 1, & \mathbf{k} = 0, \\ 0, & \mathbf{k} \neq 0. \end{cases} \quad (25)$$

В частности, при $\mathbf{k} = 0$ это приводит к условию нормировки

$$\langle \boldsymbol{\mu}^2(\mathbf{r}) \rangle = \sum_{\mathbf{k}} |\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{k}}|^2 = 1. \quad (26)$$

С учетом условия (25) минимизация выражения (24) становится непростой задачей, которую приходится решать численным моделированием.

Скажем несколько слов о волновом числе k_0 главных спиралей. Часто утверждают, что $|k_0| = |\mathcal{D}|/\mathcal{J}$ (в принятых здесь безразмерных единицах $k_0 = 1$), т. е. спирали фазы A имеют тот же период, что и коническая фаза. Действительно, каждое слагаемое в круглых скобках в (24) минимально

при $k = 1$. Однако, вследствие того что сумма (24) включает спирали с волновыми числами, кратными k_0 , «энергетическое давление» высоких гармоник должно приводить к уменьшению величины k_0 , которая, таким образом, должна быть меньше единицы. Отметим, что нейтронографические исследования, как правило, не показывают высоких гармоник, что объясняется малым удельным весом последних.

4.1. Простая модель с тремя геликоидами

Рассмотрим в качестве примера примитивную модель фазы A , имеющей ненулевую среднюю намагниченность $\boldsymbol{\mu}_0 \parallel \mathbf{h}$ и шесть главных гармоник с $k_0 = 1$, образующих три спирали с углами $2\pi/3$ между ними. Примем, что выполняется условие нормировки (26), при этом нарушается более общее условие унимодулярности (25). Минимизация выражения (24) дает $\mu_0 = h$ и среднюю плотность энергии, в точности равную плотности энергии (16) конической фазы. Подчеркнем, что данный результат возможен только благодаря отказу от условия унимодулярности.

Поле намагниченности имеет вид

$$\boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}) = h\mathbf{e}_3 + \sum_{s=1}^3 \{ \boldsymbol{\mu}_s \exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}) + \text{c.c.} \}, \quad (27)$$

где $\mathbf{e}_3 \equiv \mathbf{h}/h$, индекс « s » нумерует спирали, волновые векторы

$$\mathbf{k}_1 = (1, 0, 0), \quad \mathbf{k}_{2,3} = \left(-\frac{1}{2}, \pm \frac{\sqrt{3}}{2}, 0 \right),$$

а амплитуды задаются выражением

$$\boldsymbol{\mu}_s = \sqrt{\frac{1-h^2}{12}} \exp(i\phi_0) (-\mathbf{e}_3 + i[\mathbf{k}_s \times \mathbf{e}_3]), \quad (28)$$

удовлетворяющим условию нормировки. Что касается условия унимодулярности, то оно хорошо удовлетворяется в некоторой области вблизи $h = 1/2$. Решим, например, задачу минимизации величины $\langle (\mu^2 - 1)^2 \rangle = \langle \mu^4 \rangle - 1$, характеризующей отклонение поля $\boldsymbol{\mu}$ от унимодулярности. Из (27), (28) получаем выражение

$$\begin{aligned} \langle \mu^4 \rangle - 1 &= (1 - h^2) \times \\ &\times \left[(19h^2 + 5)/12 - h\sqrt{3(1-h^2)} \cos 3\phi_0 \right], \quad (29) \end{aligned}$$

имеющее минимум при $\phi_0 = 0$, что соответствует гексагональной симметрии и расположению ядра

скирмиона в вершине элементарной ячейки (решения $\phi_0 = \pm 2\pi/3$ приводят к смещению начала координат). Таким образом, из данной модели следует гексагональная симметрия скирмионной решетки. Минимум $\langle \mu^4 \rangle - 1$, приблизительно равный 0.029, достигается при $h = 0.409$, что хорошо согласуется с расположением фазы A на фазовых диаграммах, получаемых в экспериментах.

4.2. Численное моделирование фазы A

Поскольку энергия (9) достигает минимума на конической фазе, для моделирования фазы A необходимо минимизировать энергию при дополнительных условиях, задающих точечную симметрию и периодичность. Из экспериментов по дифракции нейтронов известно, что фаза A имеет ось 6-го или, возможно, 3-го порядка, параллельную приложенному магнитному полю [35–37, 40, 41]. В перпендикулярной полю плоскости структура периодическая с базисом обратной решетки

$$\mathbf{k}_1 = k_0(1, 0, 0), \quad \mathbf{k}_2 = k_0 \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0 \right).$$

Учитывая (12), устойчивое состояние можно искать методом медленного дрейфа унимодулярного поля $\boldsymbol{\mu}$ в направлении эффективного поля $\mathbf{h}_{eff}(\boldsymbol{\mu})$. В качестве стартового состояния можно взять, например, поле простой модели из предыдущего раздела, приведя его к унимодулярному: $\boldsymbol{\mu} \rightarrow \boldsymbol{\mu}/\mu$.

Вариационный метод позволяет отыскать лишь локально устойчивую магнитную структуру, но не минимизирует полную энергию системы. Это, в частности, означает, что невозможно определить период структуры и обратную ему величину k_0 . Однако, при заданных амплитудах $\boldsymbol{\mu}_k$, равновесный период может быть вычислен минимизацией энергии (24), представляющей собой квадратичную функцию k_0 . Заметим, что изменение k_0 не приведет к нарушению условия унимодулярности (25). Для отыскания глобального минимума энергии необходимо чередовать процесс дрейфа и вычисление k_0 . Однако нельзя утверждать, что наблюдаемая в эксперименте фаза A достигает минимума энергии. Действительно, поскольку фаза A представляет собой решетку скирмионов, любое изменение периодичности приводит к рождению/уничтожению топологических дефектов — процессу, который без нарушения непрерывности может происходить только на границе кристалла. Сложность образования/уничтожения скирмионов может привести к то-

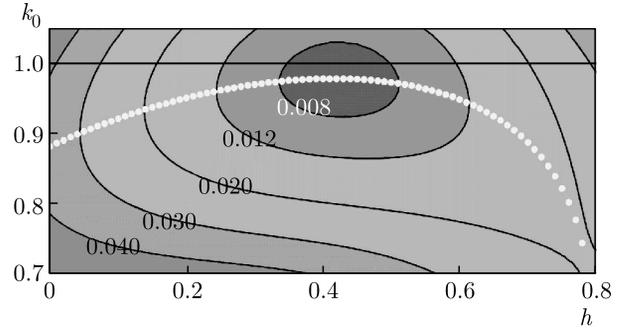


Рис. 3. (В цвете онлайн) Разность $\langle \mathcal{E}_A \rangle - \mathcal{E}_c$ средних плотностей энергий фазы A (моделирование) и конической фазы как функция величины магнитного поля h и волнового числа главных спиралей k_0 . Энергия конической фазы вычислена для $k = 1$. Желтые точки соответствуют глобальному минимуму энергии фазы A при заданном значении поля

му, что периоды решетки не будут меняться при изменении поля, но будут сохранять свои значения, полученные в момент возникновения фазы A . Поэтому имеет смысл проводить моделирование в зависимости не от одного, а сразу от двух параметров: h и k_0 .

На рис. 3 показаны результаты вычисления средней плотности энергии фазы A в зависимости от h и k_0 . Энергия отсчитывается от энергии конической фазы (16) при том же значении магнитного поля и $k = 1$. Желтая кривая отмечает глобальный минимум энергии при заданном значении поля. Видно, что разница энергий минимальна в некоторой окрестности $h = 1/2$, что соответствует области существования фазы A , наблюдаемой в эксперименте. В этой области оптимальное значение k_0 достигает максимума, приблизительно равного 0.978. Отметим, что соответствующее минимуму энергии значение k_0 всегда меньше единицы, что объясняется давлением со стороны высоких гармоник.

На рис. 4 изображены дифракционные картины фазы A по результатам моделирования для нескольких пар параметров h, k_0 . Площади изображающих пики кругов пропорциональны квадратам амплитуд $|\boldsymbol{\mu}_k|^2$. Центральный пик соответствует квадрату средней намагниченности μ_0^2 фазы A . Параметры $k_0 = 0.978, h = 0.41$ соответствуют минимальной разнице энергий $\langle \mathcal{E}_A \rangle - \mathcal{E}_c$. Для сравнения приведены две дифракционные картины для структур с тем же периодом, вычисленные при других значениях поля ($h = 0, h = 0.8$). Видно, что большая устойчивость фазы A связана с меньшим весом высоких гармоник. Отметим, что оптимальная для существования

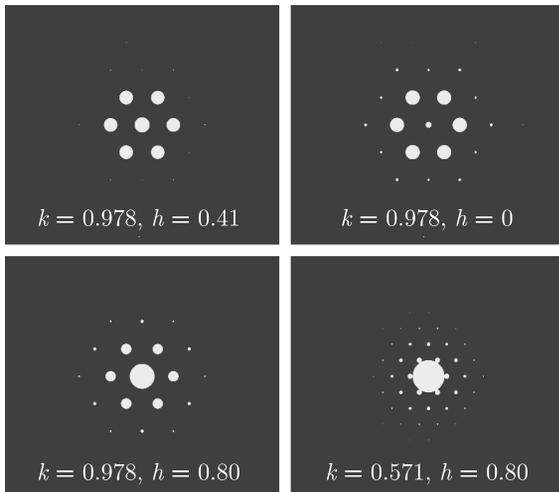


Рис. 4. (В цвете онлайн) Дифракционные картины фазы A по результатам моделирования. Площади кружков пропорциональны квадратам амплитуд $|\mu_k|^2$. Параметры $k_0 = 0.978$, $h = 0.41$ отвечают наименьшей разности энергий между фазой A и конической фазой при $k = 1$

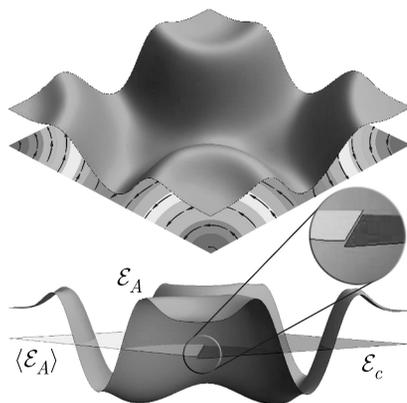


Рис. 5. (В цвете онлайн) Распределение плотности энергии фазы A по элементарной ячейке по результатам моделирования с параметрами $h = 0.41$, $k_0 = 0.978$. Для сравнения показаны средняя плотность энергии $\langle \mathcal{E}_A \rangle$ (желтый уровень) и энергия конической фазы \mathcal{E}_c при том же значении поля (синий уровень)

фазы A величина магнитного поля $h \approx 0.41$ близка к значению, полученному в простой модели трех геликоид.

В отличие от конической фазы с ее всюду одинаковой плотностью энергии, энергия фазы A неравномерно распределена по элементарной ячейке. На рис. 5 показана плотность энергии по результатам моделирования фазы A для наиболее устойчивого случая с параметрами $h = 0.41$, $k_0 = 0.978$. Как и ожидалось, плотность энергии максимальна вблизи

скирмионов, где намагниченность направлена противоположно магнитному полю. При этом в центре ядра наблюдается небольшой прогиб как следствие двойной закрутки. Усредненная по ячейке энергия $\langle \mathcal{E}_A \rangle$ обозначена на рисунке желтым уровнем. Синий уровень соответствует энергии \mathcal{E}_c конической фазы при том же значении поля. Видно, что, несмотря на сильную неоднородность распределения энергии, разница $\langle \mathcal{E}_A \rangle - \mathcal{E}_c$ очень мала. Как следствие, любой неучтенный физический фактор может повлиять на устойчивость фазы A , сделав ее энергетически более выгодной, чем коническая фаза. Среди таких факторов следующие:

- 1) флуктуации намагниченности вблизи точки Кюри (как уже было замечено, этим может объясняться температурный диапазон существования фазы A);
- 2) влияние поверхности (по всей видимости, это один из главных факторов устойчивости фазы A в тонких пленках [38, 39, 58]);
- 3) дискретность распределения магнитных атомов;
- 4) неучтенные в энергии члены более высоких порядков малости, в том числе члены с кубической анизотропией.

Последняя из перечисленных выше возможностей, а именно влияние анизотропных членов на устойчивость фаз хирального кубического ферромагнетика, будет рассмотрена в следующем разделе.

5. КУБИЧЕСКАЯ АНИЗОТРОПИЯ

Можно предложить два различных механизма появления анизотропных членов в энергии Ландау–Лифшица. Первый связан с взаимодействием каждого магнитного момента по отдельности с неким локальным кристаллическим полем на атоме, к которому он привязан. Другой механизм — коллективный — не требует привлечения дополнительных взаимодействий кроме уже рассмотренных изотропного обмена и антисимметричного обмена Дзялошинского–Мория. Здесь анизотропия возникает как следствие топологических свойств решетки взаимодействующих магнитных моментов, обладающей кубической симметрией. В реальных кристаллах одновременно могут действовать оба этих механизма, однако здесь мы ограничимся рассмотрением лишь более простого первого случая. Заметим, что в этом случае анизотропные члены энергии

Ландау – Лифшица не содержат пространственных производных от намагниченности.

На микроскопическом уровне энергию взаимодействия спина \mathbf{s} с локальным кристаллическим полем можно задать выражением

$$E_{l.c.f.} = \frac{1}{2}A_{\alpha\beta}s_{\alpha}s_{\beta} + \frac{1}{4}B_{\alpha\beta\gamma\delta}s_{\alpha}s_{\beta}s_{\gamma}s_{\delta}, \quad (30)$$

где тензоры A и B обладают следующими свойствами: 1) они симметричны по перестановкам индексов; 2) они обладают симметрией атомной позиции; 3) след A и любая свертка B по двум индексам равны нулю ($A_{\alpha\alpha} = B_{\alpha\alpha\gamma\delta} = 0$). Тензоры, относящиеся к атомам в эквивалентных позициях, связаны преобразованиями симметрии точечной группы кристалла. В общем случае тензоры A и B имеют соответственно пять и девять независимых компонент; для атомов, лежащих на оси 3, соответственно одну (A_{xy}) и три ($B_{xxxx}, B_{xxxy}, B_{xxxz}$).

Для того чтобы получить кубическую анизотропную поправку к энергии Ландау – Лифшица (2), необходимо просуммировать (30) по всем магнитным моментам внутри элементарной ячейки.

Из соображений симметрии видно, что первый анизотропный член в плотности энергии имеет вид

$$\mathcal{E}_a = \alpha(\mu_x^4 + \mu_y^4 + \mu_z^4). \quad (31)$$

Может показаться, что тензор A не должен давать вклада в это выражение, однако это не так. Вклад от A возникает благодаря скосам, возникающим из-за взаимодействия спинов с локальным кристаллическим полем. Эти скосы могут быть вычислены по аналогии со скосами (7), (8), возникающими из-за взаимодействия Дзялошинского – Мория. Они имеют вид

$$\Delta s_{i\perp} = \Theta_i \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{\mu} \cdot \Theta_i \cdot \boldsymbol{\mu}), \quad (32)$$

где Θ_i – тензоры, вычисляемые из уравнений

$$\sum_j J_{ij}(\Theta_i - \Theta_j) = -A_i, \quad (33)$$

где сумма по j берется по атомам, соседним с i -м. Тензоры Θ_i обладают теми же свойствами симметрии, что и A_i . Скосы (32) вносят в плотность энергии вклад

$$-\frac{1}{4} \sum_i \sum_j J_{ij} \{ \boldsymbol{\mu} \cdot \Theta_{ij}^2 \cdot \boldsymbol{\mu} - (\boldsymbol{\mu} \cdot \Theta_{ij} \cdot \boldsymbol{\mu})^2 \}, \quad (34)$$

где сумма по i берется по всем магнитным атомам в элементарной ячейке, а $\Theta_{ij} \equiv \Theta_i - \Theta_j$ – симметричный бесследовый тензор, имеющий симметрию

межатомной связи. Второе слагаемое в фигурных скобках, имеющее четвертый порядок по намагниченности, дает вклад в (31).

Для случая хиральных ферромагнетиков структурного типа $B20$ (MnSi и др.) коэффициент в выражении (31) имеет вид

$$\alpha = -\frac{3A_{xy}^2}{\sum_j J_{ij}} + \frac{5}{2}B_{xxxx}, \quad (35)$$

где в знаменателе сумма по j берется по всем соседям произвольного магнитного момента (i).

При переходе к безразмерному выражению (9) для плотности энергии коэффициент α преобразуется как $\alpha_{new} = (\mathcal{J}/\mathcal{D}^2)\alpha_{old}$.

Добавление к плотности энергии (9) анизотропного члена (31) вызывает два вида изменений магнитной структуры. Во-первых, энергия низкосимметричных фаз теперь зависит от их ориентации. Это может приводить к повороту магнитной структуры как целого, а при малых полях – к выстраиванию ее вдоль выделенного кристаллографического направления. Во-вторых, это может вызывать искажение магнитной структуры. Остановимся на этом подробнее.

Введение анизотропного члена (31) изменит эффективное локальное поле на величину

$$\mathbf{h}_{eff}^{(1)}(\boldsymbol{\mu}) = -4\alpha(\mu_x^3, \mu_y^3, \mu_z^3), \quad (36)$$

что исказит исходную магнитную структуру. Будем искать поле намагниченности в виде

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_0 + \boldsymbol{\mu}_1 - \frac{\mu_1^2}{2}\boldsymbol{\mu}_0, \quad (37)$$

где $\boldsymbol{\mu}_0$ – исходное решение системы (11), (12), $\boldsymbol{\mu}_1$ – слабое искажение порядка α , $\boldsymbol{\mu}_1 \perp \boldsymbol{\mu}_0$. Выпишем поправки к плотности энергии первого и второго рядков по α :

$$\mathcal{E}_{a1} = \alpha(\mu_{0x}^4 + \mu_{0y}^4 + \mu_{0z}^4), \quad (38)$$

$$\mathcal{E}_{a2} = \frac{1}{2} \frac{\partial \mu_1}{\partial r_\alpha} \frac{\partial \mu_1}{\partial r_\alpha} + \boldsymbol{\mu}_1 \cdot [\nabla \times \boldsymbol{\mu}_1] + \mathbf{h}_{eff}^{(0)}(\boldsymbol{\mu}_0) \frac{\mu_1^2}{2} + 4\alpha(\mu_{0x}^3 \mu_{1x} + \mu_{0y}^3 \mu_{1y} + \mu_{0z}^3 \mu_{1z}). \quad (39)$$

Видно, что искажения структуры сказываются на энергии, начиная с членов второго порядка по малой величине α . В основном же анизотропия проявляется в зависимости энергии магнитной фазы от ее ориентации относительно кристаллических осей.

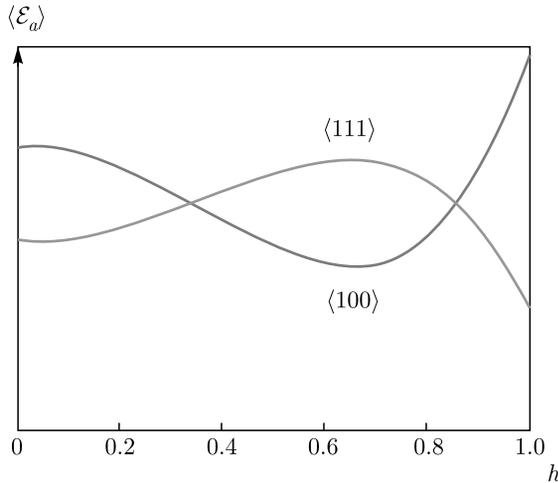


Рис. 6. Средняя плотность энергии анизотропии конической фазы, ориентированной вдоль направлений $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ (случай $\alpha > 0$). Ось легкого намагничивания конической фазы меняет направление при значениях поля $0.340H_{c2}$ и $0.861H_{c2}$

5.1. Коническая фаза

Учет малой анизотропной поправки (31) к плотности энергии не приведет к сильному искажению конической спирали, но средняя энергия будет теперь зависеть от ориентации оси спирали относительно осей кристалла. Действительно, усредняя \mathcal{E}_a по магнитной структуре (15) при произвольном направлении оси спирали $\mathbf{n} \equiv \mathbf{e}_3 = \mathbf{h}/h$, получим

$$\langle \mathcal{E}_a \rangle = \frac{\alpha}{8} [3\xi + (8 - 5\xi)(n_x^4 + n_y^4 + n_z^4)], \quad (40)$$

где

$$\xi = 1 + 6h^2 - 7h^4. \quad (41)$$

Видно, что направление \mathbf{n} , соответствующее минимуму энергии, зависит от знака коэффициента $\alpha(8 - 5\xi)$. Множитель $(8 - 5\xi)$ дважды меняет знак на отрезке $0 < h < 1$, а именно в точках 0.340 и 0.861 , и вместе с ним меняется выгодное направление намагничивания (рис. 6). Магнитный эксперимент с торсионными весами, проведенный при температуре ниже области существования фазы A , мог бы подтвердить или опровергнуть этот результат.

5.2. Геликоидальная фаза

При нулевом поле $\xi = 1$ и в зависимости от знака α геликоидам выгодно упорядочиваться либо вдоль трех направлений $\langle 100 \rangle$ ($\alpha < 0$), либо вдоль четырех направлений $\langle 111 \rangle$ ($\alpha > 0$). Первый случай соответствует Cu_2OSeO_3 , второй — MnSi . При этом, как

уже говорилось, магнитная структура разбивается на отдельные домены, различающиеся выбором одного из нескольких эквивалентных направлений оси геликоиды. При достижении магнитным полем критического значения H_{c1} доменная структура разрушается и спирали переориентируются вдоль поля. Переориентация спиралей представляет собой сложный процесс, зависящий от направления приложенного магнитного поля и предыдущей истории доменов [56, 59].

Зная H_{c1} , можно оценить величину коэффициента α . Из (22) видно, что в зависимости от угла γ между направлением магнитного поля и осью коническо-эллиптической спирали энергия может меняться в диапазоне $\Delta\mathcal{E}_{ce} = h^2/4$. С другой стороны, энергия анизотропии (40) конической спирали меняется в диапазоне $\Delta\mathcal{E}_a = |\alpha|/4$ ($h \ll 1$) в зависимости от ориентации оси спирали относительно кристаллической решетки. Приравнявая $\Delta\mathcal{E}_{ce}$ и $\Delta\mathcal{E}_a$, оценим величину критического поля как $h_{c1} \approx \sqrt{|\alpha|}$, или

$$\alpha \approx \pm(H_{c1}/H_{c2})^2, \quad (42)$$

где знак выбирается в зависимости от ориентации геликоид при нулевом поле. Так, для кристалла MnSi $H_{c1} \approx 0.1$ Тл, $H_{c2} \approx 0.6$ Тл и, следовательно, $\alpha \approx 1/36$.

5.3. Фаза A

Как и в предыдущих случаях, вычисление средней плотности энергии анизотропии фазы A сводится к вычислению величины $\langle \mu_x^4 + \mu_y^4 + \mu_z^4 \rangle$. С этой целью введем симметричный тензор четвертого ранга с компонентами

$$\mathcal{M}_{\alpha\beta\gamma\delta} = \langle \mu_\alpha \mu_\beta \mu_\gamma \mu_\delta \rangle \quad (43)$$

в системе координат, связанной с фазой A . Обозначим оси этой системы координат как $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3 \equiv \mathbf{n} = \mathbf{h}/h$; для определенности вектор \mathbf{e}_1 направлен вдоль волнового вектора \mathbf{k}_1 . За декартовыми осями, связанными с кристаллической решеткой, сохраним обозначения $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$ и \mathbf{e}_z .

Тензор \mathcal{M} любой магнитной структуры обладает точечной симметрией этой структуры и, в частности, для гексагональной фазы A с осью 6 , направленной вдоль \mathbf{e}_3 , сохранятся три независимых компоненты:

$$\mathcal{M}_{1111} = \mathcal{M}_{2222} = 3\mathcal{M}_{1122}, \quad \mathcal{M}_{1133} = \mathcal{M}_{2233}, \mathcal{M}_{3333}.$$

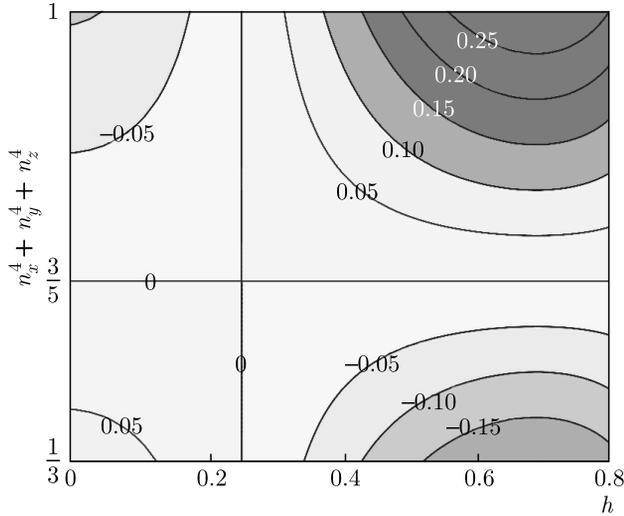


Рис. 7. (В цвете онлайн) Разность $\langle \mathcal{E}_{a,A} \rangle - \langle \mathcal{E}_{a,c} \rangle$ энергий анизотропии фазы A с $k_0 = 0.978$ и конической фазы с $k = 1$ в зависимости от направления \mathbf{n} и величины h магнитного поля. Коэффициент $\alpha = +1$. В области существования фазы A (правая часть диаграммы) анизотропия делает фазу A более устойчивой при $\mathbf{n} \parallel [111]$ и менее устойчивой при $\mathbf{n} \parallel [100]$ (наоборот при отрицательном значении α)

Из условия унимодулярности следует равенство $\langle \mu^4 \rangle = 1$, дающее дополнительную связь между этими компонентами:

$$8M_{1111}/3 + 4M_{1133} + M_{3333} = 1. \quad (44)$$

Средняя величина четвертой степени проекции μ на произвольное направление \mathbf{d} ($d = 1$) выражается через тензор \mathcal{M} следующим образом:

$$\langle (\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{d})^4 \rangle = M_{\alpha\beta\gamma\delta} d_\alpha d_\beta d_\gamma d_\delta. \quad (45)$$

В случае гексагональной симметрии эта величина зависит только от проекции направления \mathbf{d} на ось 6 ($\mathbf{d} \cdot \mathbf{n} \equiv d_3$):

$$\langle (\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{d})^4 \rangle = M_{1111}(1 - d_3^2)^2 + 6M_{1133}d_3^2(1 - d_3^2) + M_{3333}d_3^4. \quad (46)$$

Подставляя в качестве \mathbf{d} направления кристаллических осей $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ и суммируя, получим среднюю плотность энергии анизотропии фазы A вида (40) с $\xi_A = 8M_{1111}/3 + 16M_{1133}$.

В отличие от случая конической фазы, комбинация $(8 - 5\xi_A)$ не меняет знака во всей области существования фазы A , поэтому энергетически наиболее выгодным всегда является одно направление оси \mathbf{n} :

$\langle 111 \rangle$ при $\alpha > 0$, $\langle 100 \rangle$ при $\alpha < 0$. Однако для устойчивости фазы A важнее разница между ее энергией анизотропии и энергией анизотропии конической фазы при одном и том же направлении магнитного поля:

$$\langle \mathcal{E}_{a,A} \rangle - \langle \mathcal{E}_{a,c} \rangle = \frac{\alpha}{8}(\xi_A - \xi_c)[3 - 5(n_x^4 + n_y^4 + n_z^4)]. \quad (47)$$

На рис. 7 эта разница показана для фазы A с $k_0 = 0.978$ и конической фазы с $k = 1$ (коэффициент α положен равным $+1$). Видно, что кубическая анизотропия способствует устойчивости фазы A с осью \mathbf{n} , направленной вдоль $\langle 111 \rangle$ при положительном значении α и вдоль $\langle 100 \rangle$ при отрицательном. Необходимо отметить, что величины энергии анизотропии недостаточно для того, чтобы сделать фазу A энергетически выгоднее конической фазы.

Заметим, что рассмотренный анизотропный эффект ограничивается зависимостью энергии фазы A от направления \mathbf{n} магнитного поля и параллельных ему ядер скирмионов и не затрагивает азимутальной ориентации треугольной решетки скирмионов [60]. Для описания азимутального упорядочения, выходящего за рамки данной статьи, нужно учесть анизотропные поправки (39) к энергии, имеющие следующий порядок малости по α . Здесь, в частности, существенную роль будут играть искажения скирмионной решетки.

6. ВЫВОДЫ

Для описания магнитной структуры кубических хиральных ферромагнетиков в рамках феноменологического подхода было использовано приближение $|\mathbf{M}(\mathbf{r})| = \text{const}$, хорошо применимое при температурах значительно ниже точки перехода из парамагнитной в упорядоченную фазу. В данном приближении энергия Ландау–Лифшица содержит в качестве единственного параметра величину внешнего магнитного поля $\mathbf{h} = \mathbf{H}/H_{c2}$, причем все нетривиальные магнитные фазы — геликоидальная, коническая, фаза A — заключены в диапазоне $0 \leq h < 1$.

В рамках данной модели показано, что геликоидальная фаза в слабом магнитном поле хорошо описывается коническо-эллиптическими спиралями. При этом вид тензора магнитной восприимчивости согласуется как с экспериментальными данными [54–56], так и с результатами, полученными с помощью других теоретических подходов [56, 57].

Проведено моделирование фазы A в зависимости от величины магнитного поля и волнового числа k_0

главных спиралей. Результаты вычислений показали, что фаза A энергетически наиболее выгодна при $H \approx 0.41H_{c2}$; при этом число k_0 составляет 97.8% от волнового числа спиралей конической фазы.

Тем не менее в рамках заданного приближения энергия фазы A не опускается ниже энергии конической фазы при том же значении поля. Наиболее вероятное объяснение того, почему фаза A оказывается все же выгоднее конической при некоторых условиях, заключается в том, что в области существования фазы A — вблизи точки Кюри T_C — условие $|\mathbf{M}(\mathbf{r})| = \text{const}$ выполняется лишь приближенно из-за тепловых флуктуаций магнитного порядка, сильных вблизи температуры перехода. В этом случае вместо унимодулярного поля $\mu(\mathbf{r})$ ($\mu = 1$) необходимо использовать поле, близкое к унимодулярному ($\mu \lesssim 1$), и ввести в энергию Ландау–Лифшица дополнительный член $f(\mu)$. В работе [30] приводятся аргументы в пользу того, что этот член должен иметь вид $f(\mu) \sim \sqrt{1 - \mu}$.

Взаимодействие спинов с локальным кристаллическим полем рассмотрено в качестве причины возникновения кубической анизотропии магнитных свойств исследуемых кристаллов. В этом случае энергия Ландау–Лифшица должна быть дополнена анизотропным членом $\alpha(\mu_x^4 + \mu_y^4 + \mu_z^4)$. Знак α определяется кристаллографическими направлениями, вдоль которых выстраиваются спирали в геликоидальной фазе: $\alpha > 0$ соответствует направлениям $\langle 111 \rangle$, $\alpha < 0$ — направлениям $\langle 100 \rangle$. Абсолютную величину α можно оценить по критическому полю H_{c1} , разграничивающему геликоидальную и коническую фазы: $|\alpha| \approx (\mathcal{D}^2/\mathcal{J})(H_{c1}/H_{c2})^2$.

Для конической фазы, так же как и для геликоидальной, существуют кристаллографические направления, вдоль которых энергетически более выгодно выстраивание спиралей. Эти направления не постоянны и зависят от величины магнитного поля. Действительно, энергия анизотропии конической спирали имеет вид $\alpha F(h)[n_x^4 + n_y^4 + n_z^4]$, где \mathbf{n} — направление оси спирали, а функция $F(h)$ дважды меняет знак на отрезке $0 \leq h < 1$. Это приводит к тому, что, например, при $\alpha > 0$ оси легкого намагничивания меняются сначала от $\langle 111 \rangle$ к $\langle 100 \rangle$ при $H = 0.340H_{c2}$, а затем обратно к $\langle 111 \rangle$ при $H = 0.861H_{c2}$. Данный вывод можно проверить, например, проведя магнитный эксперимент с торсионными весами.

Показано, что кубическая анизотропия влияет на устойчивость фазы A в зависимости от направления магнитного поля, однако одного этого эффекта недостаточно для объяснения существо-

вания фазы. Так, при $\alpha > 0$ фаза A становится устойчивее, если поле приложено вдоль направлений $\langle 111 \rangle$, при $\alpha < 0$ — если вдоль $\langle 100 \rangle$. Некоторые экспериментальные наблюдения показывают прямо противоположную картину. Так, в кристалле MnSi фаза A существует в более широкой области температур, если поле приложено вдоль направлений $\langle 100 \rangle$ [61, 62], а в Cu_2OSeO_3 — если поле параллельно $\langle 111 \rangle$ [40]. Это несоответствие может служить доводом в пользу иной микроскопической причины возникновения кубической анизотропии в этих кристаллах. Такой причиной, например, может быть взаимодействие Дзялошинского–Мория между спинами, упорядоченными в решетку с кубической симметрией. В этом случае в энергии Ландау–Лифшица должны появиться анизотропные члены с пространственными производными от намагниченности.

Благодарности. Автор выражает благодарность В. Е. Дмитриенко за плодотворные обсуждения и высказанные критические замечания.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Государственного задания Федерального научно-исследовательского центра «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Определим параметры θ , λ и m коническо-эллиптической спирали из разд. 3.2, необходимые для вычисления энергии и магнитной восприимчивости геликоидальной фазы.

Подставляя (17) в выражение (9) для плотности энергии получим при $\theta = \text{const}$

$$\mathcal{E} = \sin^2 \theta \frac{d\varphi}{dz} \left(\frac{1}{2} \frac{d\varphi}{dz} - 1 \right) - h_{\parallel} \cos \theta - h_{\perp} \sin \theta \cos \varphi. \quad (48)$$

Уравнение Эйлера–Лагранжа

$$\frac{d^2\varphi}{dz^2} = \frac{h_{\perp}}{\sin \theta} \sin \varphi \quad (49)$$

совпадает с уравнением движения математического маятника с первым интегралом

$$\left(\frac{d\varphi}{dz} \right)^2 = \frac{2h_{\perp}}{\sin \theta} (a - \cos \varphi). \quad (50)$$

Подставляя в (50) решение (18), находим

$$a = \frac{2}{m} - 1, \quad \lambda^2 = \frac{h_{\perp}}{m \sin \theta}. \quad (51)$$

Подставляя (50), (51) в (48) и усредняя по z , получаем

$$\langle \mathcal{E} \rangle = -k \sin^2 \theta - h_{\parallel} \cos \theta - h_{\perp} \sin \theta (2/m - 1 - 2\langle \cos \varphi \rangle), \quad (52)$$

где введено обозначение $k = \langle d\varphi/dz \rangle = 2\pi/p$, p — период спирали. Учитывая, что $p = 2K(m)/\lambda$ ($K(m)$ — полупериод функций Якоби), получим из (51) уравнение для параметра m эллиптических функций:

$$mK^2(m) = \frac{\pi^2 h_{\perp}}{k^2 \sin \theta}. \quad (53)$$

При малых полях $m \sim h_{\perp}$ и с учетом разложения

$$K(m) \approx \frac{\pi}{2} \left(1 + \frac{m}{4} + \frac{9m^2}{64} \right)$$

решение (53) принимает вид

$$m \approx \omega - \frac{\omega^2}{2} + \frac{5\omega^3}{32}, \quad \omega = \frac{4h_{\perp}}{k^2 \sin \theta}. \quad (54)$$

$$\langle \cos \varphi \rangle = \frac{1}{K} \int_0^{2K} \operatorname{sn}^2(x; m) dx - 1 \approx \frac{m}{8}. \quad (55)$$

Подставляя (54), (55) в (52) и сохраняя члены до второго порядка малости по h включительно, имеем

$$\langle \mathcal{E} \rangle = \sin^2 \theta \left(\frac{k^2}{2} - k \right) - h_{\parallel} \cos \theta - \frac{h_{\perp}^2}{4}. \quad (56)$$

Минимизируя по k и θ , получаем $k = 1$ и $\cos \theta = h_{\parallel}$ и окончательно имеем

$$\langle \mathcal{E} \rangle = -\frac{1}{2} - \frac{h_{\parallel}^2}{2} - \frac{h_{\perp}^2}{4}. \quad (57)$$

ЛИТЕРАТУРА

1. A. A. Kornyshev, D. J. Lee, S. Leikin, and A. Wynveen, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 943 (2007).
2. В. А. Беляков, В. Е. Дмитриенко, УФН **146**, 369 (1985) [V. A. Belyakov and V. E. Dmitrienko, *Sov. Phys. Usp.* **28**, 535 (1985)].
3. D. C. Wright and N. D. Mermin, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 385 (1989).
4. А. Н. Богданов, Д. А. Яблонский, ЖЭТФ **95**, 178 (1989) [A. N. Bogdanov and D. A. Yablonskii, *Sov. Phys. JETP* **68**, 101 (1989)].
5. A. Bogdanov and A. Hubert, *Phys. Stat. Sol. (b)* **186**, 527 (1994).
6. A. Bogdanov and A. Hubert, *J. Magn. Magn. Mater.* **138**, 255 (1994).
7. U. K. Röbller, A. N. Bogdanov, and C. Pfeleiderer, *Nature* **442**, 797 (2006).
8. С. М. Стишов, А. Е. Петрова, УФН **181**, 1157 (2011) [S. M. Stishov and A. E. Petrova, *Phys. Usp.* **54**, 1117 (2011)].
9. А. Б. Борисов, УФН **190**, 291 (2020) [A. B. Borisov, *Phys. Usp.* **63**, 269 (2020)].
10. S. Tewari, D. Belitz, and T. R. Kirkpatrick, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 047207 (2006).
11. B. Binz, A. Vishwanath, and V. Aji, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 207202 (2006).
12. A. Hamann, D. Lamago, Th. Wolf et al., *Phys. Rev. Lett.* **107**, 037207 (2011).
13. А. П. Пятаков, А. К. Звездин, УФН **182**, 593 (2012) [A. P. Ryatakov and A. K. Zvezdin, *Phys. Usp.* **55**, 557 (2012)].
14. M. Mostovoy, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 067601 (2006).
15. А. П. Пятаков, А. С. Сергеев, Е. П. Николаева и др., УФН **185**, 1077 (2015) [A. P. Ryatakov, A. S. Sergeev, E. P. Nikolaeva et al., *Phys. Usp.* **58**, 981 (2015)].
16. N. Kanazawa, Y. Onose, T. Arima et al., *Phys. Rev. Lett.* **106**, 156603 (2011).
17. Y. Ishikawa, K. Tajima, D. Bloch, and M. Roth, *Sol. St. Comm.* **19**, 525 (1976).
18. K. Motoya, H. Yasuoka, Y. Nakamura, and J. H. Wernick, *Sol. St. Comm.* **19**, 529 (1976).
19. И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **32**, 1547 (1957) [I. E. Dzyaloshinsky, *Sov. Phys. JETP* **5**, 1259 (1957)].
20. I. Dzyaloshinsky, *Phys. Chem. Sol.* **4**, 241 (1958).
21. T. Moriya, *Phys. Rev. Lett.* **4**, 228 (1960).
22. T. Moriya, *Phys. Rev.* **120**, 91 (1960).
23. J. M. Hopkinson and H.-Y. Kee, *Phys. Rev. B* **79**, 014421 (2009).
24. J. P. Chen, Y. L. Xie, Z. B. Yan, and J.-M. Liu, *J. Appl. Phys.* **117**, 17C750 (2015).
25. G. P. Müller, F. N. Rybakov, H. Jónsson et al., *Phys. Rev. B* **101**, 184405 (2020).
26. J. H. Yang, Z. L. Li, X. Z. Lu et al., *Phys. Rev. Lett.* **109**, 107203 (2012).

27. O. Janson, I. Rousochatzakis, A. A. Tsirlin et al., *Nature Comm.* **5**, 5376 (2014).
28. V. E. Dmitrienko and V. A. Chizhikov, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 187203 (2012).
29. V. A. Chizhikov and V. E. Dmitrienko, *Phys. Rev. B* **85**, 014421 (2012).
30. V. A. Chizhikov and V. E. Dmitrienko, *Phys. Rev. B* **88**, 214402 (2013).
31. V. A. Chizhikov and V. E. Dmitrienko, *J. Magn. Magn. Mater.* **382**, 142 (2015).
32. V. A. Chizhikov and V. E. Dmitrienko, *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 155601 (2017).
33. F. J. dos Santos, M. dos Santos Dias, and S. Lounis, *Phys. Rev. B* **102**, 104436 (2020).
34. S. V. Grigoriev, S. V. Maleyev, A. I. Okorokov et al., *Phys. Rev. B* **74**, 214414 (2006).
35. S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz et al., *Science* **323**, 915 (2009).
36. W. Münzer, A. Neubauer, T. Adams et al., *Phys. Rev. B* **81**, 041203 (2010).
37. T. Adams, S. Mühlbauer, C. Pfleiderer et al., *Phys. Rev. Lett.* **107**, 217206 (2011).
38. X. Z. Yu, N. Kanazawa, Y. Onose et al., *Nature Mat.* **10**, 106 (2011).
39. S. Seki, X. Z. Yu, S. Ishiwata, and Y. Tokura, *Science* **336**, 198 (2012).
40. T. Adams, A. Chacon, M. Wagner et al., *Phys. Rev. Lett.* **108**, 237204 (2012).
41. S. Seki, J.-H. Kim, D. S. Inosov et al., *Phys. Rev. B* **85**, 220406 (2012).
42. U. K. Rößler, A. A. Leonov, and A. N. Bogdanov, *J. Phys.: Conf. Ser.* **303**, 012105 (2011).
43. M. C. Ambrose and R. L. Stamps, *New J. Phys.* **15**, 053003 (2013).
44. D. B. Litvin, *Magnetic Group Tables: 1-, 2-, and 3-Dimensional Magnetic Subperiodic Groups and Magnetic Space Groups*, International Union of Crystallography (2013).
45. P. Bak and M. H. Jensen, *J. Phys. C* **13**, L881 (1980).
46. O. Nakanishi, A. Yanase, A. Hasegawa, and M. Kataoka, *Sol. St. Comm.* **35**, 995 (1980).
47. M. Tanaka, H. Takayoshi, M. Ishida, and Ya. Endoh, *J. Phys. Soc. Jpn* **54**, 2970 (1985).
48. M. Ishida, Ya. Endoh, S. Mitsuda et al., *J. Phys. Soc. Jpn* **54**, 2975 (1985).
49. V. Dmitriev, D. Chernyshov, S. Grigoriev, and V. Dyadkin, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 366005 (2012).
50. S. V. Grigoriev, N. M. Potapova, S.-A. Siegfried et al., *Phys. Rev. Lett.* **110**, 207201 (2013).
51. K. Shibata, X. Z. Yu, T. Hara et al., *Nature Nanotech.* **8**, 723 (2013).
52. V. Dyadkin, K. Prša, S. V. Grigoriev et al., *Phys. Rev. B* **89**, 140409 (2014).
53. В. Е. Дмитриенко, В. А. Беляков, *ЖЭТФ* **78**, 1568 (1980) [V. E. Dmitrienko and V. A. Belyakov, *Sov. Phys. JETP* **51** 787 (1980)].
54. В. Н. Нарожный, В. Н. Красноруссский, *ЖЭТФ* **143**, 906 (2013) [V. N. Narozhnyi and V. N. Krasnorussky, *JETP* **116**, 785 (2013)].
55. V. N. Narozhnyi and V. N. Krasnorussky, *Phys. Rev. B* **91**, 134403 (2015).
56. A. Bauer, A. Chacon, M. Wagner et al., *Phys. Rev. B* **95**, 024429 (2017).
57. M. Janoschek, M. Garst, A. Bauer et al., *Phys. Rev. B* **87**, 134407 (2013).
58. F. N. Rybakov, A. B. Borisov, S. Blügel, and N. S. Kiselev, *New J. Phys.* **18**, 045002 (2016).
59. P. Milde, L. Köhler, E. Neuber et al., *Phys. Rev. B* **102**, 024426 (2020).
60. T. Adams, M. Garst, A. Bauer et al., *Phys. Rev. Lett.* **121**, 187205 (2018).
61. D. Lamago, R. Georgii, C. Pfleiderer, and P. Böni, *Physica B* **385-386**, 385 (2006).
62. A. Bauer and C. Pfleiderer, *Phys. Rev. B* **85**, 214418 (2012).

ДИНАМИКА ДОМЕННЫХ СТЕНОК В КИРАЛЬНЫХ МАГНЕТИКАХ

Е. Г. Галкина^a, *Б. А. Иванов*^{b,c,d*}, *Н. Е. Кулагин*^e, *Л. М. Лерман*^{f,g}, *И. А. Ястремский*^c

^a *Институт физики Национальной академии наук Украины
03028, Киев, Украина*

^b *Институт магнетизма Национальной академии наук и Министерства образования и науки Украины
03142, Киев, Украина*

^c *Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко
03127, Киев, Украина*

^d *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»
119049, Москва, Россия*

^e *Институт физической химии и электрохимии им. А. Н. Фрумкина Российской академии наук
119071, Москва, Россия*

^f *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
603155, Нижний Новгород, Россия*

^g *Нижегородский национальный исследовательский университет им. Н. И. Лобачевского,
Научный центр «Математика технологий будущего»
603950, Нижний Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 4 декабря 2020 г.,
после переработки 4 декабря 2020 г.
Принята к публикации 7 декабря 2020 г.

Теоретически исследовано движение доменных стенок в киральных магнетиках, для которых имеет место нарушение симметрии относительно пространственной инверсии. Такие стенки называют доменными стенками Дзялошинского [22], для них экспериментально обнаружены уникальные динамические свойства. Для киральных ферромагнетиков и антиферромагнетиков найдены нелинейные режимы движения стенок с немалой скоростью, вплоть до предельной. Динамика стенок в антиферромагнетиках допускает аналитическое описание, в то время как для ферромагнетиков необходимо использовать численный анализ. Для ферромагнетиков получены простые приближенные формулы, которые с высокой точностью описывают динамические характеристики стенок во всей области их существования. Определены законы дисперсии стенок, т.е. зависимости энергии стенки от ее импульса. Для ферромагнетиков с чисто одноосной анизотропией предельная скорость стенки определяется исключительно киральным взаимодействием и обращается в нуль, если это взаимодействие отсутствует. Для антиферромагнетиков роль кирального взаимодействия не столь очевидна: структура движущейся стенки, как и в стандартных моделях антиферромагнетиков, может быть получена преобразованием Лоренца с избранной скоростью, равной скорости магнонов на линейном участке спектра, но закон дисперсии более сложный и не описывается лоренц-инвариантными выражениями.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040088

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование киральных магнетиков, в которых нарушена симметрия спиновой системы относительно пространственной инверсии, было начато в классических работах Дзялошинского [1,2]. При феноме-

* E-mail: bor.a.ivanov@gmail.com

нологическом описании таких магнетиков плотность энергии содержит вклады, линейные по градиентам намагниченности вида $w_D = \gamma_{ikl} M_i (\partial M_k / \partial x_l)$. В терминах атомных спинов киральные инварианты получаются при учете антисимметричного взаимодействия вида $(\mathbf{d}_{1,2} [\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2])$, где \mathbf{S}_1 и \mathbf{S}_2 — спины соседних атомов, направление вектора $\mathbf{d}_{1,2}$ определяется симметрией кристалла. В зависимости от распределения векторов $\mathbf{d}_{1,2}$ для пар соседних спинов в кристалле такое взаимодействие (взаимодействие Дзялошинского) может приводить или к появлению киральных инвариантов, или к неколлинеарности спинов подрешеток антиферромагнетиков и появлению слабого ферромагнетизма [3–6]. Микроскопическое обоснование существования антисимметричного взаимодействия пары спинов предложил Мория [7]; и в настоящее время подобные слагаемые принято называть взаимодействием Дзялошинского – Мория.

Киральные магнетики долгое время ассоциировались с кристаллическими материалами, решетка которых не имеет центра симметрии, например MnSi, FeCoSi, FeGe с кристаллической группой B20, см., например, недавний обзор [8]. Исследования Дзялошинского [1, 2] были связаны с анализом спиральных структур с длинным периодом, которые были обнаружены в прошлом столетии и исследовались многими авторами [9–11].

В текущем столетии обнаружены новые интересные свойства киральных магнетиков, в связи с чем значительно вырос интерес к этим материалам. Было обнаружено, что взаимодействие Дзялошинского может быть получено практически для всех магнетиков, если приготовить их в виде сверхтонких (толщина менее 10 нм) пленок на немагнитной подложке. Для таких систем понижение симметрии обусловлено поверхностными эффектами, анизотропией контакта магнетик–подложка [12]. В этом случае плотность энергии взаимодействия Дзялошинского определяется инвариантом

$$M_z (\nabla \cdot \mathbf{M}) - (\mathbf{M} \cdot \nabla) M_z,$$

где ось z выбрана перпендикулярно поверхности пленки. Если в качестве подложки выбрать пленку немагнитного металла с сильным спин-орбитальным взаимодействием (платина, тантал), то можно получить достаточно высокие значения константы взаимодействия Дзялошинского [13, 14].

Нарушение киральной симметрии является неизбежным свойством нанопленок магнетиков, и киральные магнетики могут рассматриваться как стандартные материалы нанопизики магнетиков.

Даже если подобные вклады в энергию не так велики, как для некоторых тяжелых металлов, их роль следует оценить и обсудить. Для киральных магнетиков были обнаружены устойчивые состояния с нетривиальной топологией. Как пример, отметим топологические солитоны — скирмионы и скирмионные решетки [15, 16], киральные магнитные поплавки (chiral magnetic bobbars) [17], монополи (ежи) [18, 19] и многие другие, см. обзоры [20, 21].

Важно также, что для тонких пленок с достаточно сильным взаимодействием Дзялошинского возможно движение доменных стенок (их принято называть доменными стенками Дзялошинского [22]) с предельно высокими для ферромагнетиков скоростями (сотни м/с) [23–25]. Это свойство доменных стенок подчеркнуто в названии статьи Арне Братааса [26] «Spintronics: chiral domain walls move faster» (Спинтроника: киральные доменные стенки движутся быстрее). Возможность реализации движения доменных стенок с немалой скоростью в магнитных пленках толщиной порядка нанометров важна для приложений, в частности, систем записи информации [27, 28]. Поэтому поиск ферромагнетиков с высоким значением предельной скорости доменных стенок представляет собой важную проблему, обсуждению которой посвящено большое число работ, см. [29–32]. Не менее интересен и чисто теоретический аспект нелинейной динамики, прежде всего, динамики солитонов различного типа.

Настоящая работа посвящена теоретическому анализу динамики доменных стенок в тонких пленках киральных магнетиков, ферромагнетиков и антиферромагнетиков. Для ферромагнетиков на основе численного анализа построено простое приближенное решение, позволяющее описать структуру стенки в ферромагнетике и ее динамические характеристики, такие как зависимость энергии стенки от ее скорости или импульса. Показано, что для антиферромагнетиков наличие взаимодействия Дзялошинского нарушает стандартную лоренц-инвариантность спиновой динамики. Однако анализ движения стенки может быть проведен в достаточно полной мере. Оказалось, что многие свойства доменных стенок для лоренц-инвариантных моделей антиферромагнетиков сохраняются и для киральных антиферромагнетиков. В частности, изменение структуры стенки при движении сводится к лоренцевскому сокращению ее толщины. Кроме того, как и для стандартных моделей антиферромагнетиков, существуют две ветви зависимости энергии доменных стенок от их

импульса, одной из которых отвечают устойчивые стенки, а второй — неустойчивые.

2. МОДЕЛИ КИРАЛЬНЫХ МАГНЕТИКОВ

Динамика намагниченности ферромагнетиков описывается известным уравнением Ландау–Лифшица [33] (см. также монографию [34]), которое обычно записывается для намагниченности:

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\gamma[\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{eff}] + \mathbf{R}, \quad \mathbf{H}_{eff} = -\frac{\delta W[\mathbf{M}]}{\delta \mathbf{M}}, \quad (1)$$

где $\gamma = g\mu_B/\hbar$ — гиромагнитное отношение, g — фактор Ланде (g -фактор), μ_B — модуль магнетона Бора, $\gamma \approx 2.8$ МГц/Э при $g = 2$. Эффективное поле \mathbf{H}_{eff} определяется как вариационная производная энергии ферромагнетика $W = W[\mathbf{M}]$, записанной в виде функционала плотности намагниченности $\mathbf{M} = \mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$. Слагаемое \mathbf{R} описывает диссипацию в системе. Обычно это слагаемое выбирается в форме Гильберта,

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_G = \frac{\alpha_G}{M_s} \left[\mathbf{M} \times \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} \right],$$

где M_s — намагниченность насыщения. При этом $(\mathbf{M} \cdot \mathbf{R}) = 0$ и длина вектора \mathbf{M} сохраняется, $\mathbf{M}^2 = M_s^2 = \text{const}$. В этом случае удобно использовать нормированный (единичный) вектор $\mathbf{m} = \mathbf{M}/M_s$, $\mathbf{m}^2 = 1$.

Запишем функционал энергии кирального ферромагнетика в простейшем виде, допускающем описание движения доменной стенки,

$$W = \int d\mathbf{r} \left[\frac{A}{2} (\nabla \mathbf{m})^2 + \frac{K}{2} (m_x^2 + m_y^2) - D [m_z (\nabla \cdot \mathbf{m}) - (\mathbf{m} \cdot \nabla) m_z] \right]. \quad (2)$$

Эта энергия включает энергию неоднородного обмена с константой A и чисто одноосную анизотропию с константой $K > 0$ и легкой осью, перпендикулярной к плоскости пленки (плоскости xy); знак минус перед слагаемым с взаимодействием Дзялошинского с константой D выбран для удобства в дальнейшем.

Отметим интересное свойство легкоосного кирального магнетика: наличие взаимодействия Дзялошинского не проявляется в спектре спиновых волн. Закон дисперсии спиновых волн для модели (2) можно представить в виде

$$\omega(k) = \frac{\gamma}{M_s} (K + Ak^2) = \omega_0 (1 + x_0^2 k^2), \quad (3)$$

где активация магнонов $\omega_0 = \gamma H_a$, $H_a = K/M_s$ — поле анизотропии и $x_0 = \sqrt{A/K}$. Отметим, что намагниченность и константу анизотропии для пленок толщиной порядка нанометров можно экспериментально определить с помощью стандартной магнетометрии или резонансными методами. Определение константы неоднородного обмена A и константы Дзялошинского D для таких пленок является более сложной задачей. Одной из проблем является то, что зачастую для определения одной из констант нужно знать и точное значение другой. Независимость спектра спиновых волн легкоосного кирального магнетика от D была использована для определения A путем анализа температурных зависимостей намагниченности сверхтонких киральных ферромагнитных пленок [35].

Без учета диссипативных процессов уравнение Ландау–Лифшица можно записать в лагранжевой форме с лагранжианом вида

$$L[\mathbf{m}] = G - W, \quad G[\mathbf{m}] = \int \mathbf{A}(\partial \mathbf{m}/\partial t) d\mathbf{r},$$

где гироскопическое слагаемое записывается через сингулярную векторную функцию, вектор-потенциал поля монополя Дирака

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{m}), \quad \text{rot}_{\mathbf{m}} \mathbf{A} \propto \mathbf{m},$$

см. [36, 37]. Вектор-потенциал \mathbf{A} определен с точностью до некоторой калибровки, в то время как фиктивное магнитное поле $\text{rot}_{\mathbf{m}} \mathbf{A}$, входящее в уравнение движения, является калибровочно-инвариантным. Для поля монополя можно выбрать выражение

$$\mathbf{A} = \frac{M_s}{\gamma} \frac{(\mathbf{n} \times \mathbf{m})}{(1 + \mathbf{n} \cdot \mathbf{m})}, \quad (4)$$

где \mathbf{n} — произвольный постоянный единичный вектор. Вектор-потенциал поля монополя Дирака имеет сингулярность, для выражения (4) сингулярность (струна Дирака) расположена на полупрямой $\mathbf{m} = -\mathbf{n}$, см. [36, 37].

Можно выписать интегралы движения поля намагниченности ФМ, при этом энергия совпадает со значением функционала $W[\mathbf{M}]$, рассчитанным для данного распределения намагниченности. Импульс поля намагниченности \mathbf{P} можно записать в виде

$$P_i = - \int \mathbf{A}(\partial \mathbf{m}/\partial x_i).$$

Это выражение не обладает калибровочной инвариантностью, и значение импульса зависит от калибровки.

Проблема определения импульса магнитных солитонов является достаточно сложной, см. работы [38–43] и обсуждение ниже для конкретных решений. Поскольку нас интересует движение плоской доменной стенки, т.е. одномерная задача с $\mathbf{m} = \mathbf{m}(x, t)$, отлична от нуля только одна компонента импульса, $\mathbf{P} = P\mathbf{e}_x$. С учетом конкретного выбора вектор-потенциал \mathbf{A} можно записать

$$P = S \frac{M_s}{\gamma} \int \left(\frac{(\mathbf{m} \times \mathbf{n})}{(1 + \mathbf{n} \cdot \mathbf{m})} \cdot \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial x} \right) dx, \quad (5)$$

где $S = LL_y$ — площадь стенки, L и L_y — толщина пленки и ее размер вдоль оси y . Понятно, что значение импульса зависит от калибровки; в частности, если выбрать \mathbf{A} в виде (4), импульс зависит от направления струны Дирака \mathbf{n} .

Кроме энергии и импульса, для анализа магнитных солитонов предельно важно наличие или отсутствие еще одного интеграла движения. Для чисто одноосных магнетиков без киральных свойств имеет место симметрия относительно поворота спинов вокруг оси z , что приводит к сохранению суммарной z -проекции намагниченности,

$$M_z^{(tot)} = \int M_z d\mathbf{r}.$$

Наличие такого интеграла принципиально важно для физики магнитных солитонов.

С одной стороны, сохранение

$$M_z^{(tot)} = \int M_z dx$$

несовместимо с существованием одномерных движущихся топологических солитонов, описывающих в бездиссипативном пределе движение доменных стенок. Действительно, такое движение должно сопровождаться изменением относительных размеров доменов с $M_z = M_s$ и $M_z = -M_s$. Формально, при условии $M_z^{(tot)} = \text{const}$ обращается в нуль величина предельной скорости стенки v_c , т.е. только неподвижные стенки. Величина v_c в одноосном ферромагнетике определяется тем взаимодействием, которое нарушает сохранение суммарной z -проекции намагниченности. Такие взаимодействия могут быть связаны с кристаллической анизотропией в базисной плоскости, магнитным дипольным взаимодействием, а также наличием внешнего магнитного поля, перпендикулярного легкой оси.

Для плоской 180-градусной стенки в достаточно толстой пленке (толщина много больше $x_0 = \sqrt{A/K}$) магнитное дипольное взаимодействие описывается плотностью $2\pi(\mathbf{M}\mathbf{e}_x)^2$, \mathbf{e}_x — орт вдоль

направления движения стенки, которое перпендикулярно легкой оси \mathbf{e}_z . Этот источник движения стенки рассматривали Ландау и Лифшиц в классической работе [33], в которой впервые было рассмотрено движение доменной стенки, а также Уокер [44], который исследовал движение стенки с небольшими скоростями и нашел ее предельную скорость. Для толстых пленок дипольная энергия эквивалентна энергии магнитной анизотропии с осью в базисной плоскости магнетика. Если эти взаимодействия слабые, предельная скорость линейно зависит от характерного параметра («неодноосного» эффективного поля $H_{non-uniaxial}$), $v_c/v_0 \propto H_{non-uniaxial}/H_a$ и мала, здесь и ниже $v_0 = \omega_0 x_0$ — характерная скорость магнонов в модели (3). Таким образом, несохранение $M_z^{(tot)}$ является фактором, способствующим возможности эффективного применения движущихся солитонов типа доменных стенок.

В сверхтонких пленках (толщина которых меньше $x_0 = \sqrt{A/K}$) вклад дипольного взаимодействия подавлен, см. [22, 45]. Создание нанопленок ферромагнетиков с достаточно сильной кристаллической двухосной анизотропией, а также использование сильных магнитных полей в наноприборах является непростой задачей. Однако легко видеть, что взаимодействие Дзялошинского не имеет симметрии относительно поворотов в спиновом пространстве и не сохраняет $M_z^{(tot)}$. Как отмечалось, взаимодействие Дзялошинского может присутствовать в достаточно тонких пленках, при этом значение характерного поля, обусловленного этим взаимодействием, не мало. Это определяет возможность достаточно быстрого движения доменных стенок в киральных магнетиках и открывает перспективы повышения предельной скорости стенки в нанопленках магнетиков.

Интересно отметить, что сохранение $M_z^{(tot)}$ не препятствует движению солитонов другого типа, а именно, локализованных солитонов, для которых вдали от центра солитона намагниченность имеет одно и то же направление, например, $M_z \rightarrow M_s$, $M_{x,y} \rightarrow 0$, см. [46–51]. Такому солитону отвечают двухпараметрические состояния (движущиеся магнонные капли) с фиксированным значением $M_z^{(tot)}$ [46, 48–50]. Они описываются решениями, зависящими от двух параметров, скорости солитона \mathbf{v} и частоты прецессии спинов ω в системе отсчета, движущейся вместе с солитоном со скоростью \mathbf{v} . Эти солитоны можно интерпретировать как связанные состояния большого числа магнонов N с заданным импульсом \mathbf{P} , $N = M_z^{(tot)}/g\mu_B$. Особо важно, что могут существовать неодномерные прецессионные солито-

ны такого типа, и эти солитоны устойчивы относительно коллапса [47–51]. В данном случае роль еще одного, помимо энергии и импульса, интеграла движения абсолютно иная, чем для доменных стенок. Наличие такого интеграла способствует существованию неодномерных магнитных солитонов.

Отметим, что неодномерные магнитные солитоны могут быть устойчивыми и для одноосного кирального магнетика, для которого не сохраняется $M_z^{(tot)}$. Дело в том, что энергия (2), несимметричная относительно поворотов спинов, для двумерного или трехмерного магнетика обладает симметрией относительно одновременного поворота спинов и координат в плоскости xy на один и тот же угол. Такой симметрии соответствует сохранение z -проекции полного момента импульса магнетика

$$J_z^{(tot)} = S_z^{(tot)} + L_z^{(tot)},$$

где $L_z^{(tot)}$ и $S_z^{(tot)} = M_z^{(tot)}/g\mu_B$ — значения соответственно z -проекции момента импульса поля намагниченности (орбитального момента) и полного спина [52]. Для $L_z^{(tot)}$ можно выбрать выражение, согласованное с определением импульса поля намагниченности,

$$L_z^{(tot)} = - \int \varepsilon_{ijz} x_i \mathbf{A} \left(\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial x_j} \right) d\mathbf{r},$$

здесь ε_{ijk} — абсолютный антисимметричный тензор.

Появление киральных свойств тонких магнитных пленок на подложке из тяжелого металла не является свойством только ферромагнетиков. Действительно, инварианты типа (2) квадратичны по степеням намагниченностей, т.е. они допустимы для антиферромагнетиков и ферримагнетиков. Наиболее простое и удобное описание динамики антиферромагнетиков базируется на использовании так называемой сигма-модели (см., например, книги и обзоры [49, 50, 53, 54]). В рамках этого подхода основной динамической переменной при описании антиферромагнетика является нормированный вектор антиферромагнетизма

$$\mathbf{l} = (\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2)/|\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2|,$$

где \mathbf{M}_1 и \mathbf{M}_2 — намагниченности подрешеток. При этом вектор суммарной намагниченности $\mathbf{M} = \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2$ играет роль вспомогательной переменной и выражается простой формулой через \mathbf{l} и $\partial\mathbf{l}/\partial t$. Таким образом, вместо двух уравнений для намагниченностей подрешеток можно использовать одно уравнение для \mathbf{l} .

В отличие от ферромагнетиков, спиновая динамика антиферромагнетика является инерционной. Лагранжиан простейшей версии сигма-модели для антиферромагнетика включает слагаемое, квадратичное по временной производной $(\partial\mathbf{l}/\partial t)^2$, которое можно интерпретировать как кинетическую энергию T и записать в виде

$$T = \frac{A}{2c^2} \int d\mathbf{r} \left(\frac{\partial\mathbf{l}}{\partial t} \right)^2, \quad (6)$$

где c — фазовая скорость магнонов в той области спектра, где их закон дисперсии является линейным,

$$c = \gamma \sqrt{\frac{AH_{ex}}{2M_0}}. \quad (7)$$

Здесь H_{ex} — обменное поле антиферромагнетика, определенное из условия, что для изотропного антиферромагнетика во внешнем поле антиферромагнитный порядок существует (вектор $\mathbf{l} \neq 0$) только при $H_0 < H_{ex}$ и разрушается ($|\mathbf{M}| = 2M_0$ и $\mathbf{l} = 0$) при $H_0 \geq H_{ex}$ (об определении обменного поля см. монографию [53]). Скорость c определяется только обменными взаимодействиями и значительно превышает характерную скорость магнонов для ферромагнетика, например, величину $v_0 = \omega_0 x_0 = \gamma \sqrt{AH_a/M_s}$ для модели (2). Действительно, значение $c/v_0 \sim \sqrt{H_{ex}/H_a}$ и содержит отношение энергии однородного обмена к энергии анизотропии. Это свойство является важным примером обменного усиления динамических параметров антиферромагнетиков.

Для «чистого» антиферромагнетика лагранжиан включает только кинетическую энергию (6) и потенциальную энергию W , $L^{(AFM)}[\mathbf{l}] = T - W$. Заметим, что наличие сильного магнитного поля приводит к появлению в лагранжиане антиферромагнетика специфических гироскопических слагаемых, линейных по компонентам $\partial\mathbf{l}/\partial t$. Гироскопические слагаемые в принципе могут возникать и для некоторых антиферромагнетиков, допускающих слабый ферромагнетизм, но они запрещены для киральных магнетиков, см. [53]. Выражение для статической энергии W кирального антиферромагнетика в терминах единичного вектора \mathbf{l} имеет такую же структуру, как для ферромагнетика, и может быть получено из формулы (2) заменой $\mathbf{m} \rightarrow \mathbf{l}$.

Важно заметить, что в обычных (не киральных) антиферромагнетиках пространственные и временные производные вектора \mathbf{l} входят в лагранжиан в комбинации $(\partial\mathbf{l}/\partial t)^2 - c^2(\nabla\mathbf{l})^2$. Наличие такой формальной лоренц-инвариантности значительно упрощает анализ динамики солитонов, см. некоторые

примеры в работах [55, 56] и недавний обзор [54]. В частности, если известно решение для неподвижного солитона любого типа, движущееся решение можно получить преобразованием Лоренца с характерной скоростью c . В частности, предельная скорость любого солитона совпадает со значением c . Однако для киральных магнетиков наличие слагаемых, линейных по градиентам \mathbf{l} , разрушает эту лоренц-инвариантность, см. [57]. В частности, это приводит к тому, что предельная скорость двумерных топологических солитонов (скирмионов) в киральных антиферромагнетиках меньше, чем c [57]. С другой стороны, выражения для интересующих нас интегралов движения, энергии и импульса солитона определяются производными $\partial L/\partial(\partial\mathbf{l}/\partial t)$, и киральные инварианты не изменяют их формы.

Как и в любой лоренц-инвариантной теории, энергия поля вектора \mathbf{l} для антиферромагнетика является суммой кинетической и потенциальной энергий,

$$E^{(AFM)} = T + W.$$

Величина импульса (на единицу площади стенки) не содержит вклада кирального инварианта и определяется выражением, характерным для лоренц-инвариантной теории

$$P^{(AFM)} = -\frac{A}{c^2} \int \left(\frac{\partial \mathbf{l}}{\partial t} \cdot \frac{\partial \mathbf{l}}{\partial x} \right) dx. \quad (8)$$

Заметим, однако, что наличие кирального инварианта приводит к нарушению стандартных для лоренц-инвариантной теории соотношений между импульсом и энергией, см. ниже разд. 4.

3. ДИНАМИКА ДОМЕННОЙ СТЕНКИ В ФЕРРОМАГНЕТИКЕ

Для конкретного анализа солитонных решений удобно использовать угловые переменные для единичного вектора \mathbf{m} (или вектора \mathbf{l} для антиферромагнетика), например

$$\begin{aligned} m_z &= \cos \theta, & m_x &= \sin \theta \cos \varphi, \\ m_y &= \sin \theta \sin \varphi. \end{aligned} \quad (9)$$

Приведем явный вид функционала энергии кирального магнетика (2) через эти угловые переменные для одномерного решения:

$$\begin{aligned} W[\theta, \varphi] &= \int dx \left[\frac{A}{2} [(\theta')^2 + (\varphi')^2 \sin^2 \theta] + \frac{K}{2} \sin^2 \theta, \right. \\ &\quad \left. - D(\theta' \cos \varphi - \varphi' \sin \theta \cos \theta \sin \varphi) \right]. \quad (10) \end{aligned}$$

Здесь и далее штрихом обозначена производная по ξ , все величины приводятся на единицу площади стенки. Движущаяся 180-градусная плоская доменная стенка описывается решениями типа простой волны, для которой

$$\theta = \theta(\xi), \quad \varphi = \varphi(\xi), \quad \xi = x - vt,$$

v — скорость стенки. Уравнения для θ и φ принимают вид системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Ось z является легкой осью магнетика, т. е. $\theta = 0$ и $\theta = \pi$ по обе стороны от доменной стенки. Для определенности, будем считать что $\theta \rightarrow \pi$ при $\xi \rightarrow +\infty$ и $\theta \rightarrow 0$ при $\xi \rightarrow -\infty$. Уравнения для θ и φ принимают вид

$$\begin{aligned} A\theta'' - \sin \theta \cos \theta [K + A(\varphi')^2] - \\ - 2D\varphi' \sin^2 \theta \sin \varphi + v(M_s/\gamma)\varphi' \sin \theta = 0, \quad (11) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A(\varphi' \sin^2 \theta)' + 2D\theta' \sin^2 \theta \sin \varphi - \\ - v(M_s/\gamma)\theta' \sin \theta = 0. \quad (12) \end{aligned}$$

Эта система уравнений формально эквивалентна механической задаче о движении материальной точки по поверхности сферы при наличии двух гироскопических слагаемых различной природы, одно из которых пропорционально параметру киральности D , а другое — скорости стенки v . Здесь переменная ξ играет роль времени, константа A — роль массы, а скорость v является параметром, который, в частности, определяет характер особых точек уравнений. Эта задача имеет две степени свободы, для нее можно построить один первый интеграл

$$Q = \frac{A}{2} [(\theta')^2 + (\varphi')^2 \sin^2 \theta] - \frac{K}{2} \sin^2 \theta, \quad (13)$$

на решении типа стенки значение $Q = 0$. Доменной стенке отвечает гетероклиническая сепаратрисная траектория, соединяющая два положения равновесия, $\mathbf{m} = \mathbf{e}_z$, $\partial \mathbf{m}/\partial \xi = 0$ и $\mathbf{m} = -\mathbf{e}_z$, $\partial \mathbf{m}/\partial \xi = 0$. Второй интеграл движения, находящийся в инволюции к (13), для системы (11), (12) построить не удастся. Как будет показано ниже, данная механическая задача (в отличие, например, от задачи Уокера, которая описывает движение стенки в двухосном ферромагнетике) не является интегрируемой. В этом случае ее общий анализ может быть проведен только численно.

Исключением является случай неподвижной доменной стенки ($v = 0$). В этом случае легко найти два решения, которым соответствуют постоянные значения $\varphi = 0$ и $\varphi = \pi$. Для обоих решений

профиль стенки $\theta(\xi)$ не зависит от выбора значения угла φ и определяется стандартной формулой

$$\cos \theta(\xi) = -\operatorname{th}(\xi/x_0), \quad x_0 = \sqrt{A/K}, \quad (14)$$

где x_0 определяет толщину доменной стенки. Далее для определенности считается, что $\theta(\xi \rightarrow -\infty) \rightarrow 0$, $\theta(\xi \rightarrow +\infty) \rightarrow \pi$, то есть в стенке $\theta'(\xi) \geq 0$.

Легко показать, что энергия неподвижной доменной стенки определяется формулой $E(v=0) = 2E_0 - \pi D \cos \varphi_0$, где $E_0 = \sqrt{AK}$ и φ_0 обозначает два значения угла φ в стенке с $v=0$, $\varphi_0 = 0$ или $\varphi_0 = \pi$. Легко видеть, что при $D > D_c$, где критическое значение

$$D_c = \frac{2}{\pi} \sqrt{AK}, \quad (15)$$

энергия стенки с минимальной энергией становится отрицательной. Действительно, при $D > D_c$ термодинамически устойчива спиральная структура. Однородное состояние с $\theta = 0, \pi$, в котором может существовать уединенная стенка, является основным состоянием системы только при $D < D_c$, и далее ограничимся исследованием таких магнетиков. Отметим, однако, что магنونные частоты вещественны при любом значении D , т. е. при $D > D_c$ однородное состояние устойчиво относительно малых возмущений, т. е. является метастабильным.

Убывание отклонения намагниченности от равновесного значения вдали от солитонов любого типа (доменных стенок или локализованных солитонов) является экспоненциальным, $\sin \theta \propto \exp(-\kappa|\xi|)$ при $\xi \rightarrow \pm\infty$. Это поведение проще всего исследовать с помощью аналитического продолжения спектра спиновых волн $\omega(k)$ в область комплексных волновых векторов и частот, $k \rightarrow ik$, $\omega \rightarrow ikv$ [58, 59]. В общем случае для моделей ферромагнетиков и ферримагнетиков существуют две характерные скорости, $v^{(-)}$ и $v^{(+)}$, $v^{(-)} < v^{(+)}$. При скоростях солитона $0 \leq |v| < v^{(-)}$ величина κ вещественная. В терминах фазового пространства системы уравнений (11), (12) это означает, что положениям равновесия $\theta = 0$ или $\theta = \pi$ отвечают особые точки типа седло. При $v^{(-)} < v < v^{(+)}$ величина κ имеет ненулевую мнимую часть, $\kappa = \kappa' \pm i\kappa''$, т. е. асимптотика содержит затухающие осцилляции и положения равновесия представляют собой особые точки типа седло-фокус. Если же $|v| > v^{(+)}$, то величина κ чисто мнимая, т. е. волновой вектор вещественный и солитоны типа простой волны отсутствуют. Скорость $v^{(+)}$ совпадает с минимальной фазовой скоростью магнов, т. е. отсутствие солитонных решений со скоростями $|v| > v^{(+)}$ отвечает естественному условию отсутствия черенковского излучения магнов.

Для уокеровского решения в двухосном ферромагнетике Шлеман [58] отметил, что величина $v^{(-)}$ совпадает с предельной скоростью доменной стенки. Это предположение использовалось при анализе различных магнетиков со сложной магнитной структурой [59]. Впоследствии было показано, что совпадение $v^{(-)}$ и v_c является в некотором смысле случайным и обусловлено тем, что система уравнений (11), (12) для задачи Уокера является точно интегрируемой гамильтоновой системой. Для этой задачи был построен дополнительный интеграл движения, находящийся в инволюции к (13) [60–63]. Детальный анализ общих свойств фазового пространства гамильтоновых интегрируемых систем с двумя степенями свободы показал [64–66], что если для таких систем особые точки являются седло-фокусами, что имеет место при $v^{(-)} < |v| < v^{(+)}$, то все траектории, выходящие из некоторого седло-фокуса, в него же и возвращаются. При этом не существует траекторий, идущих из одного седло-фокуса в другой, т. е. решения типа стенок отсутствуют. Гетероклинические сепаратрисные фазовые траектории, описывающие стенки, существуют только для особых точек типа седло, что соответствует условию $|v| < v^{(-)}$. Таким образом, для всех интегрируемых систем предельная скорость стенки совпадает с $v^{(-)}$.

Если же для некоторого магнетика уравнения для $\theta(\xi)$, $\varphi(\xi)$ не обладают свойством точной интегрируемости, то величина предельной скорости доменной стенки может не совпадать с $v^{(-)}$, она может быть больше, чем $v^{(-)}$. В частности, такое поведение найдено для доменной стенки в ферромагнетике во внешнем магнитном поле, перпендикулярном оси легкого намагничивания [67]. Рассмотренный в данной работе киральный ферромагнетик с одноосной анизотропией является ярким примером таких систем. Для него аналитическое продолжение (3) дает $ikv = \omega_0(1 - x_0^2\kappa^2)$, т. е.

$$2x_0\kappa = iv/v_0 \pm \sqrt{(v/v_0)^2 - 4}, \quad (16)$$

где использовано введенное выше значение $v_0 = \gamma x_0 K/M_s = \gamma H_a x_0 = \omega_0 x_0$. Таким образом, значения $v^{(-)} = 0$ и $v^{(+)} = 2v_0$, т. е. монотонное поведение решения, при котором $M_x, M_y \propto \exp(-\xi/x_0)$, см. (14), имеет место только при $v = 0$.

Для численного исследования удобно использовать безразмерные переменные, измеряя ξ в единицах x_0 , скорость v в единицах v_0 , а константу Дзялошинского D в единицах $E_0 = \sqrt{AK}$. Таким образом, при данной скорости характер решения определяется одним безразмерным параметром D/E_0 (напомним, что критическое значение $D_c/E_0 = 2/\pi$).

Численное построение решений, описывающих движущуюся доменную стенку, упрощается тем, что в рамках уравнений (11), (12) они имеют определенную симметрию, а именно, $\cos \theta(\xi)$ является нечетной, а $\varphi(\xi)$ и $\sin \theta(\xi)$ являются четными функциями ξ . Следовательно, фазовые траектории, определяющие доменные стенки, проходят через поверхность симметрии $\cos \theta = 0$, $\varphi' = 0$. У состояния равновесия $\theta = 0$ имеется двумерное неустойчивое многообразие, т. е. существует однопараметрическое семейство траекторий, выходящих из него при $\xi \rightarrow -\infty$. Для всех этих траекторий существует точка, в которой $\cos \theta = 0$. Эти траектории можно параметризовать значением величины φ_{out} . Чтобы найти решение типа стенки, надо так подобрать значение величины φ_{out} , чтобы в той же точке ξ , где $\cos \theta = 0$, одновременно обращалась бы в нуль величина $\varphi' = 0$. Для этого, фактически, надо решить одно уравнение с одним неизвестным, что легко реализовать численно. Различные примеры решения задач о движении доменных стенок можно найти в работах [67–69]. В данной работе использовался надежный и простой метод продолжения по параметру (метод продолжения Келлера [70]). В результате применения этого метода для каждого значения D/E_0 , т. е. для различных магнетиков в рамках модели (2), можно построить все многообразие доменных стенок. Если решение найдено, можно вычислить интегралы движения, энергию E и импульс P доменной стенки. Обсудим результаты анализа структуры, энергии и импульса доменных стенок.

Прежде всего, отметим, что одному значению скорости соответствуют два типа стенок с различными энергиями, т. е. зависимость $E = E(v)$ изображается замкнутой кривой, содержащей две ветви — верхнюю и нижнюю, см. рис. 1. Это свойство является общим для известных нам стенок в различных ферромагнетиках, в частности, блоховской и неелевской ветвям стенок для уокеровского решения для двухосного ферромагнетика. Эти ветви начинаются с описанных выше доменных стенок с $v = 0$. Стенка с энергией $E(v = 0) = 2E_0 - \pi D$ и значением $\varphi = 0$ соответствует наименьшему значению энергии и нижней ветви, а стенка с $E(v = 0) = 2E_0 + \pi D$ и $\varphi = \pi$ — наибольшему значению энергии и верхней ветви зависимости $E = E(v)$. Напомним, что значения всех экстенсивных величин, таких как энергия или импульс, приводятся на единицу площади стенки.

При увеличении скорости движения стенки энергия для стенок нижней ветви увеличивается, а для стенок верхней ветви уменьшается. Анализ показал,

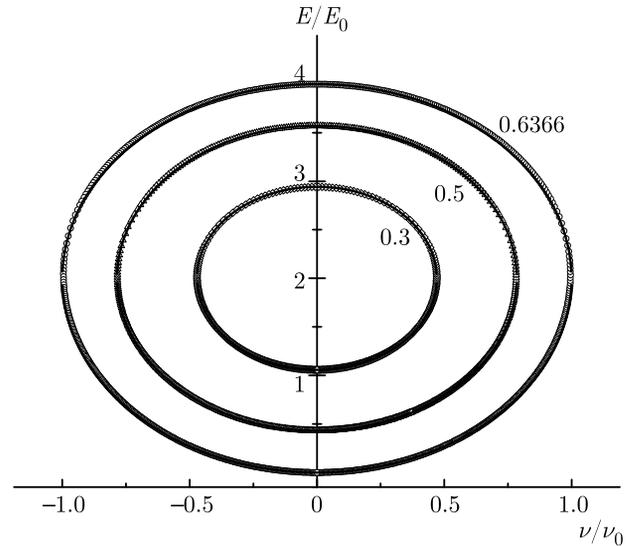


Рис. 1. Зависимость энергии доменной стенки (в единицах E_0) от ее скорости (в единицах v_0) при различных значениях D/E_0 (указаны около кривых, значение $D/E_0 = 0.6366$ близко к критическому, $D_c/E_0 = 2/\pi$). Символы — данные численного счета, линии проведены согласно приближенной формуле (21)

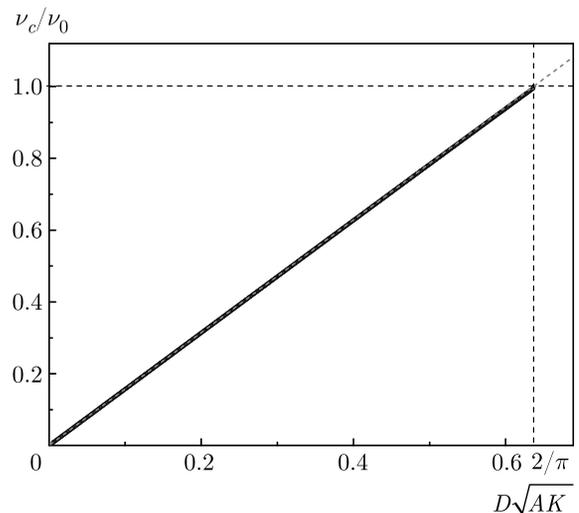


Рис. 2. Зависимость предельной скорости доменной стенки v_c (в единицах v_0) от константы Дзялошинского D (в единицах E_0). Символы — данные численного счета, штриховая красная прямая линия отвечает линейной зависимости (16)

что решения типа доменных стенок исчезают при достаточно больших значениях параметра $|v|$, т. е. возможные значения скоростей стенки v не могут превышать предельного значения v_c , $|v| \leq v_c$. При $v = v_c$ две ветви зависимости $E = E(v)$ сливаются, т. е. доменные стенки с $v = v_c$ идентичны, см. рис. 1.

Оказалось, что во всей допустимой области значений $D \leq D_c$ зависимость предельной скорости от константы Дзялошинского с очень высокой точностью является линейной, см. рис. 2.

Эту зависимость можно описать формулой

$$v_c = \frac{\pi\gamma D}{2M_s} = v_0 \frac{D}{D_c}, \quad (17)$$

т. е. при $D = D_c$ значение $v_c = v_0$ и составляет половину минимальной фазовой скорости магнонов.

При вычислении импульса стенки P имеет место проблема, связанная с сингулярностью вектор-потенциала \mathbf{A} . Положение сингулярной точки для потенциала вида (4) определяется направлением вектора \mathbf{n} (струны Дирака), $\mathbf{m}_{sing} = -\mathbf{n}$. Доменную стенку можно наглядно представить как траекторию на сфере $\mathbf{m}^2 = 1$, выходящую из одного полюса (скажем, $\mathbf{m} = -\mathbf{e}_z$) и входящую в другой ($\mathbf{m} = \mathbf{e}_z$). Величину P можно записать в виде интеграла по этой траектории:

$$P = - \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{A}(\mathbf{m})(\partial\mathbf{m}/\partial\xi) d\xi = - \int_{\mathbf{m}=\mathbf{e}_z}^{\mathbf{m}=-\mathbf{e}_z} \mathbf{A}(\mathbf{m}) d\mathbf{m}. \quad (18)$$

Для данного магнетика при любом выборе \mathbf{n} хотя бы одна из траекторий, отвечающих стенке с некоторой скоростью $-v_c \leq v \leq v_c$ попадет на такую сингулярную точку. Кроме того, возникает зависимость P от выбора калибровки.

Прямое вычисление импульса на основе формулы (5) и численного интегрирования решения показало, однако, что для таких траекторий, которые не попадают в малую окрестность сингулярной точки \mathbf{m}_{sing} (обычно это значения $\Delta v \leq 0.01v_0$), интеграл легко находится и импульс является регулярной функцией скорости доменной стенки. Реально использовались расчеты для двух направлений \mathbf{n} , а именно, $\mathbf{n} = (0, 1, 0)$ и $\mathbf{n} = (1, 0, 0)$. Далее для восстановления зависимости импульса от скорости можно использовать тот факт, что разность величин P для двух различных стенок, P_1 и P_2 , определяется интегралом по замкнутому контуру

$$\Delta P = P_2 - P_1 = \oint \mathbf{A}(\mathbf{m}) d\mathbf{m}.$$

По теореме Стокса этот интеграл равен потоку векторного поля $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$ через область, ограниченную этими двумя траекториями, т. е. ΔP является калибровочно-инвариантной величиной [40, 41]. С

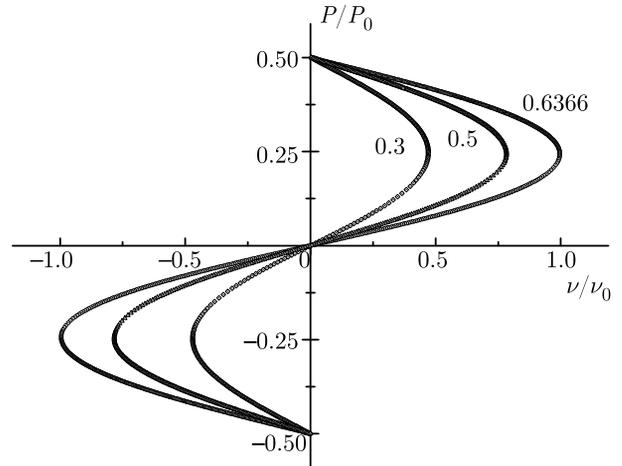


Рис. 3. Полученная численно зависимость импульса доменной стенки (в единицах P_0) от ее скорости (в единицах v_0) для тех же значений D/E_0 , что на рис. 1

учетом того, что $\text{rot } \mathbf{A} = \mathbf{m}M_s/\gamma$, эта величина определяется интегралом по участку сферы,

$$\Delta P = (M_s/\gamma) \int \sin \theta d\theta d\varphi.$$

Интеграл для ΔP , в отличие от содержащего вектор-потенциал \mathbf{A} интеграла для P , является изотропным в плоскости m_x, m_y . В силу этих соображений можно найти разность значений импульса при разных направлениях струны. В частности, для двух использованных выше направлений значения импульса для некоторой стенки должны различаться на величину $\pi M_s/\gamma$. Это позволяет восстановить значения импульса для стенок с траекториями, проходящими вблизи сингулярности для одной из калибровок, за счет использования данных для другой калибровки. Найденная таким образом зависимость $P(v)$ представлена на рис. 3. Для наглядности использовано условие, что стенке с минимальной энергией ($v = 0, \varphi = 0$) отвечает значение $P = 0$.

Разность импульсов неподвижных стенок верхней и нижней ветвей отвечает половине площади сферы и равна величине $P = 2\pi M_s/\gamma = P_0/2$, а зависимость энергии доменной стенки от ее импульса является периодической,

$$E(P + P_0) = E(P), \quad P_0 = 4\pi M_s/\gamma. \quad (19)$$

Значение периода P_0 для стенки в киральном магнетике в два раза больше, чем для ферромагнетика с двухосной анизотропией. Заметим, что значения периода по импульсу для стенки в чисто од-

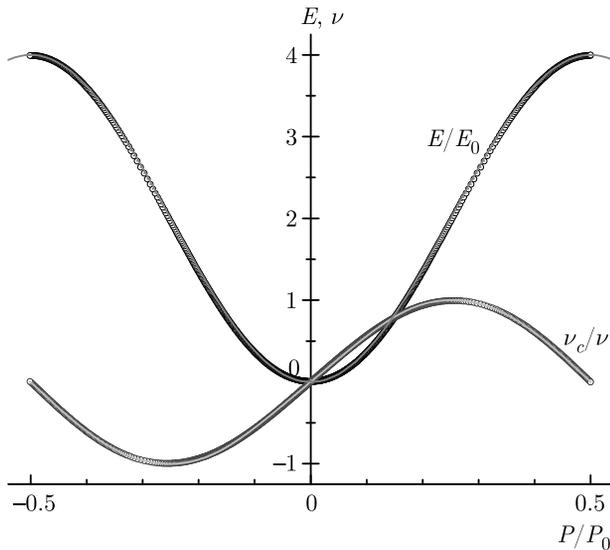


Рис. 4. Зависимость энергии (в единицах E_0) и скорости (в единицах v_c) доменной стенки от ее импульса (в единицах P_0), символы — данные численного расчета, сплошная красная линия — зависимость $E(P)$, найденная с помощью полученной ниже приближенной формулы (22). Голубая линия — зависимость $v(P)$, построенная дифференцированием найденной численно функции $E(P)$ на основе уравнения Гамильтона $v = dE(P)/dP$

номерном магнетике (спиновой цепочке) можно записать как $P_{0,chain} = 4\pi\hbar s/a$, где s — спин атома и a — расстояние между спинами в цепочке. Чтобы привести в соответствие данные для объемного магнетика и цепочки использовано соотношение $M_s = g\mu_B s/aS_0$, где объем, приходящийся на один спин, записан как aS_0 , S_0 — площадь поперечного сечения кристалла, приходящаяся на одну цепочку, а также учтено, что $\gamma = g\mu_B/\hbar$. Интересно отметить, что для спина $s = 1/2$ величина периода совпадает с размером первой зоны Бриллюэна атомной цепочки.

Зависимость $E(P)$ (закон дисперсии стенки) представлена на рис. 4. Для демонстрации правильности выбора формы выражения для импульса и контроля точности счета построена также зависимость $v(P)$, найденная дифференцированием численной зависимости $E(P)$ и уравнения Гамильтона $v = dE(P)/dP$. Рисунок 4 демонстрирует хорошее согласие всех данных.

Принципиально важно, что зависимость $E(P)$ для доменных стенок в ферромагнетике в пределах одного периода однозначная, т. е. каждому значению импульса отвечает только одно значение энергии. Фактически, верхней и нижней ветвям функции $E(v)$ соответствуют различные значения им-

пульса P , что обуславливает устойчивость всех стенок, в том числе относящихся к верхней ветви двузначной зависимости $E(v)$, см. рис. 1.

Численный анализ задачи позволяет установить основные закономерности динамики доменных стенок в одноосном киральном ферромагнетике для каждого конкретного значения параметра D/E_0 . Однако весьма желательно иметь простые аналитические формулы, описывающие динамические характеристики стенок. Такая возможность всегда присутствует в том случае, когда взаимодействие, разрушающее сохранение $M_z^{(tot)}$, является слабым по сравнению с одноосной анизотропией, $H_{non-uniaxial} \ll H_a$. Если $H_{non-uniaxial} = 0$, то $v_c = 0$ и стенка не может двигаться, при этом структура доменной стенки $\theta(\xi)$ описывается формулой для неподвижной стенки, а значение угловой переменной $\varphi(\xi) = \text{const}$ может быть произвольным. Если же $H_{non-uniaxial}$ не равно нулю, но $H_{non-uniaxial}/H_a \ll 1$, предельная скорость, которая линейно зависит от характерного параметра «неодноосности», мала. При малых $H_{non-uniaxial}$ структура доменной стенки $\theta(\xi)$ приближенно описывается той же формулой (14), что для неподвижной стенки. Можно также считать, что угловая переменная $\varphi(\xi)$ медленно меняется в пределах стенки, и можно заменить ее на постоянное значение при расчете энергии и импульса стенки. Естественно, при этом энергия стенки слабо зависит от параметра $H_{non-uniaxial}/H_a \ll 1$ и от скорости стенки. Подробный анализ применимости этих приближений проведен для неинтегрируемой задачи о движении доменной стенки в ферромагнетике при наличии внешнего поля H_{\perp} , перпендикулярного легкой оси [67]. Как и ожидалось, все эти приближения хорошо соответствуют данным численного анализа при $H_{\perp} < 0.4H_a$.

В нашем случае одноосного кирального магнетика имеет место интересная особенность: описанные выше приближения справедливы не только при малых D , но и для всех актуальных значений $D \leq D_c$ (напомним, что при $D = D_c$ энергия стенки E обращается в нуль, так что это значение никак нельзя считать малым). Это позволило построить приближенное решение, найти зависимости энергии и импульса доменной стенки от ее скорости и записать закон дисперсии стенки $E(P)$ в виде простых аналитических функций. Одним из указаний на эту специфику является линейная зависимость предельной скорости от D при всех $D \leq D_c$, см. рис. 2.

Чтобы пояснить эту особенность, обсудим найденную численно структуру доменной стенки в наи-

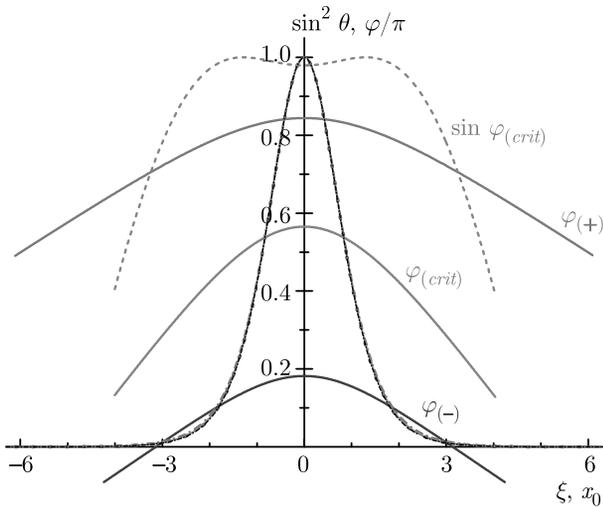


Рис. 5. Распределения намагниченности в доменных стенках, движущихся с разными скоростями, а именно, $v = 0.5v_c$ для нижней и верхней ветвей и $v = v_c$ для кирального ферромагнетика с максимально возможным значением $D = D_c$. Вид функций $\sin^2 \theta$ для всех трех стенок, а также для случая $v = 0$, представлен разными линиями, так что хорошо видно их почти идеальное совпадение; различия заметны только вдали от центра стенки. Зависимости $\varphi(\xi)$ отмечены как $\varphi(-)$ и $\varphi(+)$ для стенок нижней и верхней ветви с $v = 0.5v_c$ и для $\varphi_{(crit)}$ для стенки $v = v_c$. В последнем случае отклонение $\varphi(\xi)$ от модельного $\varphi = \text{const}$ максимально, однако актуальная величина, $\sin \varphi$ (представлена красной штриховой линией) практически постоянная в пределах доменной стенки ($|\xi| < 3x_0$, когда $\sin^2 \theta < 10^{-2}$)

более критичном случае максимально возможного значения $D = D_c$ при различных значениях скорости $v \leq v_c$ для стенок верхней и нижней ветвей, см. рис. 5. Видно, что при изменении скорости стенки от нуля до предельного значения $v = v_c$ структура доменной стенки $\theta(\xi)$ с высокой точностью такая же, как для чисто одноосной модели; она описывается той же формулой (14), см. рис. 5. Используя выражение для первого интеграла (13), получаем, что в этом случае значение $(\varphi')^2 \sin^2 \theta$ должно быть пренебрежимо мало. По этой причине можно ожидать, что решение описывается с очень высокой точностью в рамках приближения $\varphi = \text{const}$ при всех допустимых значениях параметров задачи, $v \leq v_c$ и $D \leq D_c$. Напомним, что обычно такое условие имеет место только при малых $H_{non-uniaxial}$.

Условие $\varphi = \text{const}$ кажется противоречивым для нашей задачи при немалых D , поскольку из асимптотик решения (16) следует, что вдали от стенки значение $\varphi \sim \kappa'' \xi$, где $\kappa'' = v/(2x_0 v_0)$, и не мало

при немалых скоростях. Эта зависимость видна из численного решения, но области такой асимптотики находятся далеко от центра доменной стенки. Как следует из численного решения, условие $\varphi = \text{const}$ выполняется с меньшей точностью, чем $x_0^2 (\theta')^2 = \sin^2 \theta$, особенно для $v = v_c$. Однако переменная φ входит в уравнения только в виде комбинации $\varphi' \sin \theta$ и функции $\sin \varphi$; для последней отклонение от постоянного значения намного меньше, чем для самой φ , см. рис. 5. Поэтому можно ожидать, что при расчете интегральных характеристик стенки условие $\varphi = \text{const}$ достаточно адекватно. Такое свойство доменной стенки достаточно неожиданное; вероятно, оно возникает потому, что при $\varphi = \text{const}$ в рамках модели (9) энергия взаимодействия Дзялошинского сводится к полной производной и, хотя дает вклад в энергию стенки, не проявляется в вариации энергии.

Для получения замкнутых формул в рамках данного приближения проинтегрируем (12) по ξ от $-\infty$ до ∞ , и получаем $\pi D \sin \varphi = 2v M_s / \gamma$, т. е. связь скорости с параметром φ можно записать в виде

$$\sin \varphi = v/v_c, \tag{20}$$

где значение предельной скорости определяется приведенной выше формулой (17). Далее легко вычислить энергию доменной стенки как функцию φ в виде $E = 2E_0 - \pi D \cos \varphi$. Зависимость энергии от скорости дается формулой

$$E(v) = 2E_0 \pm \pi D \sqrt{1 - \left(\frac{v}{v_c}\right)^2}, \tag{21}$$

где знаки « \pm » отвечают верхней и нижней ветвям этой зависимости. На плоскости $v E$ кривые, представляющие зависимость $E(v)$, являются эллипсами с полуосями v_c и E_0 и с центрами в точках $v = 0$ и $E = 2E_0$, что с высокой точностью описывает численные данные, см. рис. 1.

Важной характеристикой доменной стенки является ее импульс. При расчете энергии стенки в рамках приближения $\varphi = \text{const}$ естественным образом получается зависимость $E = E(\varphi)$. В рамках подхода коллективных переменных энергия стенки, записанная через ее импульс P , имеет смысл функции Гамильтона. Поэтому импульс P , канонически сопряженный координате стенки X , должен быть связан с переменной φ , см. подробнее [49, 50]. Связь P и φ легко установить, используя уравнение Гамильтона

$$v \equiv dX/dt = dE(P)/dP.$$

Учитывая, что $dE/d\varphi = \pi D \sin \varphi$ и применяя формулу (20) легко записать $P = 2M_s\varphi/\gamma = \varphi P_0/2\pi$, где величина $P_0 = 4\pi M_s/\gamma$ равна периоду зависимости $E(P)$, см. (19). Искомая зависимость энергии доменной стенки от ее импульса (закон дисперсии стенки $E(P)$) в рамках этого приближения определяется формулой

$$E(P) = 2E_0 - \pi D \cos \left(\frac{2\pi P}{P_0} \right). \quad (22)$$

Тот факт, что энергия является периодической функцией импульса, следует из анализа на основе полевого подхода с использованием конкретной формулы для плотности полевого импульса поля намагниченности (5). Здесь такой же результат (22) получается в рамках подхода коллективных переменных. Полезно сопоставить данные этих подходов. Поскольку расчет в рамках подхода коллективных переменных проводился в приближении $\varphi = \text{const}$, это позволяет также оценить точность этого приближения.

Зависимость $E(P)$, построенная с использованием найденных численно зависимостей $E(v)$ и $P(v)$ с использованием формул для E (2) и P (5) для стенок с различными скоростями, с высокой точностью описывается формулой (22), см. рис. 4. Зависимость $v(P)$, найденная обращением численной функции $P(v)$, хорошо согласуется с той, что получается из уравнения Гамильтона $v = dE(P)/dP$. Таким образом, значения энергии и импульса солитона типа доменной стенки, полученные на основе полевого подхода с использованием выражений для плотностей этих величин, хорошо согласуются с данными, полученными на основе гамильтонового подхода в рамках метода коллективных переменных. Ранее такое соответствие было установлено только для модели Уокера, которая является точно интегрируемой. Поскольку последние данные получены в приближении $\varphi = \text{const}$, тем самым проверена высокая точность этого приближения для задачи о движении доменной стенки в киральном магнетике с одноосной анизотропией.

4. ДИНАМИКА ДОМЕННОЙ СТЕНКИ В КИРАЛЬНОМ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ

Для анализа движения плоской доменной стенки в антиферромагнетике ограничимся одномерными решениями, $\mathbf{l} = \mathbf{l}(x, t)$, и запишем уравнения сигма-модели в угловых переменных θ и φ :

$$A \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2} \right) - \sin \theta \cos \theta \left\{ K + A \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 \right] \right\} - 2D \frac{\partial \varphi}{\partial x} \sin^2 \theta \sin \varphi = 0, \quad (23)$$

$$A \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \sin^2 \theta \right) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \sin^2 \theta \right) \right] + 2D \frac{\partial \theta}{\partial x} \sin^2 \theta \sin \varphi = 0. \quad (24)$$

Начнем с исследования структуры движущейся доменной стенки, для которой $\theta = \theta(x - vt)$, $\varphi = \varphi(x - vt)$. Заметим, что уравнение (24) для любой функции $\theta = \theta(x - vt)$ имеет точное решение $\sin \varphi = 0$, т. е. $\varphi = \text{const}$, $d\varphi/dx = 0$. Таким образом, величина угла $\varphi = 0, \pi, \dots$ не зависит от скорости стенки. При этом уравнение (23) для θ принимает точно такой же вид, как и для статического случая, если заменить $A \rightarrow A(v) = A(1 - v^2/c^2)$. Следовательно, структура доменной стенки определяется выражением

$$\cos \theta = - \text{th} \left(\frac{x - vt}{x_0 \sqrt{1 - v^2/c^2}} \right), \quad (25)$$

где, как и ранее, $x_0 = \sqrt{A/K}$ — толщина неподвижной стенки.

Таким образом, несмотря на отсутствие лоренц-инвариантности для киральных антиферромагнетиков, эффект движения доменной стенки сводится только к лоренцевскому сокращению ее ширины, а скорость стенки ограничена сверху только величиной c . Важно также, что как структура доменной стенки, так и предельная скорость не зависят от константы Дзялошинского D . В отличие от стандартных лоренц-инвариантных моделей антиферромагнетиков с произвольным видом энергии анизотропии этот результат не очевиден; в частности, лоренц-инвариантное поведение отсутствует для двумерных топологических солитонов, предельная скорость которых меньше c и зависит от D , см. [57].

Предельная скорость доменной стенки в антиферромагнетике не зависят от константы Дзялошинского D , а для ферромагнетика предельная скорость пропорциональна D и обращается в нуль при $D \rightarrow 0$. Этот результат можно объяснить, отметив, что для антиферромагнетика доменная стенка разделяет области магнетика с различными направлениями вектора \mathbf{l} и нулевой намагниченностью. В

отличие от намагниченности ферромагнетика, суммарная z -проекция вектора \mathbf{I} ,

$$I_z^{(tot)} = \int l_z dx,$$

не сохраняется даже для изотропного или одноосного антиферромагнетика. Таким образом, для движения доменной стенки никаких специальных условий типа несохранения z -проекции намагниченности не требуется.

Несмотря на лоренц-инвариантный характер структуры движущейся доменной стенки, нарушение этой инвариантности проявляется при вычислении интегралов движения стенки. Используя форму энергии антиферромагнетика,

$$E^{(AFM)} = T + W,$$

энергию доменной стенки, движущейся со скоростью v , легко записать в виде

$$E(v) = \frac{2E_0}{\sqrt{1-v^2/c^2}} - \pi D \cos \varphi_0, \quad (26)$$

где φ_0 принимает фиксированные значения, скажем, $\varphi_0 = 0$ или $\varphi_0 = \pi$, так что $\cos \varphi_0 = \pm 1$. Таким образом, зависимость $E(v)$, как и для ферромагнетика, содержит две ветви, энергии стенок верхней и нижней ветвей различаются на величину $2\pi D$. Вычисляя импульс доменной стенки по формуле (8), получаем выражение, характерное для лоренц-инвариантных моделей

$$P = 2E_0 \frac{v}{c\sqrt{c^2 - v^2}}, \quad (27)$$

в которое, однако, входит только та часть «энергии покоя» стенки, которая не зависит от константы Дзялошинского D . Зависимость энергии стенки от ее импульса P , т. е. закон дисперсии $E(P)$, легко представить в виде

$$E(P) = \sqrt{(2E_0)^2 + c^2 P^2} - \pi D \cos \varphi_0, \quad (28)$$

где, как и в формуле для $E(v)$, $\cos \varphi_0 = \pm 1$.

Формулы (26) и (27) определяют искомую зависимость энергии E и импульса P от скорости стенки, т. е. их поведение при преобразованиях Лоренца. В лоренц-инвариантной теории ($D = 0$) достаточно ограничиться анализом неподвижных решений и потом получить движущиеся решения из неподвижных с помощью преобразований Лоренца. При этом энергия и импульс представляют собой две компоненты четырехмерного вектора энергии-импульса $P_\mu = (E/c, \mathbf{P})$, точнее, его двумерного аналога. Если же $D \neq 0$, то энергию можно представить как

сумму двух слагаемых, первое из которых есть компонента четырехмерного вектора, а второе — четырехмерный скаляр (инвариант преобразования Лоренца). Таким образом, хотя в киральном антиферромагнетике лоренц-инвариантность разрушена, существуют простые правила получения энергии и импульса движущегося солитона из их значений для неподвижного солитона. Отметим, что такое же поведение имеет место для другой системы с нарушенной лоренц-инвариантностью, антиферромагнетика во внешнем магнитном поле, направленном вдоль легкой оси [56].

Наличие двух типов стенок, т. е. двух ветвей зависимости $E(v)$ или $E(P)$, ставит вопрос об устойчивости одной из них. Для ферромагнетика ситуация понятная: зависимость $E = E(P)$ однозначная и обе стенки устойчивы. Для лоренц-инвариантной модели двухосного антиферромагнетика зависимость $E(P)$ содержит две ветви и стенки верхней ветви неустойчивы для всех значений скорости доменной стенки [55]. Для кирального антиферромагнетика лоренц-инвариантность нарушена и ответ на этот вопрос заранее не очевиден.

Для анализа устойчивости движущейся доменной стенки рассмотрим малые возмущения на ее фоне,

$$\theta(\xi, \tau) = \theta(\xi) + \vartheta(\xi, \tau), \quad \varphi(\xi, \tau) = \varphi_0 + \psi(\xi, \tau),$$

и исследуем поведение малых добавок $\vartheta(\xi, \tau)$ и $\psi(\xi, \tau)$. Для этого в полных уравнениях для $\theta(x, t)$, $\varphi(x, t)$ (23), (24) сделаем преобразование Лоренца

$$x \rightarrow \xi = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad t \rightarrow \tau = \frac{t - vx/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}.$$

Понятно, что форма основных слагаемых с производными не поменяется, например,

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2} \rightarrow \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \tau^2},$$

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 \rightarrow \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} \right)^2,$$

но может измениться, вообще говоря, функциональный вид слагаемых, связанных со взаимодействием Дзялошинского. Однако оказывается, что в линейном приближении по переменным $\vartheta(\xi, \tau)$ и $\psi(\xi, \tau)$ эти слагаемые дают вклад только в уравнение для $\psi(\xi, \tau)$, причем остается только слагаемое с $d\theta(\xi)/d\xi$ и не возникает производных $\psi(\xi, \tau)$ и $\vartheta(\xi, \tau)$ по τ .

Для конкретного анализа удобно записать

$$\vartheta(\xi, \tau) = f(\xi) \exp(i\omega\tau),$$

$$\psi(\xi, \tau) = [g(\xi)/\sin \theta(\xi)] \exp(i\omega\tau),$$

где $\theta(\xi)$ описывают невозмущенную доменную стенку. Далее будем использовать безразмерную переменную $x = \xi/l_0(v)$ и измерять скорость и частоту в единицах соответственно c и $\sqrt{c^2 - v^2}/x_0$. Линеаризованные уравнения для f и g образуют пару независимых уравнений на собственные значения, они имеют вид

$$\hat{H}f = \omega^2 f, \quad \left(\hat{H} + 2D \frac{\cos \varphi_0}{\text{ch } x} \right) g = \omega^2 g. \quad (29)$$

При записи этих уравнений считалось, что величина $d\theta(\xi)/d\xi \propto 1/\text{ch } \xi > 0$ имеет определенный знак, такой же, как выше при записи энергии доменной стенки.

Уравнения (29) содержат простой оператор Шредингера \hat{H} с безотражательным потенциалом,

$$\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + 1 - \frac{2}{\text{ch}^2 x},$$

для которого известен полный набор собственных функций. Этот набор включает одно локализованное состояние ψ_0 ,

$$\hat{H}\psi_0 = 0, \quad \psi_0 \propto \frac{1}{\text{ch } x},$$

и состояния непрерывного спектра, $\hat{H}\psi_k = (1 + k^2)\psi_k$, см., например, [55].

Легко видеть, что локализованные возмущения переменной $\theta(\xi, \tau)$, которые описывают трансляционную голдстоуновскую моду с $\omega = 0$, не нарушают устойчивости доменной стенки. Эволюцию второй переменной $\varphi(\xi, \tau)$ определяют решения $g \propto \psi_0$, $f = 0$; для нее знак ω^2 определяется знаком $D \cos \varphi_0$. Для стенки с меньшей энергией $D \cos \varphi_0 > 0$ и возмущения φ на фоне стенки определяют собственную моду колебаний с ненулевой частотой, $\omega^2 > 0$. Для стенки верхней ветви $D \cos \varphi_0 < 0$, $\omega^2 < 0$, т.е. отклонение φ от равновесного значения экспоненциально нарастают, что определяет нестабильность доменной стенки верхней ветви. Получается, что стенки нижней ветви зависимости $E(P)$ или $E(v)$, для которых $D \cos \varphi_0 > 0$, устойчивы, а стенки верхней ветви — неустойчивы при всех допустимых значениях скорости доменной стенки. Таким образом, характер устойчивости доменной стенки такой же, как для простейшей лоренц-инвариантной модели [55]: из двух стенок с тем же значением импульса устойчива только одна, у которой энергия ниже.

Таким образом, можно сделать общий вывод, что нарушение пространственной инверсии влияет на динамику одномерных антиферромагнитных солитонов в значительно меньшей степени, чем на динамику солитонов в ферромагнетиках. Однако для

двумерных топологических солитонов (скирмионов) такое влияние более существенно [57].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Начатые более шестидесяти лет назад исследования киральных магнетиков в настоящее время привели к формированию бурно развивающейся области физики магнетизма, имеющей большое влияние на развитие прикладной физики. В значительной мере это связано с солитонными аспектами проблемы, а именно, с возможностью реализации движения солитонов типа доменных стенок или скирмионов с немалыми скоростями. Для киральных магнетиков динамика солитонов качественно иная, чем для изученных ранее случаев стандартных ферромагнетиков и антиферромагнетиков. Не менее интересен и чисто теоретический аспект нелинейной динамики, прежде всего солитонной динамики, для киральных упорядоченных сред с нарушенной фундаментальной симметрией относительно пространственной инверсии (Р-инверсии). Принимая во внимание то, что для любых магнетиков нарушена симметрия относительно отражения времени (Т-инверсии), возникает интересная возможность исследования, в том числе экспериментальной реализации, динамики солитонов в нелинейных средах с нарушением симметрии относительно Р-инверсии и Т-инверсии. Авторы надеются, что анализ различных аспектов этой проблемы для магнетиков различного типа поможет понять специфику общей проблемы и увидеть возможные пути ее реализации и практического применения.

Финансирование. Работа выполнена в рамках программы НИТУ «МИСиС» (проект № К2-2019-006), осуществляемой постановлением правительства РФ от 16 марта 2013 г. № 211.

ЛИТЕРАТУРА

1. И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **46**, 1420 (1964).
2. И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **47**, 992 (1964).
3. И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **32**, 1547 (1957).
4. И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **33**, 807 (1958).
5. И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **33**, 1454 (1958).
6. I. Dzyaloshinsky, J. Phys. Chem. Sol. **4**, 241 (1958).
7. Т. Moriya, Phys. Rev. **120**, 91 (1960).

8. С. М. Стишов, А. Е. Петрова, ЖЭТФ **158**, 213 (2020).
9. B. Lebech, J. Bernhard, and T. Freltoft, J. Phys. Condens. Matter **1**, 6105 (1989).
10. T. Ohyama and A. E. Jacobs, Phys. Rev. B **52**, 4389 (1995).
11. A. Zheludev, S. Maslov, G. Shirane et al., Phys. Rev. Lett. **78**, 4857 (1997).
12. A. Fert, Mater. Sci. Forum **59–60**, 439 (1990).
13. C. Moreau-Luchaire, C. Moutafis, N. Reyren et al., Nat. Nanotech. **11**, 444 (2016).
14. O. Boulle, J. Vogel, H. Yang et al., Nat. Nanotech. **11**, 449 (2016).
15. A. Fert, V. Cros, and J. Sampaio, Nat. Nanotech. **8**, 152 (2013).
16. R. Wiesendanger, Nat. Rev. Mater. **1**, 16044 (2016).
17. F. Zheng, F. N. Rybakov, A. B. Borisov et al., Nat. Nanotech. **13**, (2018).
18. G. P. Mueller, F. N. Rybakov, H. Jonsson et al., Phys. Rev. B **101**, 84405 (2020).
19. Y. Fujishiro, N. Kanazawa, and Y. Tokura, Appl. Phys. Lett. **116**, 090501 (2020).
20. *Skyrmions: Topological Structures, Properties, and Applications*, ed. by J. Liu, Z. Zhang, and G. Zhao, Series in Materials Science and Engineering, CRC, Boca Raton, FL (2016).
21. D. Sander, S. O. Valenzuela, D. Makarov et al., J. Phys. D: Appl. Phys. **50**, 363001 (2017).
22. A. Thiaville, S. Rohart, E. Jue et al., Europhys. Lett. **100**, 57002 (2012).
23. I. M. Miron, T. Moore, H. Szambolics et al., Nat. Mater. **10**, 419 (2011).
24. L. Thomas, K. S. Ryu, S. H. Yang, and S. S. P. Parkin, Nat. Nanotech. **8**, 527 (2013).
25. S. Emori, U. Bauer, S. M. Ahn et al., Nat. Mater. **12**, 611 (2013).
26. A. Brataas, Nat. Nanotech. **8**, 485 (2013).
27. S. S. P. Parkin, M. Hayashi, and L. Thomas, Science **320**, 190 (2008).
28. S. S. P. Parkin and S.-H. Yang, Nat. Nanotech. **10**, 195 (2015).
29. V. V. Slastikov, C. B. Muratov, J. M. Robbins and O. A. Tretiakov, Phys. Rev. B **99**, 100403(R) (2019).
30. S. Komineas, C. Melcher, and S. Venakides, Nonlinearity **32**, 2392 (2019).
31. O. Boulle, S. Rohart, L. D. Buda-Prejbeanu et al., Phys. Rev. Lett. **111**, 217203 (2013).
32. V. P. Kravchuk, J. Magn. Magn. Mater. **367**, 9 (2014).
33. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Phys. Zs. Sowjet. **8**, 153 (1935); Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *К теории магнитной проницаемости ферромагнитных тел*, Л. Д. Ландау, Собр. тр. Т. 1, Наука, Москва (1969), с. 128.
34. А. И. Ахиезер, В. Г. Барьяхтар, С. В. Пелетминский, *Спиновые волны*, Наука, Москва (1967).
35. I. A. Yastremsky, O. M. Volkov, M. Kopte et al., Phys. Rev. Appl. **12**, 064038 (2019).
36. E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Systems*, in *Frontiers in Physics*, Addison-Wesley (1991).
37. R. Rajaraman, *Solitons and Instantons: An Introduction to Solitons and Instantons in Quantum Field Theory*, North-Holland, Amsterdam (1982).
38. A. A. Thiele, Phys. Rev. Lett. **30**, 230 (1973).
39. N. Papanicolaou and T. N. Tomaras, Nucl. Phys. B **360**, 425 (1991).
40. Е. Г. Галкина, Б. А. Иванов, Письма в ЖЭТФ **71**, 372 (2000).
41. E. G. Galkina, B. A. Ivanov, S. Savel'ev, and F. Nori, Phys. Rev. B **77**, 134425 (2008).
42. O. Tchernyshyov, Ann. Phys. (N. Y.) **363**, 98 (2015).
43. S. Dasgupta and O. Tchernyshyov, Phys. Rev. B **98**, 224401 (2018).
44. L. R. Walker, in: *Magnetism*, Vol. 3, ed. by G. T. Rado and H. Suhl, Pergamon, New York (1963), p. 451.
45. S. V. Tarasenko, A. Stankiewicz, V. V. Tarasenko, and J. Ferré, J. Magn. Magn. Mater. **189**, 19 (1998).
46. А. М. Косевич, Б. А. Иванов, А. С. Ковалев, Письма в ЖЭТФ **25**, 516 (1977).
47. В. П. Воронов, Б. А. Иванов, А. М. Косевич, ЖЭТФ **84**, 2235 (1983).
48. A. M. Kosevich, B. A. Ivanov, and A. S. Kovalev, Physica D **3**, 363 (1981).
49. A. M. Kosevich, B. A. Ivanov, and A. S. Kovalev. Phys. Rep. **194**, 117 (1990).

50. А. М. Косевич, Б. А. Иванов, А. С. Ковалев, *Нелинейные волны намагниченности. Динамические и топологические солитоны*, Наукова думка, Киев (1983).
51. А. Б. Борисов, В. В. Киселев, *Нелинейные волны, солитоны и локализованные структуры в магнетиках*, в двух томах, УроРАН, Екатеринбург (2009).
52. А. А. Жмудский, Б. А. Иванов, ЖЭТФ **115**, 1511 (1999).
53. Е. А. Туров, А. В. Колчанов, В. В. Меньшенин, И. Ф. Мирсаев, В. В. Николаев, *Симметрия и физические свойства антиферромагнетиков*, Физматлит, Москва (2001).
54. E. G. Galkina and B. A. Ivanov, *Low Temp. Phys.* **44**, 618 (2018).
55. В. Г. Барьяхтар, Б. А. Иванов, А. Л. Сукстанский, ЖЭТФ **78**, 1509 (1980).
56. В. Г. Барьяхтар, Б. А. Иванов, ЖЭТФ **85**, 328 (1983).
57. S. Komineas and N. Papanicolaou, *SciPost Phys.* **8**, 086 (2020).
58. E. Schlömann, *Appl. Phys. Lett.* **19**, 274 (1971).
59. В. Г. Барьяхтар, Б. А. Иванов, А. Л. Сукстанский, Письма в ЖЭТФ **27**, 226 (1978).
60. В. М. Елеонский, Н. Н. Кирова, Н. Е. Кулагин, ЖЭТФ **75**, 2210 (1978).
61. В. М. Елеонский, Н. Н. Кирова, Н. Е. Кулагин, ЖЭТФ **77**, 409 (1979).
62. В. М. Елеонский, Н. Е. Кулагин, ЖЭТФ **84**, 616 (1983).
63. В. М. Елеонский, Н. Е. Кулагин, ЖЭТФ **85**, 1437 (1983).
64. L. M. Lerman, *Selecta Math. Sovietica* **12**, 333 (1993).
65. Л. М. Лерман, Письма в ЖЭТФ **51**, 336 (1990).
66. Л. М. Лерман, Я. Л. Уманский, Прикл. матем. мех. **47**, 395 (1983).
67. Б. А. Иванов, Н. Е. Кулагин, ЖЭТФ **112**, 953 (1997).
68. В. М. Елеонский, Н. Н. Кирова, Н. Е. Кулагин, ЖЭТФ **71**, 2349 (1976).
69. В. М. Елеонский, Н. Н. Кирова, Н. Е. Кулагин, ЖЭТФ **74**, 1814 (1978).
70. T. F. C. Chan and H. B. Keller, *SIAM* **3**, 173 (1982).

ОБ АНОМАЛЬНОМ ОПРОКИДЫВАНИИ ПОДРЕШЕТОК В АНТИФЕРРОМАГНИТНОМ $\text{Cu}(\text{pz})_2(\text{ClO}_4)_2$

*В. И. Марченко**

*Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук
119334, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 8 декабря 2020 г.,
после переработки 8 декабря 2020 г.
Принята к публикации 10 декабря 2020 г.

Предложено объяснение аномального опрокидывания подрешеток в антиферромагнитном $\text{Cu}(\text{pz})_2(\text{ClO}_4)_2$. Здесь, благодаря близости моноклинной решетки к тетраэдрической, в небольшом магнитном поле опрокидывание подрешеток может сопровождаться переходом от одного к другому антиферромагнитному вектору. Эти два вектора превращаются друг в друга под действием элементов симметрии, утерянных при моноклинных искажениях решетки.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

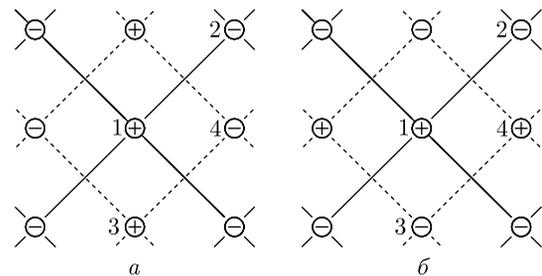
DOI: 10.31857/S004445102104009X

Поваров, Смирнов и Лэнди [1] обнаружили необычное явление в антиферромагнитном $\text{Cu}(\text{pz})_2(\text{ClO}_4)_2$ (пиразин $\text{pz} = \text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2$). Переход, который по поведению намагниченности выглядит как опрокидывание подрешеток в магнитном поле, согласно измерениям спектра антиферромагнитного резонанса сопровождается неожиданным изменением знака одной из констант анизотропии.

Атомы меди находятся в узлах почти квадратной ромбической решетки (рисунок *a*). Параметры кристалла, исследованного в работе [1], равны

$$a = 14.072 \text{ \AA}, \quad b = 9.786 \text{ \AA}, \\ c = 9.7810 \text{ \AA}, \quad \beta = 96.458^\circ.$$

Антиферромагнитный обмен внутри атомных плоскостей (*b, c*) сильно превосходит обмен между плоскостями [2]. В результате в каждой плоскости устанавливается естественное двумерное упорядочение с противоположными направлениями средних значений спинов ближайших соседей. Согласно нейтронографическим данным [2], наблюдаемая трехмерная обменная магнитная структура $\text{Cu}(\text{pz})_2(\text{ClO}_4)_2$ задается одним антиферромагнитным вектором ℓ , составленным из четырех подрешеток с сигнатурой указанной на рисунке *a*:



Строка чередующихся плоскостей атомов меди в почти тетраэдрическом кристалле $\text{Cu}(\text{pz})_2(\text{ClO}_4)_2$. Трансляция **b** — горизонтальная диагональ ромба, **c** — вертикальная

$$\ell = s_1 - s_2 + s_3 - s_4. \quad (1)$$

Если $b = c$ и $\beta = 90^\circ$, то решетка становится тетраэдрической. При этом, независимо от того, как устроен микроскопический обменный гамильтониан, если имеется описанное выше антиферромагнитное состояние ℓ , то обязательно, в силу симметрии, возможно и альтернативное магнитное состояние с сигнатурой, представленной на рисунке *b*:

$$\tilde{\ell} = s_1 - s_2 - s_3 + s_4. \quad (2)$$

Энергии и вообще все характеристики состояний (1), (2) будут одинаковыми¹⁾. Макроскопически эти состояния различаются лишь поворотом легкой оси в базисной плоскости на 90° .

* E-mail: mar@kapitza.ras.ru

¹⁾ Сравни со случаем III §3 в работе Дзялошинского [3].

Во внешнем магнитном поле при низких температурах энергии обсуждаемых состояний равны

$$E_\ell = E_0 + \frac{\beta_1}{2} \ell_z^2 + \frac{\beta_2}{2} \ell_y^2 - \frac{\chi_\perp}{2} [\ell \times \mathbf{B}]^2, \quad (3)$$

$$E_{\tilde{\ell}} = E_0 + \frac{\beta_1}{2} \tilde{\ell}_z^2 + \frac{\beta_2}{2} \tilde{\ell}_x^2 - \frac{\chi_\perp}{2} [\tilde{\ell} \times \mathbf{B}]^2,$$

где E_0 — энергия основного состояния, $\beta_1 > \beta_2 > 0$ — константы анизотропии, χ_\perp — магнитная восприимчивость, перпендикулярная векторам ℓ и $\tilde{\ell}$, $|\ell| = |\tilde{\ell}| = 1$.

В параллельном базисной плоскости магнитном поле $\ell_z = \tilde{\ell}_z = 0$. При этом, если поле ориентировано под углом 45° к легким осям ($B_x = \pm B_y$), энергии двух альтернативных состояний остаются совпадающими. В общем же случае вырождение снимается, и уже в малом поле минимальной энергией будет обладать то состояние, в котором легкая ось ориентирована под углом ближе к оптимальному (90°) по отношению к полю.

При учете имеющихся малых отличий кристаллической решетки от тетраэдрической обменные энергии состояний ℓ , $\tilde{\ell}$ становятся разными. Как правило, в кристалле в парамагнитной фазе имеются кристаллиты, повернутые относительно друг друга на 90° в базисной плоскости. Согласно нейтронографическим данным в кристаллитах, где трансляция \mathbf{b} горизонтальна, реализуется состояние ℓ (см. рисунок). Отсчитывая энергию от средней между двумя обсуждаемыми состояниями в данном кристаллите, припишем состоянию ℓ малый отрицательный обменный вклад $-\alpha/2$, а состоянию $\tilde{\ell}$ — положительную добавку $+\alpha/2$. Поскольку состояние $\tilde{\ell}$ было устойчивым в тетраэдрической решетке, оно и при слабой моноклинности должно остаться устойчивым в малом.

Вообще говоря, при понижении симметрии остальные магнитные характеристики, такие как восприимчивость и величины констант анизотропии, также должны стать слегка разными у состояний $\tilde{\ell}$ и ℓ . Кроме того, из-за потери ортогональности ($\beta = 96.458^\circ$) появится дополнительный вклад в анизотропию вида $\beta_3 \ell_y \ell_z$, приводящий к слабому выходу антиферромагнитных векторов из базисной плоскости. При этом должно возникать разбиение на домены с противоположными знаками сдвиговой деформации, которая и нарушает ортогональность. Такие домены характеризуются разными знаками константы β_3 . Эти эффекты, однако, должны быть малыми по сравнению с основным — расщеплением α энергии основного состояния.

Формулы (3) в случае, когда магнитное поле параллельно базисной плоскости, можно представить в виде

$$E_\ell = E_0 - \frac{\alpha}{2} + \frac{\beta_2 - \chi_\perp B^2}{4} + \frac{A^-}{4} \cos 2(\theta - \psi^-), \quad (4)$$

$$E_{\tilde{\ell}} = E_0 + \frac{\alpha}{2} + \frac{\beta_2 - \chi_\perp B^2}{4} + \frac{A^+}{4} \cos 2(\tilde{\theta} - \psi^+),$$

где

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{\ell_y}{\ell_x}, \quad \operatorname{tg} \tilde{\theta} = \frac{\tilde{\ell}_y}{\tilde{\ell}_x}, \quad \operatorname{tg} \varphi = \frac{B_y}{B_x},$$

$$A^\pm = \sqrt{(\chi_\perp B^2 \cos 2\varphi \pm \beta_2)^2 + (\chi_\perp B^2 \sin 2\varphi)^2},$$

$$\operatorname{tg} \psi^\pm = \frac{\chi_\perp B^2 \sin 2\varphi}{\chi_\perp B^2 \cos 2\varphi \pm \beta_2}.$$

Отсюда очевидно, что равновесные ориентации антиферромагнитных векторов равны $\theta = \psi^- + \pi/2$, $\tilde{\theta} = \psi^+ + \pi/2$. Переход аномального опрокидывания происходит при условии $E_\ell = E_{\tilde{\ell}}$:

$$A^+ - A^- = 4\alpha.$$

Решение этого уравнения дает критическое поле аномального опрокидывания

$$B_c(\varphi) = B_{sf} \left(\frac{\cos^2 2\varphi_c \sin^2 2\varphi_c}{\cos^2 2\varphi - \cos^2 2\varphi_c} \right)^{1/4}, \quad (5)$$

где $B_{sf} = \sqrt{\beta_2/\chi_\perp}$ — поле обычного опрокидывания подрешеток, φ_c — критический угол, определяемый соотношением $\cos 2\varphi_c = 2\alpha/\beta_2$. Аномальное опрокидывание наблюдается в интервале углов $0 \leq \varphi < \varphi_c$ при выполнении условия $\alpha < \beta_2/2$. Минимум критического поля достигается при $\varphi = 0$ и равен $B_c(0) = B_{sf} \sqrt{\cos 2\varphi_c}$.

Согласно формуле (5), при приближении к критическому углу φ_c должен происходить резкий рост величины критического поля, что соответствует экспериментальным наблюдениям в антиферромагнитном $\text{Cu}(\text{pz})_2(\text{ClO}_4)_2$ при $\varphi \rightarrow 10^\circ$ [1]. Спектр магнитного резонанса в поле $B > B_c$ при $\varphi = 0$ должен совпадать со спектром колебаний вектора ℓ в базисной плоскости при направлении поля вдоль оси c . Значение параметра $\Delta_a = 14 \pm 2$ ГГц в предложенной в работе [1] эмпирической формуле, однако, оказывается несколько больше ожидаемого значения $\Delta_x = 11 \pm 2$ ГГц [1], что, возможно, связано с упомянутыми выше различиями характеристик, возникающими из-за моноклинных деформаций.

Мне приятно, что настоящая заметка принята в номер журнала, посвященный 90-летию Игоря Иехиэлевича Дзялошинского, который своими замечательными статьями в ЖЭТФ в существенной степени определил современное состояние теории антиферромагнетизма.

Благодарности. Благодарю А. И. Смирнова и С. С. Сосина за полезные обсуждения и замечания.

Финансирование. Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 19-02-00194).

ЛИТЕРАТУРА

1. K. Yu. Povarov, A. I. Smirnov, and C. P. Landee. Phys. Rev. B **87**, 214402 (2013).
2. N. Tsygulin, F. Xiao, A. Schneidewind, P. Link, H. M. Rønnow, J. Gavilano, C. P. Landee, M. M. Turnbull, and M. Kenzelmann, Phys. Rev. B **81**, 134409 (2010).
3. И. Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **46**, 1420 (1964).

CRITICAL FLUCTUATIONS BEYOND THE QUANTUM PHASE TRANSITION IN DZHALOSHINSKII–MORIYA HELMAGNETS $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$

S. V. Grigoriev^{a,b*}, *O. I. Utesov*^{a,b}, *N. M. Chubova*^a,
C. D. Dewhurst^c, *D. Menzel*^d, *S. V. Maleyev*^a

^a *Petersburg Nuclear Physics Institute named by B. P. Konstantinov of National Research Centre “Kurchatov institute”
188300, Saint Petersburg, Gatchina, Russia*

^b *Saint Petersburg State University
198504, Saint Petersburg, Russia*

^c *Institut Laue–Langevin
38042, Grenoble, Cedex 9, France*

^d *Technische Universität Braunschweig
38106, Braunschweig, Germany*

Received December 1, 2020,
revised version December 1, 2020
Accepted for publication December 3, 2020

Contribution for the JETP special issue in honor of I. E. Dzyaloshinskii’s 90th birthday

DOI: 10.31857/S0044451021040106

Many years have passed since the first observation of helical spin structures in cubic B20 compounds FeGe [1] and MnSi [2]. However, helimagnets with Dzyaloshinskii–Moriya (DM) interaction [3, 4] are among the most studied systems in contemporary condensed matter physics. In particular, this interest is stimulated by rather simple but fancy phase diagram which includes topologically lattice (A-phase) [5]. The theoretical descriptions [6, 7] pointed out that the competition between the ferromagnetic exchange interaction and the antisymmetric DM interaction is balanced in the homochiral helical magnetic structure.

Mixed B20 compounds like $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ or $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Ge}$ are characterized by additional parameter x which allows fine tuning for the system properties. In $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Ge}$ its variation leads to change of the sign of magnetic chirality at $x_c \approx 0.75$ [8, 9], where the system is in ferromagnetic state due to cubic anisotropy [10].

The isostructural solid solutions $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ also reveal intriguing properties upon Fe concentration growth. The substitution of manganese by iron suppresses the helical order [11]. Neutron scattering studies [12, 13] together with magnetic susceptibility and specific heat measurements [11, 14–16] discovered a quantum critical point (QCP) described as a suppression of the spiral phase with long-range order (LRO) in $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$. As it was shown in Refs. [13, 15, 16], this QCP located at $x_c \approx 0.11$ – 0.12 is hidden by an extensive phase of spin helix fluctuations. This fluctuation regime, sometimes referred to as chiral spin liquid [17, 18], vanishes at about $x \approx 0.24$.

Both magnetic susceptibility measurements and neutron scattering experiments demonstrate a short-range order (SRO) and a crossover to the helix fluctuating regime [13, 19–21]. The crossover temperature T_{DM} decreases with x and becomes zero at $x_{DM} \approx 0.17$ [12, 22]. It was shown that the temperature T_{DM} is proportional to the spin wave stiffness of the compounds $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ [23]. One concludes that these compounds at $x \sim x_{DM} \approx 0.17$ represent the only known example of the system, where ferromagnetic exchange approaches zero but

* E-mail: grigoryev_sv@npni.nrcki.ru

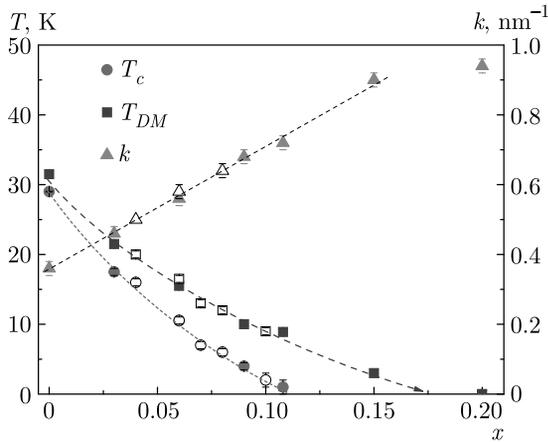


Fig. 1. (Color online) Temperature–concentration (T – x) phase diagram of the $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ compounds and the helix wave vector k as a function of x . The data taken from several studies [12, 13, 23] are combined with data of the present work. The dashed lines are the guides for an eye

DM interaction is finite and provides chiral rotation of spins in magnetic fluctuations.

In the present paper, we study the critical fluctuations in DM helimagnets $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ by means of polarized neutron scattering. Three samples with $x = 0.10$, $x = 0.15$, and $x = 0.20$ are selected so as to represent three different regimes: namely close to the quantum critical point $x \sim x_c$, close to the concentration with zero ferromagnetic exchange x_{DM} , and beyond this concentration, respectively.

The series of $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ single crystals with $x = 0.10$, 0.15 , 0.20 were grown using the Czochralski technique at the Institute of Condensed Matter Physics (Braunschweig, Germany). These samples were prepared as cylinders with a height of 15–20 mm and a diameter of 5–6 mm.

The temperature–concentration (T – x) phase diagram is shown in Fig. 1. One can see (in accord with Refs. [13, 15, 16, 19]) that T_c , which indicates a phase with LRO, reaches zero at $x_c \approx 0.11$ – 0.12 , while the temperature band of the fluctuating helix regime increases with x . The decrease in T_c is accompanied by the linear with x increase in the helix wave vector k , as shown in Fig. 1.

The polarized small-angle neutron scattering (SANS) was performed using the D22 instrument at the Laue–Langevin Institute (Grenoble, France). The [110] axis of the single crystal was oriented parallel to the neutron beam with an accuracy of 5° . A polarized neutron beam with initial polarization $P_0 = 0.93$ and mean wavelength $\lambda = 0.60$ nm was used. The scattered

neutrons were detected with a 2D position sensitive detector. The beam divergence was tuned from 1 to 10 mrad to set the Q -range and Q -resolution optimal for an individual sample (\mathbf{Q} is a momentum transfer). With these settings, we were able to cover the Q -range from $2 \cdot 10^{-2}$ to 2 nm⁻¹. A weak magnetic field (1 mT) guiding the polarization \mathbf{P}_0 was applied along the Q_x . The temperature was set in the range from 1.7 to 60 K with accuracy of the order of 0.05 K. As a result, we obtain the maps of polarized SANS intensities at various temperatures for three samples with different x . A background intensity maps were taken for all samples at high temperature ($T = 60$ K) when no magnetic scattering is observed. These background maps were subtracted from the other scattering maps of the given sample. The software GRASP developed at the ILL (Grenoble) were used for the primary data reduction [24].

Figure 2 shows the maps of the polarized SANS intensities with the polarization along \mathbf{P}_0 . One can follow the evolution of the scattering patterns with temperature (vertical axis) and the concentration (horizontal axis). The whole diagram can be qualitatively described in the following way. No scattering is observed at the temperature of 15 K for all three concentrations. Upon lowering temperature to 9 K, the blurred but well detectable scattering appears for the sample with $x = 0.10$, while the samples with $x = 0.15$ and $x = 0.20$ show no scattering, demonstrating absence of short-range magnetic correlations. Further temperature lowering to 5 K forms a well-defined “half-moon” image (which is typical for chiral helimagnets) for the sample with $x = 0.10$. For the ones with $x = 0.15$ and $x = 0.20$, it results in the appearance of the blurred images. At $T = 2$ K, the scattering for the sample with $x = 0.10$ is almost the same, whereas for the sample with $x = 0.15$, a slightly blurred half-moon image appears. For the most disordered sample with $x = 0.20$, the image is still far from being well-defined half-moon. We note that the scattering is strongly asymmetric in all cases. The latter is typical for the critical scattering above T_c in the MnSi system [20, 21, 25].

Similarly to Ref. [26], we treated the obtained data using the following mean-field form of the neutron cross section which is appropriate for the disordered fluctuating phase in these compounds ($T > T_c$) [20, 25]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r^2 T}{A} \frac{k^2 + \kappa^2 + Q^2 + 2 \operatorname{sgn}(D) k \mathbf{Q} \cdot \mathbf{P}_0}{[(Q+k)^2 + \kappa^2][(Q-k)^2 + \kappa^2]}. \quad (1)$$

Here \mathbf{Q} is the scattering vector, r is the classical electron radius, κ is the inverse correlation length of the

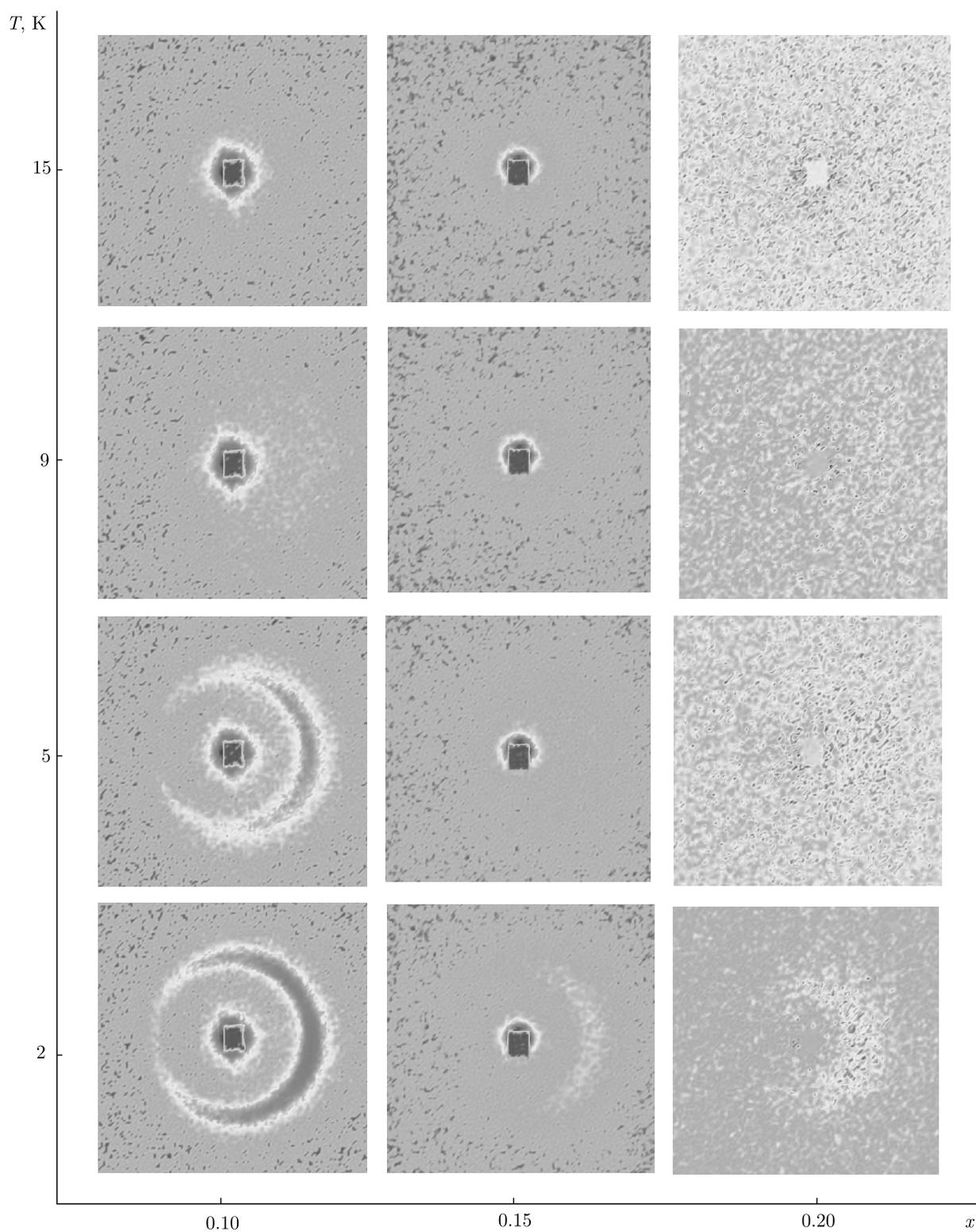


Fig. 2. (Color online) Maps of the polarized SANS intensities plotted on the $T-x$ phase diagram for $Mn_{1-x}Fe_xSi$ system for the polarization \mathbf{P}_0 along the guide field

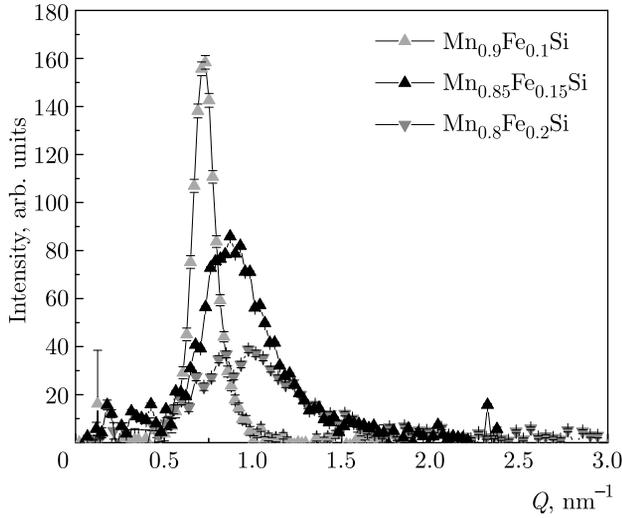


Fig. 3. (Color online) Q -dependence of the azimuthally averaged scattering intensity for the $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ system with $x = 0.10, 0.15, 0.20$ at $T = 2.0$ K

critical fluctuation, A is the spin wave stiffness at low temperatures, D is the Dzyaloshinskii constant, and \mathbf{P}_0 is the incident polarization of neutrons. The cross section (Eq. (1)) has several features provided by DM interaction.

(i) Due to the second term of the product in the denominator, the scattering intensity should form a sphere of radius $Q = k$ with a width of κ . The scalar variables in $(Q - k)^2$ are due to isotropic DM interaction.

(ii) The intensity has the Lorentzian shape typical for critical fluctuations.

(iii) The scattering intensity is strongly oriented along the incident neutron polarization since the numerator of Eq. (1) is maximal at \mathbf{P}_0 parallel to \mathbf{Q} and it is minimal at \mathbf{P}_0 antiparallel to \mathbf{Q} .

The chirality of the critical fluctuations can be estimated via measurement of the polarization of the scattering:

$$P_s(Q) = \frac{\sigma(\mathbf{P}_0) - \sigma(-\mathbf{P}_0)}{\sigma(\mathbf{P}_0) + \sigma(-\mathbf{P}_0)} = -\frac{2kQ P_0 \cos \phi}{Q^2 + k^2 + \kappa^2}, \quad (2)$$

where ϕ is the angle between \mathbf{P}_0 and \mathbf{Q} , and we use Eq. (1) to express its value via parameters Q, k and κ .

For quantitative analysis, the intensity maps were azimuthally averaged. Examples of the radial profiles (the Q -dependence of the scattering intensity) are shown in Fig. 3. As it is well seen in Fig. 3, the position and the width of the observed peak differ for the three samples. The scattering curve $I(Q)$ can be well described by the Lorentzian at high temperatures, which

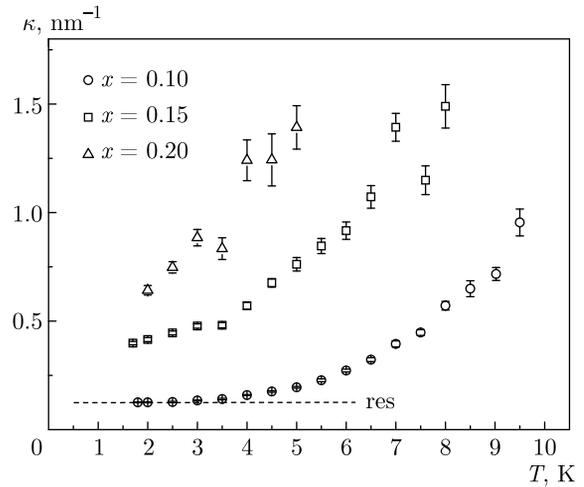


Fig. 4. Temperature dependence of the inverse correlation length of helical fluctuations for the $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ system with $x = 0.10, 0.15, 0.20$ in the log-log scale (the line denoted “res” shows the level of the instrumental resolution)

can be ascribed to the scattering on the critical fluctuations of the helical structure, whereas at low temperatures, $I(Q)$ is described by the sum of the Gaussian and Lorentzian for the samples with $x = 0.10$ and $x = 0.15$; Gaussian term being attributed to the limitation of the instrument resolution, which exceeds the value of 0.12 nm^{-1} (see Fig. 3, curve for $x = 0.10$).

The whole set of the experimental data obtained by polarized SANS was fitted to Eq. (1). The position of the maximum k (the helix wavevector) and inverse correlation length κ of the helix were obtained as a result of the fit. The wave vector does not change with the temperature within the error bars for the individual sample. It is equal to 0.72 nm^{-1} , 0.90 nm^{-1} , and 0.94 nm^{-1} for the samples with $x = 0.10, 0.15$, and 0.20 , respectively. Interesting to note that the wave vector changes linearly with the concentration in the range of $x = 0-0.15$ and saturates at the concentration x larger than 0.15 (see Fig. 1). It is correlated to the range with the finite crossover temperature T_{DM} in the $\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ compounds.

The temperature dependence of the inverse correlation length κ is shown in Fig. 4. As it was noticed above, the value of κ is resolution limited for the compound with $x = 0.10$ for the low temperature range. It saturates with lowering temperature at $T_c = 3.0$ K ($x = 0.10$). In contrast, for the sample with $x = 0.15$, κ tends to saturate at larger value, disorder-induced κ_d (see below). For the sample with $x = 0.20$, κ does not saturate at all.

We observe (it was also noted in Refs. [20, 25]) that the polarization P_s ($Q = k$) is close to 1 at low temperature even for the most disordered sample with $x = 0.20$, which shows that DM interaction is still present and makes short fluctuations chiral. Upon increase of temperature, the polarization P_s was found to decrease smoothly.

The behaviour observed experimentally can be qualitatively understood using the assumption that Fe ions introduce the defect antiferromagnetic (AF) bonds in the system. First of all, strong AF bonds lead to significant lowering of the spin wave stiffness, T_c , and T_{DM} . The latter becomes zero at $x = x_{DM}$. Moreover, according to the theory of Ref. [27], strong AF bonds can lead to large variation of the helical vector even at small concentrations (see Fig. 1).

It is well-known that the strong frustrating defect bonds with finite concentration destroy the long-range order in the two-dimensional collinear magnets. Instead, the SRO order of the glassy phase emerges in the system [28, 29]. Strong defects lead to additional rotations of spins, $\delta\varphi(\mathbf{r})$, in the classical ground state of the system. For a single defect bond, they can be described as the dipolar field (cf. Refs. [27, 30]),

$$\delta\varphi(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{d} \cdot \mathbf{r}}{r^D}, \quad (3)$$

where \mathbf{d} is the dipole moment of the defect bond, \mathbf{r} is the distance from the defect bond, and D is the dimension of the system. After averaging over disorder configurations, one gets for mean squared transverse fluctuation of the ordered moment M [31]:

$$\langle M_{\perp}^2 \rangle \sim xM^2 \int d^D r \delta\varphi^2(\mathbf{r}). \quad (4)$$

In two-dimensional systems, this integral diverges as a logarithm on large distances and the cut-off (disorder-induced correlation length ξ_d) should be introduced. Importantly, ξ_d is finite for every nonzero concentration x . In three-dimensional systems, the same scenario can occur at finite concentrations x_c if the disorder is strong enough [29]. Correlation length can be estimated using the condition

$$1 = x \int_0^{\xi_d} d^3 r \delta\varphi^2(\mathbf{r}), \quad (5)$$

which at $x > x_c$ yields

$$\xi_d \sim (x - x_c)^{-1}. \quad (6)$$

Note, that the correlation length ξ_d is temperature-independent since its nature is pure classical.

In the considered mixed B20 helimagnet, the LRO disappears at $x_c \approx 0.11$. The correlation length ξ_d decreases from infinity at x_c to finite values at larger Fe concentrations. We denote disorder-induced inverse correlation length as κ_d . When discussing polarized neutron scattering data, κ_d^2 should be added into the denominator of Eq. (1) and considered as a part of κ^2 along with temperature-dependent contribution κ_T^2 as the system has effective size ξ_d [32].

Thus, we arrive to the following qualitative picture. The sample with $x = 0.10$ has $\kappa_d = 0$ and behaves like pure MnSi with lower T_c and T_{DM} values due to AF bonds-induced lowering of the spin-wave stiffness. Half-moon patterns and sharp peaks in the neutron scattering (see Figs. 2 and 3), and peaks in magnetic susceptibility [22] near T_c are well pronounced due to mean-field denominator proportional to $(Q - k)^2 + \kappa_T^2$.

For the sample with $x = 0.15$, the inverse correlation length κ_d is nonzero and it is smaller than k . It leads to the highly chiral fluctuating phase at $T < T_{DM}$, but suppresses the growth of the critical fluctuations so naturally seen at $x < x_c$. Moreover, since κ has a tendency to saturation upon temperature lowering (see Fig. 4), apparently there should be a transition to frozen SRO phase (like in usual spin-glasses, see Ref. [33]) with correlation length larger than the spiral period. In the polarized neutron images, such behaviour results in blurred half-moon patterns, whereas in magnetic susceptibility measurements [22] there is a broad maximum.

At $x = x_{DM}$, spin wave stiffness becomes zero, and a possible qualitative description of the experimental data observed at $x > x_{DM}$ (e. g., blurred SANS maps and negative Curie–Weiss temperature) can be based on a domination of the AF interaction in the sample. Concentration x_{DM} itself is very peculiar, its vicinity in T - x phase diagram should reveal intriguing properties of the fluctuating highly chiral helical state with the shortest period possible for such systems. The correlation length of these fluctuations are affected by two factors not related to temperature: disorder induced by the AF bonds and DM interaction destabilizing the ferromagnetic order. A detailed description of the situation in the vicinity of x_{DM} requires further experimental studies.

Funding. The authors thank for the support the Russian Science Foundation (grant No. 17-12-01050).

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

REFERENCES

1. L. Lundgren, O. Beckman, V. Attia, S. P. Bhattacharjee, and M. Richardson, *Phys. Scripta* **1**, 69 (1970).
2. Y. Ishikawa, K. Tajima, D. Bloch, and M. Roth, *Sol. St. Comm.* **19**, 525 (1976).
3. I. Dzyaloshinskii, *J. Phys. Chem. Sol.* **4**, 241 (1958).
4. T. Moriya, *Phys. Rev.* **120**, 91 (1960).
5. S. Muhlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, and P. Böni, *Science* **323**, 915 (2009).
6. O. Nakanishia, A. Yanase, A. Hasegawa, and M. Kataoka, *Sol. St. Comm.* **35**, 995 (1980).
7. P. Bak and M. H. Jensen, *J. Phys. C* **13**, L881 (1980).
8. S. V. Grigoriev, N. M. Potapova, S.-A. Siegfried, V. A. Dyadkin, E. V. Moskvin, V. Dmitriev, D. Menzel, C. D. Dewhurst, D. Chernyshov, R. A. Sadykov, L. N. Fomicheva, and A. V. Tsvyashchenko, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 207201 (2013).
9. K. Shibata, X. Z. Yu, T. Hara, D. Morikawa, N. Kanazawa, K. Kimoto, S. Ishiwata, Y. Matsui, and Y. Tokura, *Nature Nanotechnology* **8**, 723 (2013).
10. S. V. Grigoriev, A. S. Sukhanov, and S. V. Maleyev, *Phys. Rev. B* **91**, 224429 (2015).
11. Y. Nishihara, S. Waki, and S. Ogawa, *Phys. Rev. B* **30**, 32 (1984).
12. S. V. Grigoriev, V. A. Dyadkin, E. V. Moskvin, D. Lamago, Th. Wolf, H. Eckerlebe, and S. V. Maleyev, *Phys. Rev. B* **79**, 144417 (2009).
13. S. V. Grigoriev, E. V. Moskvin, V. A. Dyadkin, D. Lamago, T. Wolf, H. Eckerlebe, and S. V. Maleyev, *Phys. Rev. B* **83**, 224411 (2011).
14. S. V. Demishev, I. I. Lobanova, V. V. Glushkov, T. V. Ischenko, N. E. Sluchanko, V. A. Dyadkin, N. M. Potapova, and S. V. Grigoriev, *JETP Lett.* **98**, 829 (2013).
15. A. Bauer, A. Neubauer, C. Franz, W. Munzer, M. Garst, and C. Pfleiderer, *Phys. Rev. B* **82**, 064404 (2010).
16. S. V. Demishev, V. V. Glushkov, S. V. Grigoriev, M. I. Gilmanov, I. I. Lobanova, A. N. Samarin, A. V. Semeno, and N. E. Sluchanko, *Phys.-Uspekhi* **59**, 559 (2016).
17. S. Tewari, D. Belitz, and T. R. Kirkpatrick, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 047207 (2006).
18. F. Kruger, U. Karahasanovic, and A. G. Green, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 067003 (2012).
19. V. V. Glushkov, I. I. Lobanova, V. Yu. Ivanov, V. V. Voronov, V. A. Dyadkin, N. M. Chubova, S. V. Grigoriev, and S. V. Demishev, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 256601 (2015).
20. S. V. Grigoriev, S. V. Maleyev, E. V. Moskvin, V. A. Dyadkin, P. Fouquet, and H. Eckerlebe, *Phys. Rev. B* **81**, 144413 (2010).
21. M. Janoschek, M. Garst, A. Bauer, P. Krautscheid, R. Georgii, P. Böni, and C. Pfleiderer, *Phys. Rev. B* **87**, 134407 (2013).
22. L. J. Bannenberg, F. Weber, A. J. E. Lefering, T. Wolf, and C. Pappas, *Phys. Rev. B* **98**, 184430 (2018).
23. S. V. Grigoriev, E. V. Altynbaev, S.-A. Siegfried, K. A. Pschenichnyi, D. Menzel, A. Heinemann, and G. Chaboussant, *Phys. Rev. B* **97**, 024409 (2018).
24. *The data reduction software used is Graphical Reduction and Analysis SANS Program (GRASP)*, www.ill.eu/instruments-support/instruments-groups/groups/lss/grasp/.
25. S. V. Grigoriev, S. V. Maleyev, A. I. Okorokov, Y. O. Chetverikov, R. Georgii, P. Böni, D. Lamago, H. Eckerlebe, and K. Pranzas, *Phys. Rev. B* **72**, 134420 (2005).
26. N. M. Chubova, E. V. Moskvin, V. A. Dyadkin, Ch. Dewhurst, S. V. Maleev, and S. V. Grigoriev, *JETP* **125**, 789 (2017).
27. O. I. Utesov, A. V. Sizanov, and A. V. Syromyatnikov, *Phys. Rev. B* **92**, 125110 (2015).
28. A. Aharony, R. J. Birgeneau, A. Coniglio, M. A. Kastner, and H. E. Stanley, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1330 (1988).
29. V. Cherepanov, I. Y. Korenblit, A. Aharony, and O. Entin-Wohlman, *Eur. Phys. J. B* **8**, 511 (1999).
30. I. Ya. Korenblit, *Phys. Rev. B* **51**, 12551 (1995).
31. S. Dey, E. C. Andrade, and M. Vojta, *Phys. Rev. B* **101**, 020411(R) (2020).
32. A. Z. Patashinskii and V. L. Pokrovskii, *Fluctuation Theory of Phase Transitions*, Pergamon Press (1979).
33. S. L. Ginzburg, *Irreversible Phenomena of Spin Glasses* (in Russian), Nauka, Moscow (1989).

КАПЛИ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА В ЭЛЕКТРОННОЙ СИСТЕМЕ МАЛОЙ ПЛОТНОСТИ С ПРИТЯЖЕНИЕМ В ПРИСУТСТВИИ СИЛЬНОГО СЛУЧАЙНОГО ПОТЕНЦИАЛА

М. Ю. Каган^{*}, *Е. А. Мазур*^{**}

*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
101000, Москва, Россия*

*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
115409, Москва, Россия*

*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123122, Москва, Россия*

*Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук
119334, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 27 сентября 2020 г.,

после переработки 12 октября 2020 г.

Принята к публикации 12 октября 2020 г.

Рассчитаны свойства двумерной электронной системы с низкой плотностью ($n \ll 1$) с сильным локальным притяжением Хаббарда $U > W$ (W — ширина зоны) в присутствии сильного случайного потенциала V , равномерно распределенного в диапазоне от $-V$ до $+V$. Учитывались электронные прыжки только на соседние узлы квадратной решетки при $W = 8t$. Расчеты осуществлялись на решетке 24×24 с периодическими граничными условиями. В рамках подхода Боголюбова – де Жена наблюдалось появление неоднородных состояний пространственно разделенной ферми-бозе-смеси куперовских пар и неспаренных электронов с образованием капель бозонов разного размера в матрице непарных нормальных электронных состояний. Наблюдался эффект уменьшения размера капли (от более крупных капель до отдельных биэлектронных пар) при уменьшении электронной плотности при фиксированных значениях притяжения Хаббарда и случайного потенциала. Полученные результаты важны для построения фазовой диаграммы и понимания природы фазового перехода между сверхпроводящим, нормальным металлическим и локализованными состояниями в квазидвумерном (тонкая пленка) грязном металле. В более практическом смысле полученные результаты интересны также для экспериментального внедрения сверхпроводящих кубитов на квантовых схемах с высоким импедансом в гранулированных сверхпроводниках.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040118

1. ВВЕДЕНИЕ

Влияние сильного беспорядка на сверхпроводимость уже давно является предметом большого интереса как теоретически [1–7], так и экспериментально в тонких пленках [8, 9] и гранулированных сверхпроводниках, используемых в качестве плат-

формы для сверхпроводящих кубитов [10]. Общепринятой физической картины разрушения сверхпроводящего состояния и природы нормального состояния пока не выявлено. Часть теоретических работ [1–7] предполагает, что амплитуда спаривания $\Delta(r)$ однородна в пространстве (не зависит от r) даже для сильно неупорядоченной системы. В работах [7, 11, 12] было решено уравнение Боголюбова – де Жена в реальном пространстве, однако квазибозонный предел низких электронных плотностей не был полностью исследован.

* E-mail: mkagan@hse.ru

** E-mail: eugen_mazur@mail.ru

В настоящей статье мы рассмотрим двумерную модель Хаббарда с притяжением U для s -волнового сверхпроводника при низких температурах T в сильном случайном потенциале V и проанализируем эту модель подробно в рамках подхода Боголюбова–де Жена (БдЖ), принимая во внимание как решения с положительными значениями энергии E_n , так и решения с отрицательными значениями энергии электронной системы [13, 14]. Наша цель состоит в том, чтобы наблюдать, как амплитуда локального спаривания $\Delta(r)$ изменяется в пространстве в присутствии беспорядка в диапазонах параметров как сильного эффекта притяжения Хаббарда $U > W$, так и сильного беспорядка $V > W$ при низких концентрациях электронов $n = 0.125\text{--}0.3$, которые еще не проанализированы. Мы также ставили цель изучить влияние пространственных неоднородностей на физически значимые корреляционные функции.

Следует отметить, что в последнее время экспериментальные усилия для создания сверхпроводящих кубитов на квантовых схемах с высоким импедансом в гранулированных сверхпроводниках [10] снова делают актуальной проблему построения фазовых диаграмм и понимания природы фазового перехода из нормального состояния в сверхпроводник и перехода изолятор–сверхпроводник в тонких пленках грязного металла s [9, 10]. В заключение приведем некоторые комментарии о следствии наших результатов в отношении интерпретации опытов на неупорядоченных тонких пленках.

2. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ НЕОДНОРОДНОГО СЛУЧАЯ И ПОСТАНОВКА МОДЕЛИ

Рассмотрим двумерную модель Хаббарда неупорядоченного сверхпроводника s -типа с короткодействующим притяжением между носителями, описываемую гамильтонианом:

$$H = -t \sum_{i,j,\sigma} (c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i,\sigma} (V_i - \mu) n_{i\sigma}. \quad (1)$$

Здесь первое слагаемое описывает кинетическую энергию, t соответствует перескокам на соседние узлы квадратной решетки, $U = -|U|$ — амплитуда хаббардовского потенциала притяжения на одном узле, $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) — операторы рождения (уничтожения) электрона со спином σ на узле решетки r_i , $n_{i\sigma}$ — локальная плотность электронов на узле i для одной

компоненты спина, μ — химический потенциал. Случайный потенциал V_i выбирается независимо для каждого узла и регулируется с помощью случайного равномерного распределения в диапазоне $[-V, V]$. Таким образом, V контролирует интенсивность диагонального беспорядка в системе.

Запишем уравнения БдЖ для функции Боголюбова, т. е. для боголонов в виде «электронов» и в виде «дырок», участвующих в спаривании [13, 14]:

$$-t \sum_{\pm\hat{x}, \pm\hat{y}} u_n(r_i \pm \hat{x}, \pm\hat{y}) + (U(r_i) + V_i - \mu) \times u_n(r_i) + \Delta_i \cdot v_n(r_i) = E_n u_n(r_i), \quad (2)$$

$$\Delta_i^* \cdot u_n(r_i) + t \sum_{\pm\hat{x}, \pm\hat{y}} v_n(r_i \pm \hat{x}, \pm\hat{y}) - (U(r_i) + V_i - \mu) v_n(r_i) = E_n v_n(r_i). \quad (3)$$

Здесь E_n — энергия возбуждений в системе, μ — химический потенциал в присутствии случайного диагонального беспорядка V , $U(r_i)$ — потенциал среднего поля на узле r_i [13, 14], $\Delta(r_i)$ — потенциал спаривания на узле r_i [13, 14]. Для того, чтобы правильно учитывать как потенциал спаривания, так и химический потенциал μ в системе, что требует учета состояний, лежащих ниже уровня Ферми, мы будем удерживать решения системы (1), (2) как с положительными значениями энергии E_n , так и с отрицательными значениями энергии электронной системы. Наиболее важные вклады в плотность состояний электронов $n(r_i, E)$ на узле решетки r_i приводят к выражению [13]

$$n(r_i, E) = 2 \sum_n \left[|u_n(r_i)|^2 f_n + |v_n(r_i)|^2 (1 - f_n) \right] \times \delta(E - E_n), \quad (4)$$

где $f_n = 1 / [\exp(E_n/kT) + 1]$ — функция распределения Ферми–Дирака для заданного значения энергии возбуждения E_n . Химический потенциал μ определяется из условия самосогласования для плотности частиц n (что соответствует среднему числу электронов на узле):

$$\frac{1}{N} \sum_i n_i = 2 \sum_i \sum_n \left[|u_n(r_i)|^2 f_n + |v_n(r_i)|^2 (1 - f_n) \right] = n. \quad (5)$$

Чтобы получить условия нормировки для собственных функций, мы исходим из соотношения [14]

$$\sum_n [u_n(r) u_n^*(r') + v_n(r) v_n^*(r')] = \delta(r - r').$$

Предполагаем, что как r , так и r' лежат в пределах ячейки с радиус-вектором R_i . Проинтегрируем по r' по площади ячейки R_i при условии, что внутри ячейки $u_n(r) = u_n(R_i)$, $v_n(r) = v_n(R_i)$. Пусть S_i будет равно площади элементарной ячейки, $S_i = S/N$. В результате получаем

$$\sum_n [u_n(R_i) u_n^*(r') + v_n(R_i) v_n^*(r')] S_i = \int_{S_i} dr \delta(r - r') = 1.$$

Было принято во внимание, что в процессе интегрирования по ячейке R_i по r в процессе интегрирования переменная r совпадает с r' . Теперь проинтегрируем полученное выражение по r' в предположении выполнения равенства

$$\sum_n [u_n(R_i) u_n^*(R_i)^* + v_n(R_i) v_n^*(R_i)] S_i S_i = S_i$$

внутри ячейки, так что

$$\sum_n [u_n(R_i) u_n^*(R_i)^* + v_n(R_i) v_n^*(R_i)] = \frac{1}{S_i} = \frac{N}{S} = n_{knots},$$

где n_{knots} — концентрация ячеек (узлов) в простейшем случае, рассматриваемом здесь. Когда мы выполняем пространственное усреднение в пределах элементарной ячейки типа $\sum_n [v_n(r_i)]^2$, появляется множитель $n_{knots}^{-1} S$, который приводит к исчезновению множителя n_{knots} в правой стороне условия нормировки. Следовательно, можно эффективно записать условие нормировки в стандартной форме $\sum_n |u_n(r_i)|^2 + \sum_n |v_n(r_i)|^2 = 1$. При суммировании следует учитывать как состояния с положительной энергией, так и состояния с отрицательной энергией. В формулах (1), (2) в дополнение к случайному потенциалу V_i учитывается потенциал среднего поля $U(r_i)$ на узле r_i [13, 14]. Это дает [15]

$$U_i \equiv U(r_i) = -U \sum_n [|u_n(r_i)|^2 f_n + |v_n(r_i)|^2 (1 - f_n)]. \quad (6)$$

Вводя хартри-фоковский сдвиг химического потенциала $\mu_i = \mu + U \frac{n_{el}(r_i)}{2}$, перепишем формулы (2), (3) через эффективный химический потенциал μ_i , который зависит от сайта i :

$$-t \sum_{\pm \hat{x}, \pm \hat{y}} u_n(r_i \pm \hat{x}, \pm \hat{y}) + (V_i - \mu_i) u_n(r_i) + \Delta_i \cdot v_n(r_i) = E_n u_n(r_i), \quad (7)$$

$$\Delta_i^* \cdot u_n(r_i) + t \sum_{\pm \hat{x}, \pm \hat{y}} v_n(r_i \pm \hat{x}, \pm \hat{y}) - (V_i - \mu_i) v_n(r_i) = E_n v_n(r_i). \quad (8)$$

В (7), (8) μ_i имеет вид

$$\mu_i = \mu + U \sum_n [|u_n(r_i)|^2 f_n + |v_n(r_i)|^2 (1 - f_n)]. \quad (9)$$

В то же время потенциал спаривания $\Delta(r_i)$, фигурирующий в (2), (3), (7), (8), может быть записан как [13, 14]

$$\Delta(r_i) = U \sum_n u_n(r_i) v_n^*(r_i) (1 - 2f_n). \quad (10)$$

Исходя из начального предположения для $\Delta_i(r_i) \equiv \Delta_i$ и μ , мы численно решали уравнения БдЖ (2)–(10) для собственных значений E_n и для собственных векторов $(u_n(r_i))$, $(v_n(r_i))$ на конечной 2D-решетке из $N \times N$ узлов с периодическими граничными условиями. Затем рассчитывали величины амплитуд $(u_n(r_i))$, $(v_n(r_i))$ для конкретных узлов и устанавливали численное значение концентрации боголонов вида u в сумме по состояниям $n_{u,\sigma}(r_i) = \sum_n |u_n(r_i)|^2 f_n$ и боголонов вида v $n_{v,\sigma}(r_i) = \sum_n |v_n(r_i)|^2 (1 - f_n) \neq n_{u,\sigma}(r_i)$ при низких температурах. Далее мы рассчитывали амплитуду локального спаривания $\Delta(r_i) = U \sum_n u_n(r_i) v_n^*(r_i) (1 - 2f_n)$ на каждом узле и значение плотности боголонов типа u и v на узлах r_i . Мы повторяли итерационный процесс вплоть до достижения самосогласования для Δ_i и n_i на каждом узле.

3. МЕТОДИКА РАСЧЕТА

В данной работе мы исследовали решетку с 24×24 ячейками с периодическими граничными условиями. Расчет начинался со случайными значениями Δ_i и $\tilde{\mu}_i$ на каждом из узлов, после чего выполнялась процедура численной диагонализации полученного гамильтониана с помощью библиотеки программ языков программирования `maple` и `math-lab`. В результате были найдены собственные векторы $u_n(r_i)$, $v_n(r_i)$ и собственные значения E_n системы.

После этого Δ_i и $\tilde{\mu}_i$ вновь пересчитывались из соотношений (10) и (9) и снова использовались в качестве начальных значений на входе самосогласованного цикла. Цикл выполнялся до сходимости значений Δ_i и $\tilde{\mu}_i$ на каждом узле с заданной точностью. Длительность процедуры на компьютере НИЦ

КИ составляла несколько часов. Модель (1) исследовалась для диапазона параметров $1 < |U|/t < 10$ и $0 < V/t < 12$ на решетке размером $N = 24 \times 24$ узла. В исследовании также рассматривались низкие концентрации $n = 0.125$ при низкой температуре. Величина энергетической щели E_{gap} определяется как наименьшее положительное собственное значение энергии. Соответственно, Δ_i — значение параметра порядка на i -м узле, V — амплитуда беспорядка, значения E_{gap} и Δ_{op} , так же как и все результаты, если не указано иное, были усреднены по 25 запускам с различными распределениями случайного беспорядка. В расчетах также использовался программный пакет QUANTUM ESPRESSO Version 6.2.1 [16, 17] и расчетные визуализаторы.

4. ТЕНДЕНЦИИ В СИСТЕМЕ С УМЕРЕННЫМ БЕСПОРЯДКОМ ПРИ УВЕЛИЧЕНИИ U

Первый вариант расчета в рамках уравнений Боголюбова–де Жена (2)–(10) был выполнен при температуре, близкой к нулю, на узлах сетки $N = 24 \times 24$ при крайне низкой концентрации электронов $n = 0.15$ в пределе очень сильного притяжения между электронами $U = -10t$. Расчеты выполнены для умеренного беспорядка $V = 2$. На рис. 1 показаны тенденции, проявляющиеся при увеличении $|U|$ в виде возникающих зависимостей пространственного распределения электронной плотности (левый столбец), электронной щели Δ (правый столбец) и величины, характеризующей сосуществование дырок и электронов в реальных условиях (смешивание частица–дырка) (средний столбец). Видно, что последняя величина коррелирует с Δ . Распределения всех величин при увеличении U (что влияет на эффект локализации на отдельных участках) представлены на рис. 1.

Как видим из рис. 1, при низких концентрациях электронов $n = 0.15$ система даже при умеренных значениях беспорядка проявляет тенденцию к образованию капель параметра порядка, пространственное расположение которых коррелирует с пространственным распределением плотности электронов в системе (правый столбец), а также со значением, характеризующим сосуществование дырок и электронов в реальном пространстве. Электроны в системе расположены в областях с малыми значениями беспорядка. При рассмотренных параметрах система не является изолятором, так как распределение электронов в пространстве не разбилось на отдель-

ные изолированные области. При малых концентрациях система проявляет свойства бозонного металла, носителями которого являются бозонные кластеры, состоящие из нескольких электронных пар.

Чтобы охарактеризовать относительную локализацию пар, на рис. 2 показаны графики зависимости математического ожидания $\Delta_i \Delta_j$, описывающего корреляцию пространственного расположения пар, для ряда значений концентрации для данных U и V . В приведенных выше расчетах мы не усредняли конфигурации беспорядка, все результаты представлены для одной реализации беспорядка.

Как видно из рис. 2в, значение концентрации $n = 0.4$ соответствует близости системы к переходу в состояние с полным отсутствием спаривания электронов (с исчезновением параметра порядка одновременно на всех узлах). Из рис. 2 следует, что при всех значениях концентрации электронов в системе устанавливается дальний порядок, так что преобладает состояние с парами, расположенными на максимальном расстоянии друг от друга (рис. 2). Как видно из рис. 2, одной и той же пространственной конфигурации взаимного расположения электронных пар соответствует много значений коррелятора. Таким образом, система не демонстрирует четкую зависимость математического ожидания $\Delta_i \Delta_j$ от взаимного пространственного расположения пар электронов. Анализ поведения математического ожидания $\Delta_i \Delta_j$ (рис. 2), которое отвечает за пространственное распределение пар в системе, не позволяет сделать вывод, что при этих параметрах система является диэлектриком. Отметим, что в данном разделе мы указали определенные пределы значений параметров, соответствующих переходу системы в состояние изолятора.

5. РАСЧЕТЫ ДЛЯ ЧРЕЗВЫЧАЙНО НИЗКИХ ПЛОТНОСТЕЙ И СЛАБОГО БЕСПОРЯДКА

Расчеты, аналогичные [18–20], но для ранее не исследованной области предельно низкой концентрации электронов $n = 0.125$, были выполнены при ненулевой температуре на сетке $N = 24 \times 24$ узлов для $U = -10t$. Результаты предыдущего раздела дополнены расчетами для слабого беспорядка с амплитудами $V = 0.25, 2.0, 4.0, 10.0$. Для $U = 10$ и $V = 2$ рис. 3 показывает, как увеличение концентрации n влияет на характер и масштаб уменьшения среднего параметра спаривания Δ_{op} и на величину E_{gap} при изменении концентрации от $n = 0.18$ до $n = 0.20$. Результаты усреднены по пяти конфигурациям.

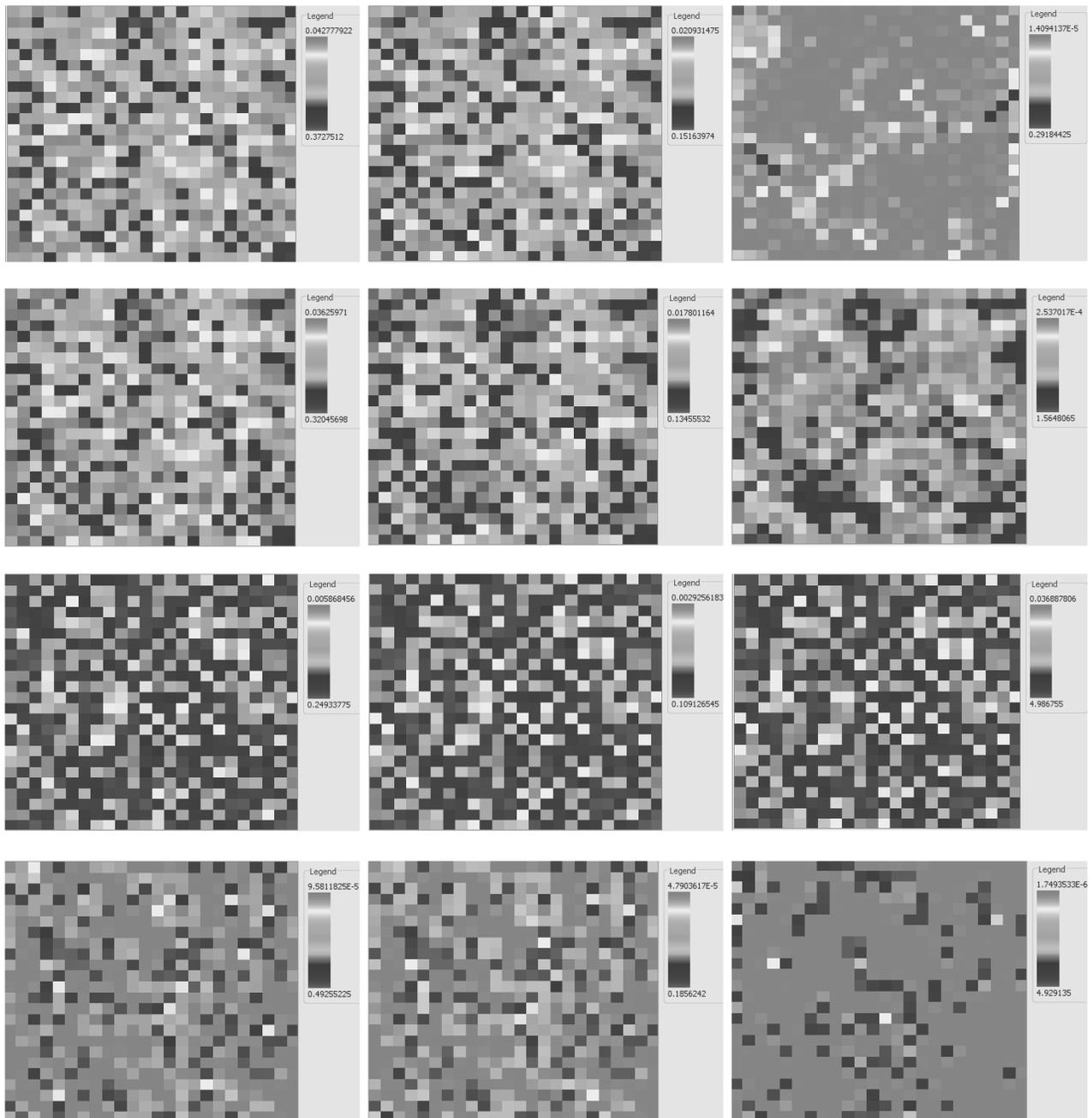


Рис. 1. Пространственное распределение щели в спектре электронов Δ (правый столбец), концентрация электронов (левый столбец) и величина, характеризующая сосуществование дырок и электронов в реальном пространстве (средний столбец). Верхняя строка соответствует $|U| = 2t, V = 2t$, вторая строка при отсчете сверху вниз соответствует $|U| = 4t, V = 2t$, третья строка соответствует $|U| = 10t, V = 2t$, нижняя строка, представленная здесь для сравнения, соответствует $|U| = 10t, V = 10t$. Расчеты выполнены для малой электронной плотности $n = 0.15$

Наличие минимума на зависимости E_{gap} от степени разупорядочения V (рис. 4a) согласуется с результатами [18–20]. На рис. 5, 6 показаны зависимости пространственного распределения Δ (левые столбцы), электронной плотности (правые столбцы)

и величины, характеризующей сосуществование дырок и электронов в реальном пространстве (смешивание частиц с дырками, средние столбцы) для различных амплитуд V степени беспорядка в системе. Для каждого конкретного изображения мы исполь-

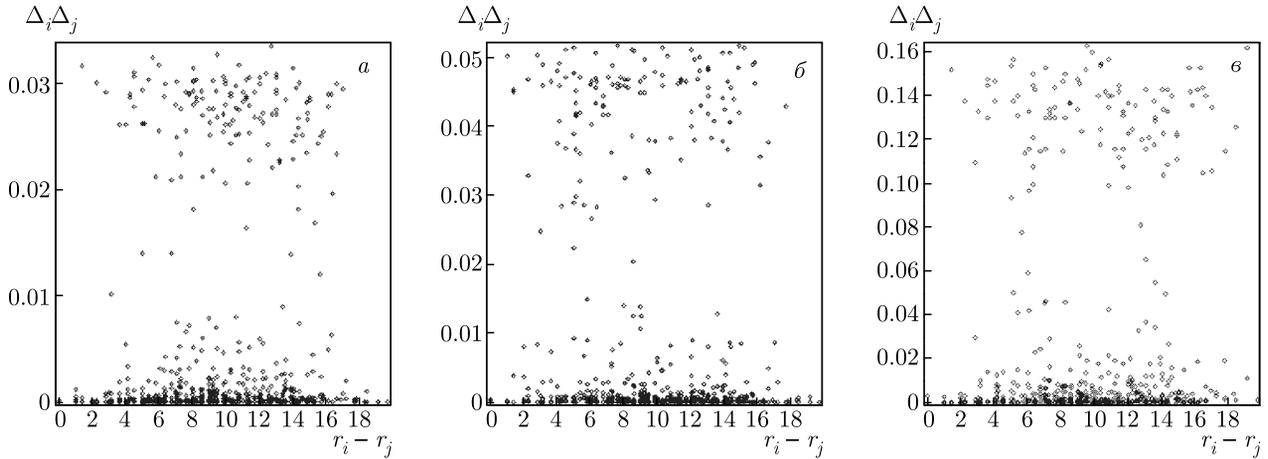


Рис. 2. Зависимости математического ожидания $\Delta_i \Delta_j$, отражающего пространственное распределение электронных пар, от расстояния между парами, выраженного в постоянных решетки. Серия графиков представлена с изменением средней концентрации для $V = 8$ и $U = 6$: $n = 0.07$ (а), 0.30 (б), 0.40 (в)

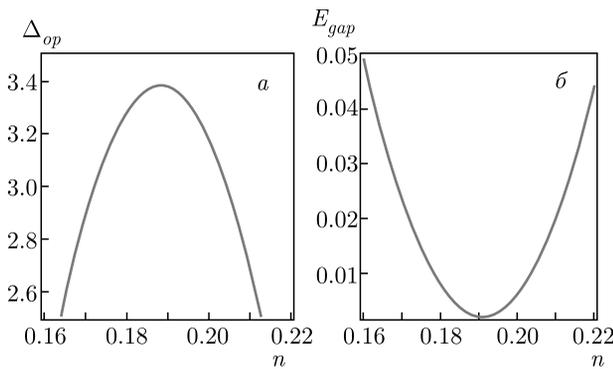


Рис. 3. Зависимости среднего параметра спаривания Δ_{op} (а) и величины E_{gap} (б) от электронной плотности в диапазоне от $n = 0.16$ до $n = 0.22$, $U/t = -10$, $V = 2$, температура $T = 0.01$ для решетки с 24×24 узлами

зuem собственную шкалу контрастности от белого до черного, поэтому некоторые конфигурации выглядят блеклыми по сравнению с другими из-за конкретной реализации беспорядка.

6. РАСЧЕТЫ ДЛЯ МАЛЫХ КОНЦЕНТРАЦИЙ ЭЛЕКТРОНОВ В ДИАПАЗОНЕ БЕСПОРЯДКА ОТ НИЗКИХ ДО ВЫСОКИХ ЗНАЧЕНИЙ

В данном разделе представлены результаты расчетов в широком диапазоне степени беспорядка с амплитудами $V = 0.5, 6.0, 10.0$ для системы 24×24 с плотностью $n = 0.15$.

Из рис. 5 видно, что до определенных значений V (порядка 5) четко прослеживается корреляция между левым и средним столбцами. На рис. 5 показан переход от капель параметра порядка к отдельным парам электронов — бозонам, с увеличением степени беспорядка в системе. Вопрос относительно перехода к предельной величине беспорядка, при котором наша система переходит от бозе-металла к бозе-изолятору, на рис. 5 остается открытым и требует дополнительного исследования. Таким образом, наша задача разделена на две независимые проблемы: проблему бозе-металла и проблему бозе-изолятора для значений беспорядка, превышающих критическое значение, с распределением капель параметра порядка, содержащих бозе-состояния. Сравнивая все три столбца рис. 5, можно сделать вывод, что существует также фаза, в которой большинство электронных пар локализовано, а меньшая часть делокализованных пар движется на фоне такого состояния бозе-изолятора.

На рис. 6 показаны значения $|u_n(r_i)|^2 + |v_n(r_i)|^2$ с положительными значениями энергии для первых трех возбуждений для $V = 0.5, 4$.

7. РАСЧЕТЫ ДЛЯ ВЫСОКОЙ СТЕПЕНИ БЕСПОРЯДКА В ДИАПАЗОНЕ ЭЛЕКТРОННОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ ОТ НИЗКИХ $n = 0.15$ ДО СРЕДНИХ $n = 0.32$ ЗНАЧЕНИЙ

В данном разделе представлены результаты расчетов в диапазоне электронных плотностей от низкой $n = 0.15$ до умеренной $n = 0.30$ величины с

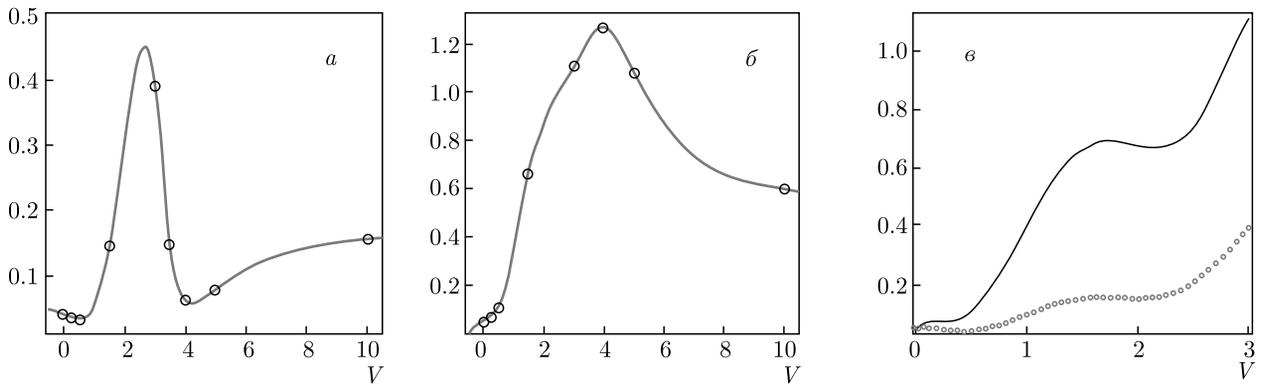


Рис. 4. Зависимости E_{gap} (а) и Δ_{op} (б) от амплитуды беспорядка V . $n = 0.05$, $U/t = -8$ для решетки с 24×24 узлами. На рис. в оба графика показаны более подробно в тех же пределах: E_{gap} — символы, Δ_{op} — сплошная линия

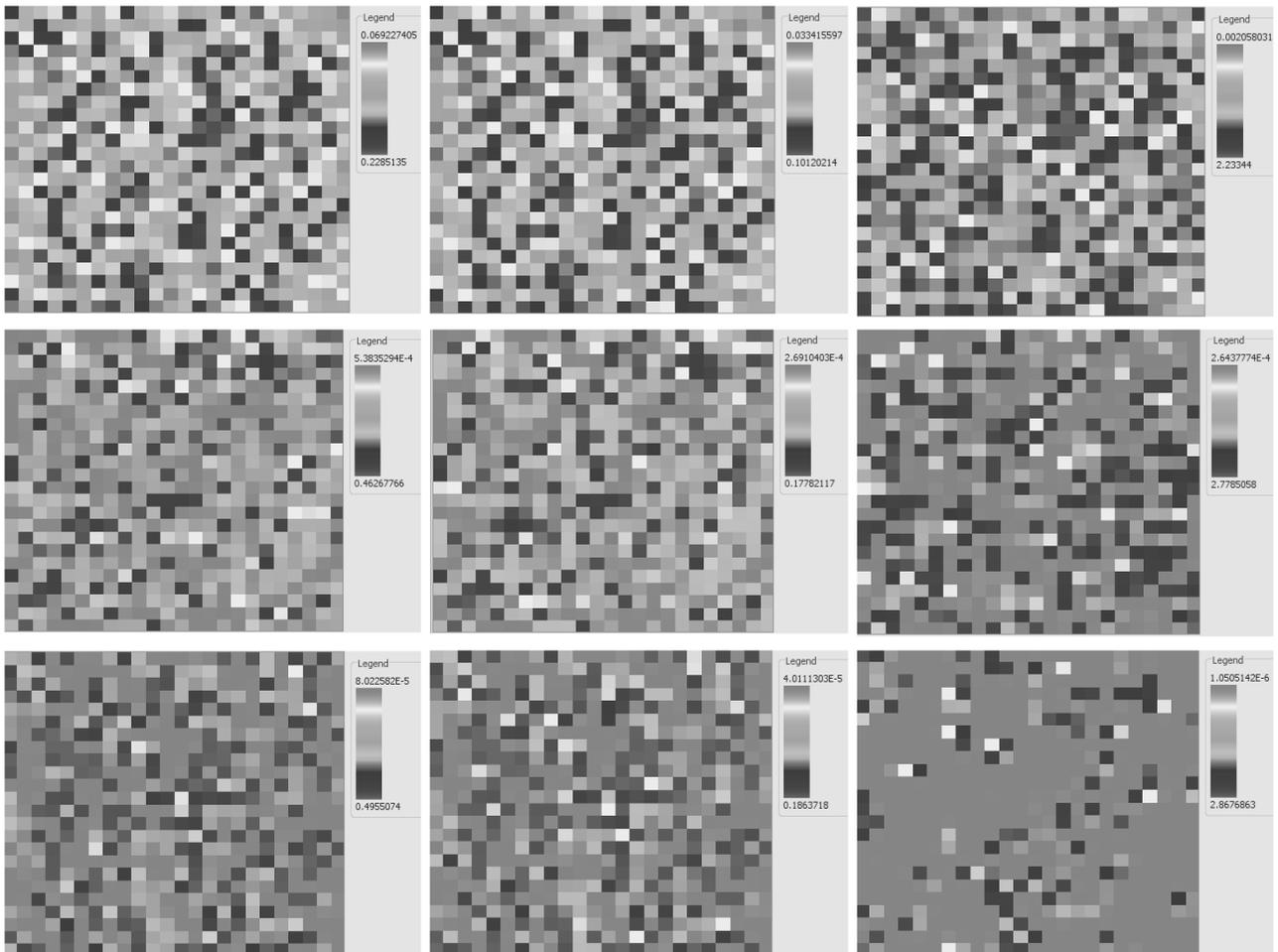


Рис. 5. Двумерное распределение электронной плотности (левый столбец), электронно-дырочного перемешивания (средний столбец) и параметра порядка (правый столбец) при $n = 0.15$, $U/t = -6$ на решетке 24×24 с амплитудой беспорядка $V/t = 0.5$ (верхняя строка), $V/t = 6.0$ (средняя строка), $V/t = 10.0$ (нижняя строка)

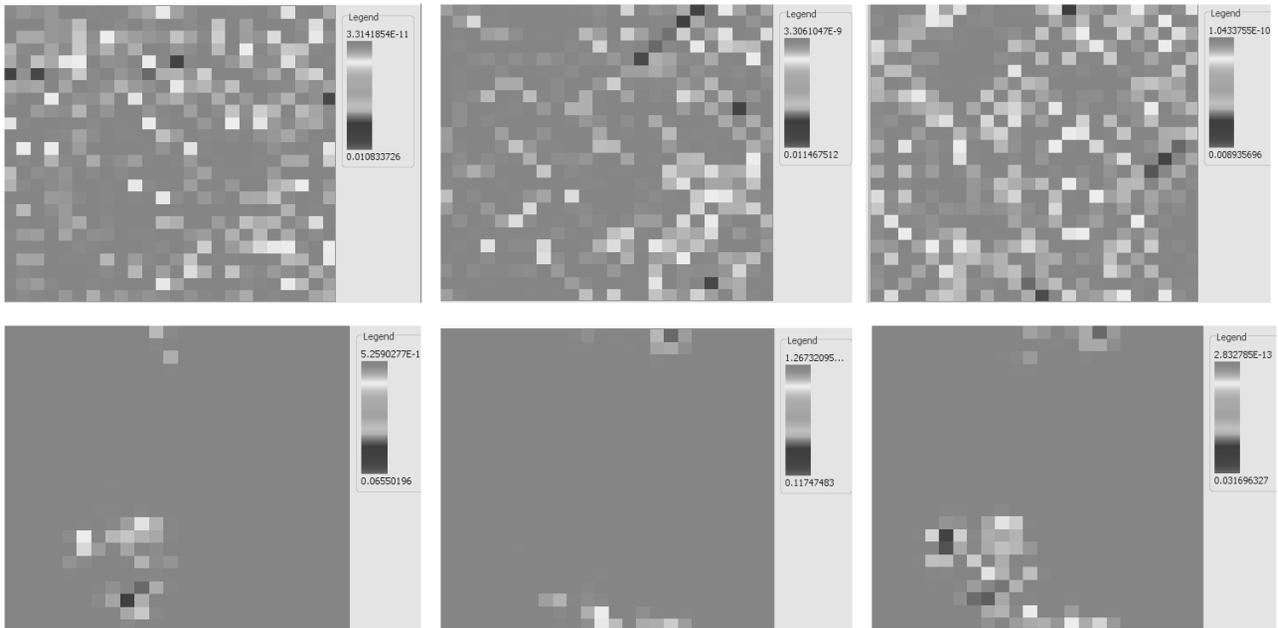


Рис. 6. Показаны три возбуждения для набора значений $V = 0.5$, $U = 6$, $t = 0.01$, $n = 0.3$ (верхняя строка), для набора значений $V = 4$, $U = 6$, $t = 0.01$, $n = 0.15$ (нижняя строка). Слева направо номер возбуждения для данного значения U увеличивается с соответствующими энергиями 0.000088, 0.004876, 0.013679 для верхней строки и энергиями 0.102606, 0.172969, 0.217828 для нижней строки

амплитудой беспорядка $V = 8$ и амплитудой притяжения Хаббарда $U = 6$ для решетки с 24×24 узлами. Также показаны отдельные случайные возбуждения.

Как видим, для плотности $n = 0.11$ появляются одиночные пары или двоянные пары электронов (квартеты) в виде пар, соседствующих на прилегающих ячейках (рис. 7), при $n = 0.17$ наблюдаются большие капли параметра порядка (рис. 8), в результате чего распределение электронов имеет форму капель с большим числом электронных пар в каждой электронной капле. Пики двумерного распределения электронной плотности и параметра порядка касаются друг друга, но не перекрываются. Капли параметра порядка сливаются в перколяционный кластер (сетевой каркас или network) цепочек, напоминающих дерево с большим количеством ветвей (рис. 8), которые практически не испытывают разрывов вдоль их длины. При больших плотностях $n = 0.30$ возникающий сетевой каркас параметра порядка в этом случае концентрируется в пространственных областях в виде «долин» между пиками электронной плотности (рис. 9).

На рис. 10 показаны три возбуждения с наименьшей энергией для одной конкретной реализации беспорядка.

8. ВЫВОДЫ

Как уже отмечалось в предыдущих теоретических работах [7, 11, 12, 21–23], специфические особенности в двумерном случае полной фазовой диаграммы моделей типа Хаббарда–Андерсона (с локальным взаимодействием Хаббарда на узле и с диагональным беспорядком) связаны с тем, что в квазидвумерных системах помимо стандартного фазового перехода сверхпроводника к нормальному металлу в определенном диапазоне параметров возможен также «прямой» переход из сверхпроводящего состояния в диэлектрическое локализованное состояние без возникновения промежуточного состояния в виде нормального металла. Похожая ситуация проявляется себя в экспериментальных исследованиях сверхпроводимости и локализации в грязных тонких пленках [8, 9]. Это обстоятельство делает расчеты, представленные в данной статье, весьма актуальными.

Приведем основные результаты работы.

1. По мере роста беспорядка пространственное распределение локальной амплитуды спаривания $\Delta(r)$ сначала принимает форму отдельных капель, а затем — отдельных пар.

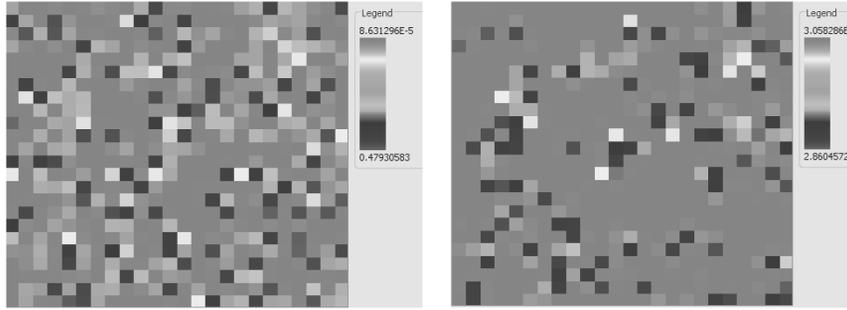


Рис. 7. Двумерное распределение электронной плотности (слева) и параметра порядка (справа) для $n = 0.11$, $U/t = -6$ на решетке 24×24 с амплитудой беспорядка $V/t = 8$

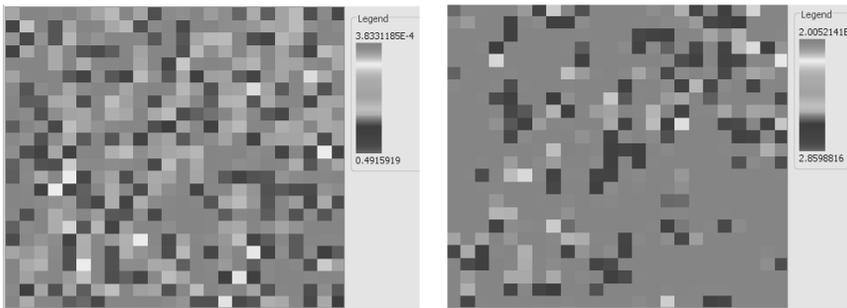


Рис. 8. Двумерное распределение электронной плотности (слева) и параметра порядка (справа) для $n = 0.17$, $U/t = -6$ на решетке 24×24 с амплитудой беспорядка $V/t = 8$

2. Спектральная щель в одночастичной плотности состояний сохраняется даже при большом беспорядке, несмотря на растущее число пространственных узлов с $\Delta(r) = 0$. Детальное понимание этого эффекта возникает из исследования пространственного изменения функции $\Delta(r)$ и собственных функций уравнений Боголюбова – де Жена. На наш взгляд, этот эффект нуждается в пересмотре, с рассмотрением модели типа ферми–бозе-смеси, важной чертой которой является сосуществование электронных пар и одиночных неспаренных электронов.

Подчеркнем, что наши результаты были получены в пределе сильной связи $|U|/t \gg 1$ и малой плотности $n \ll 1$. Более того, предельные значения в проведенных нами расчетах соответствуют случаю $|U|/t = 10$ и $n = 0.125$ для двумерной квадратной решетки с шириной зоны $W = 8t$. В этом предельном случае простые оценки с использованием формул, приведенных в [1–3], дают $\varepsilon_F \sim 0.8t$, $|E_b| \sim 0.2t$ соответственно для энергии Ферми и энергии связи электронной пары. Таким образом, $|E_b| < 2\varepsilon_F$, и мы все еще находимся в области БКШ для БКШ–БЭК-кроссовера. Если мы введем удоб-

ные обозначения для энергии связи, для энергии Ферми и для зонной массы электрона:

$$|E_b| = \frac{1}{ma^2}, \quad \varepsilon_F = \frac{k_F^2}{2m}, \quad m = \frac{1}{2td^2},$$

где d – расстояние между узлами, a – радиус пары и k_F – импульс Ферми, то безразмерный параметр БКШ–БЭК-кроссовера, связанный с двумерностью электронной плотности, $n_{2D} = k_F^2/2\pi$, для параболического спектра принимает вид

$$n_{2D}a^2 = \frac{k_F^2 a^2}{2\pi} = \frac{2\varepsilon_F}{|E_b|} \frac{1}{2\pi} \approx \frac{8}{6.28} \geq 1$$

и для предельных параметров задачи оказывается близким к 1.

Это показывает, как обсуждалось в [1], что, хотя мы находимся в области БКШ для БКШ–БЭК-кроссовера, электронные пары уже достаточно компактны, они слабо перекрываются и почти касаются друг друга. Таким образом, мы действительно очень близки к пределу, когда пары начинают «раздавливаться» друг друга, т.е. к пределу ферми–бозе-смеси компактных пар и неспаренных одиночных электронов.

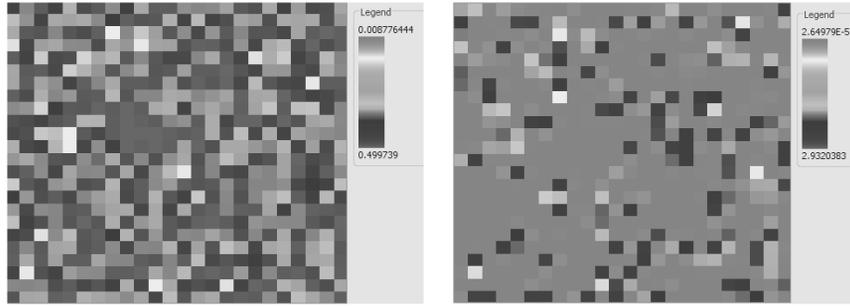


Рис. 9. Двумерное распределение электронной плотности (слева) и параметра порядка (справа) для значений $n = 0.30$, $U/t = -6$ на решетке 24×24 с амплитудой беспорядка $V/t = 8$

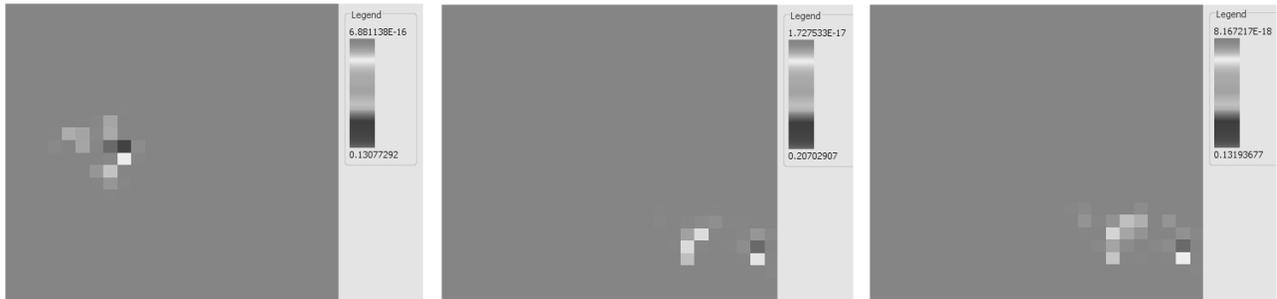


Рис. 10. Три возбуждения с наименьшей энергией для одной реализации беспорядка для набора значений $V = 8$, $U = 6$, $n = 0.28$. Слева направо номер возбуждения увеличивается для данного набора значений U , V , n : энергия возбуждения $E_1 = 0.070$ (слева), энергия возбуждения $E_2 = 0.084$ (посередине), энергия возбуждения $E_3 = 0.107$ (справа)

Отметим, что модель ферми–бозе-смеси чрезвычайно богата и может содержать очень разнообразную физику, в частности, с возможностью наноразмерного фазового разделения в системе и образованием пространственно разделенных фермионных и бозонных кластеров и многочастичных капель различных композиций (в зависимости от знака и относительной величины конкурирующих бозон-бозонного, бозон-фермионного и фермион-фермионного взаимодействий U_{BB}, U_{FF}, U_{FB} , а также отношения плотностей двух фаз n_B, n_F [24, 25]). Модель, изучаемая в данной статье, явно учитывает роль фермион-фермионных взаимодействий в виде потенциала спаривания $\Delta(r_i)$ на узле r_i , а также бозон-фермионное взаимодействие U_{FB} в виде потенциала среднего поля $U(r_i)$. Описание бозон-бозонного взаимодействия электронных пар U_{BB} требует дальнейшего изучения в рамках обобщенной и расширенной модели.

Подчеркнем, что все результаты этой работы были получены в подходе Боголюбова–де Жена, приводящем к локальному минимуму функционала свободной энергии, без каких-либо дополнитель-

ных приближений. Это означает, в частности, что состояние с более равномерным пространственным распределением пар в системе («равномерно перемешанное» решение для ферми–бозе-смеси пар и распаренных электронов) должно соответствовать более высокой энергии, чем рассмотренное нами неоднородное состояние. Более строгое рассмотрение задачи требует анализа парциальных сжимаемостей компонент ферми–бозе-смеси для того, чтобы строго доказать неустойчивость равномерно перемешанного состояния относительно возможности наноразмерного расслоения на фазы с образованием капель одной (состоящей из пар) бозонной фазы внутри матрицы другой (неспаренной) фермионной фазы [25–27]. Такой анализ будет проводиться отдельно вместе с более строгим определением природы парных состояний внутри капель (бозе-металл или бозе-изолятор), а также состояний в распаренной фермионной матрице (нормальный фермионный металл или фермионный изолятор).

Дополнительный вопрос в этом контексте связан с фазовой когерентностью и сверхпроводимостью. Согласно [24], один из возможных сценариев сверх-

проводящего перехода в пространственно разделенной ферми-бозе-смеси может быть связан с туннелированием пар из одного бозонного кластера в соседний через изолирующий фермионный барьер, с установлением при этом макроскопического дальнего порядка и фазовой когерентности в системе.

Отметим также, что все расчеты в данной работе были выполнены при температуре, близкой к нулю, когда теория среднего поля применима для малой плотности двумерного ферми-газа (см. [1–4] и ссылки в этих работах) и когда флуктуационные поправки Березинского – Костерлица – Таулеса [28, 29] малы. Температурная эволюция системы в квазибозонной области параметров (области параметров, соответствующей появлению ферми-бозе-смеси) также очень интересна [1–3, 24, 26, 30] и требует тщательного исследования.

С увеличением степени беспорядка происходит существенное уменьшение жесткости для макроскопической волновой функции сверхпроводящего состояния и диагональных корреляций. Ожидается также, что, когда бозон-бозонное взаимодействие U_{BB} будет включено в модель для более детального описания капель, подвижность таких капель будет демонстрировать псевдощелевые свойства в спектре.

В заключение обсудим более детально эволюцию размеров капель с изменением параметров задачи. В частности, представляется весьма конструктивным зафиксировать предельное значение сильного хаббардовского притяжения на узле $|U|/t = 10$ и постепенно увеличивать электронную плотность, двигаясь от $n = 0.125$ к большим электронным плотностям, более близким к половинному заполнению. В этом случае наши результаты показывают, что когда мы увеличиваем электронную плотность, сначала происходит переход от одиночных электронных пар к более крупным каплям, содержащим большое число пар. И только после этого, при дальнейшем увеличении плотности электронов в нашей системе образуется большой перколяционный кластер, содержащий каркасную сеть (network) из парных состояний электронов.

Отметим также, что недавние экспериментальные исследования по различным реализациям сверхпроводящих кубитов (в частности, флакс-кубитов) снова повысили интерес к построению глобальной фазовой диаграммы и к более детальному пониманию природы фазовых переходов сверхпроводник–нормальный металл и сверхпроводник–изолятор в системах с понижен-

ной размерностью ($D = 1, 2$). В этом контексте исследования резонансных контуров с высокими значениями импеданса в гранулированных сверхпроводниках, в частности, в сверхпроводящих (полосатых) страйп-структурах гранулированного алюминия, которые являются альтернативой обычным джозефсоновским переходам, представляются весьма перспективными [23].

Отметим, что образование наноразмерных областей расслоения на фазы (капель) в двумерном электронном газе (2DEG) и в многослойном случае для гетероструктур и интерфейса тонких пленок $\text{SrTiO}_3\text{-LaAlO}_3$ явилось в последние годы предметом интенсивных исследований в целом ряде работ [31–36].

Благодарности. Мы благодарны Р. Ш. Ихсанову, Е. А. Буровскому, К. И. Кугелю, А. Я. Цаленчук, А. С. Васенко, Н. Н. Дегтяренко, А. В. Красавину, А. А. Голубову за полезное обсуждение этой работы.

Финансирование. Работа поддержана Проектом повышения конкурентоспособности НИЯУ «МИФИ» (договор № 02.а03.21.0005, 27.08.2013) с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс для моделирования и обработки данных с исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт» (дотация Министерства образования и науки, рабочий идентификатор RFMEFI62117X0016), <http://ckp.nrcki.ru/>.

М. Ю. К. благодарит за поддержку Программу фундаментальных исследований НИУ «Высшая школа экономики» и Российский фонд фундаментальных исследований (грант № 20-02-00015).

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Yu. Kagan, *Modern Trends in Superconductivity and Superfluidity*, Lect. Notes Phys. **874**, Springer, Dordrecht (2013).
2. M. Yu. Kagan, R. Frésard, M. Capezzali, and H. Beck, *Phys. Rev. B* **57**, 5995 (1998); *Physica B* **284–288**, 347 (2000).
3. Ю. М. Каган, Письма в ЖЭТФ **103**, 822 (2016) [*JETP Lett.* **103**, 728 (2016)].
4. А. И. Ларкин, ЖЭТФ **58**, 1466 (1970) [*Sov. Phys. JETP* **31**, 784 (1970)].

5. Э. З. Кучинский, Н. А. Кулеева, М. В. Садовский, ЖЭТФ **154**, 881 (2018) [JETP **127**, 753 (2018)].
6. A. V. Balatsky, I. Vechter, and J. X. Zhu, Rev. Mod. Phys. **78**, 373 (2000).
7. M. V. Feigel'man, L. B. Ioffe, V. E. Kravtsov, and E. Cuevas, Ann. Phys. **325**, 1390 (2010).
8. A. M. Goldman and N. Markovic, Phys. Today **51**, 39 (1998).
9. D. B. Haviland, Y. Liu, and A. M. Goldman, Phys. Rev. Lett. **62**, 2180 (1989).
10. N. Grunhaupt et al., Nature Mater. **18**, 816 (2019); arXiv:cond-mat1809.10146.
11. I. S. Burmistrov, I. V. Gornyi, and A. D. Mirlin, Phys. Rev. Lett. **108**, 017002 (2012).
12. М. А. Скворцов, М. В. Фейгельман, ЖЭТФ **144**, 560 (2013) [JETP **117**, 487 (2013)].
13. P.-J. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys*, Benjamin, New York (1966).
14. А. В. Свидзинский, *Пространственно-неоднородные задачи теории сверхпроводимости*, Наука, Москва (1982).
15. R. Hausmann, Z. Phys. B **91**, 291 (1991).
16. P. Giannozzi et al., J. Phys.: Condens. Matter **21**, 395502 (2009).
17. P. Giannozzi et al., J. Phys.: Condens. Matter **29**, 465901 (2017).
18. A. Ghosal, M. Randeria, and N. Trivedi, Phys. Rev. Lett. **81**, 3940 (1998).
19. A. Ghosal, M. Randeria, and N. Trivedi, Phys. Rev. B **65**, 014501 (2001).
20. Y. L. Loh and N. Trivedi, in *Conductor-Insulator Quantum Phase Transitions*, ed. by V. Dobrosavljević, N. Trivedi, and J. M. Valles, Jr. (CIQPT Conf., Ohio State Univ., 2008), Oxford Univ. Press, Oxford (2012), Ch. 17, pp. 492–548.
21. R. Combescot, H. Leyronas, and M. Yu. Kagan, Phys. Rev. A **73**, 023618 (2006).
22. S. Wolf, A. Vagov, A. A. Shanenko, V. M. Axt, A. Perali, and J. Albino-Agular, Phys. Rev. B **95**, 094521 (2017).
23. Э. З. Кучинский, И. А. Некрасов, М. В. Садовский, УФН **182**, 345 (2012) [Phys. Usp. **53**, 325 (2012)].
24. А. П. Менушенков, А. В. Кузнецов, А. В. Клементьев, М. Ю. Каган, ЖЭТФ **120**, 700 (2001) [JETP **93**, 615 (2001)].
25. M. Yu. Kagan, I. V. Brodsky, D. V. Efremov, and A. V. Klaptsov, Phys. Rev. A **70**, 023607 (2004).
26. A. V. Turlapov and M. Yu. Kagan, J. Phys.: Condens. Matter **24**, 383004 (2017).
27. М. Ю. Каган, К. И. Кугель, УФН **171**, 577 (2001) [Phys. Usp. **44**, 553 (2001)].
28. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C: Sol. St. Phys. **6**, 1181 (1973).
29. В. Л. Березинский, ЖЭТФ **61**, 1144 (1971) [JETP **34**, 610 (1972)].
30. M. Yu. Kagan and A. Bianconi, Condens. Matter (Switzerland) **4**, 51 (2019).
31. N. Reyren, S. Thiel, A. D. Caviglia, L. F. Kourkoutis, G. Hammerl, C. Richter, C. W. Schneider, T. Kopp, A.-S. Rüetschi, D. Jaccard et al., Science **317**, 1196 (2007).
32. A. Camjayi, K. Haule, V. Dobrosavljević, and G. Kotliar, Nature Phys. **4**, 932 (2008).
33. Ariando, X. Wang, G. Baskaran, J. Liu, Z. Q. Huijben, J. B. Yi, A. Annadi, A. R. Barman, A. Rusydi, S. Dhar, Y. P. Feng et al., Nature Commun. **2**, 188 (2011).
34. N. Tenen, A. Y. Kuntsevich, V. M. Pudalov, and M. Reznikov, Phys. Rev. Lett. **109**, 226403 (2012).
35. В. М. Пудалов, М. Е. Геншензон, Письма в ЖЭТФ **111**, 237 (2020) [V. M. Pudalov and M. E. Gershenson, JETP Lett. **111**, 225 (2020)].
36. V. Tripathi, K. Dhojak, B. A. Aronson, V. V. Rylkov, A. B. Davydov, B. Raquet, M. Goiranand, and K. I. Kugel, Phys. Rev. B **84**, 075305 (2011).

PAIRING BY A DYNAMICAL INTERACTION IN A METAL

A. V. Chubukov^{a*}, *Ar. Abanov*^b

^a *School of Physics and Astronomy and William I. Fine Theoretical Physics Institute, University of Minnesota
Minneapolis, MN 55455, USA*

^b *Department of Physics, Texas A&M University
College Station, TX 77843, USA*

Received December 17, 2020,
revised version December 17, 2020
Accepted for publication December 17, 2020

Contribution for the JETP special issue in honor of I. E. Dzyaloshinskii's 90th birthday

DOI: 10.31857/S004445102104012X

The pairing near a quantum-critical point (QCP) in a metal and its interplay with non-Fermi-liquid behavior in the normal state is a fascinating subject, which attracted substantial attention in the correlated electron community after the discovery of superconductivity (SC) in the cuprates, Fe-based systems, heavy-fermion materials, organic materials, and, most recently, twisted bilayer graphene [1–13]. Itinerant QC models, analyzed in recent years, include models of fermions in spatial dimensions $D \leq 3$, various two-dimensional models near zero-momentum spin and charge nematic instabilities, and instabilities towards spin and charge density-wave order with either real or imaginary (current) order parameter, 2D fermions at a half-filled Landau level, Sachdev – Ye – Kitaev (SYK) and SYK – Yukawa models, strong coupling limit of electron-phonon superconductivity, and even color superconductivity of quarks, mediated by gluon exchange. These problems have been studied analytically and using various numerical techniques [14].

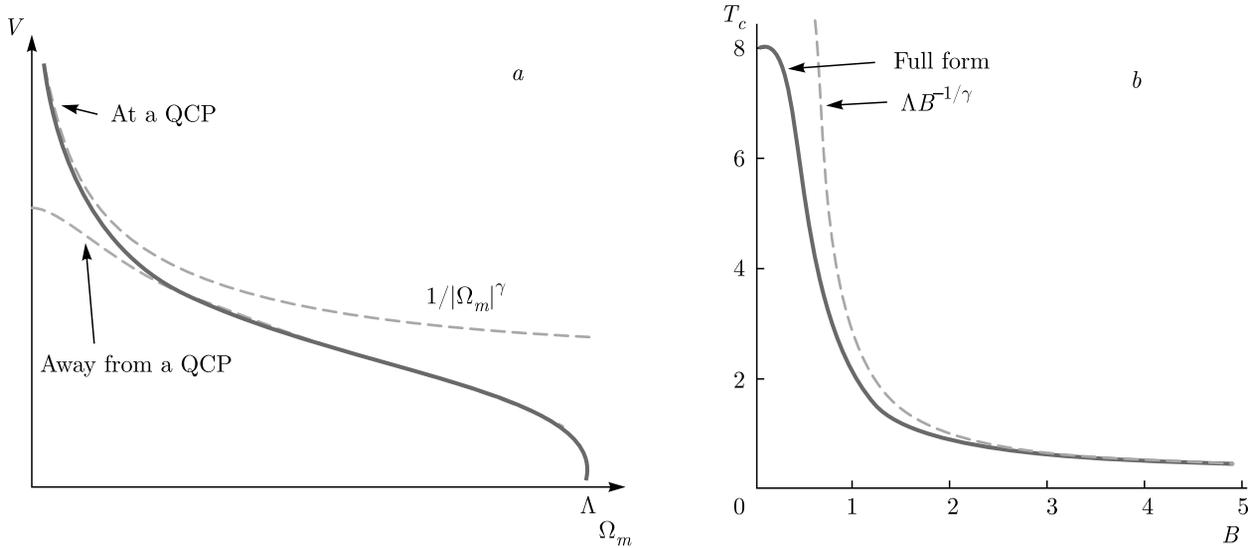
From theory perspective, pairing near a QCP is a fundamentally novel phenomenon, because an effective dynamic electron-electron interaction, $V(q, \Omega)$, mediated by a critical collective boson, which condenses at a QCP, provides a strong attraction in one or more pairing channels and, at the same time, gives rise to a non-Fermi liquid (NFL) behavior in the normal state. The two tendencies compete with each other: fermionic incoherence, associated with the NFL behavior, de-

stroys the Cooper logarithm and by this reduces the tendency to pairing, while an opening of a SC gap eliminates the scattering at low energies and reduces the tendency to a NFL. To find the winner of this competition (SC or NFL), one needs to analyze the set of integral equations for the fermionic self-energy, $\bar{\Sigma}(\mathbf{k}, \omega)$, and the gap function, $\Delta(\mathbf{k}, \omega)$, for fermions with momentum/frequency (\mathbf{k}, ω) and $(-\mathbf{k}, -\omega)$.

We consider the subset of models, in which collective bosons are slow modes compared to dressed fermions, for one reason or the other. In this situation, which bears parallels with Eliashberg theory for electron-phonon interaction [15], the self-energy and the pairing vertex can be approximated by their values on the Fermi surface (FS) and computed within the one-loop approximation. The self-energy on the FS, $\bar{\Sigma}(\mathbf{k}, \omega)$, is invariant under rotations from the point group of the underlying lattice. The rotational symmetry of the gap function $\Delta(\mathbf{k}_F, \omega)$ and the relation between the phases of $\Delta(\mathbf{k}_F, \omega)$ on different FS's in multi-band systems are model specific. E.g., near an antiferromagnetic QCP in a system with a single FS, the strongest attraction is in the d -wave channel. In each particular case, one has to project the pairing interaction into the irreducible channels $V(q, \Omega) \rightarrow V(\Omega)$, find the strongest one, and solve for the pairing vertex for a given pairing symmetry.

Away from a QCP, the effective $V(\Omega)$ tends to a finite value at $\Omega = 0$. In this situation, the fermionic self-energy has a FL form at the smallest frequencies, and the equation for $\Delta(\omega)$ is similar to that in a conventional Eliashberg theory for phonon-mediated superconductivity. At a QCP, the situation is qualitatively

* E-mail: achubuko@umn.edu



a) The frequency dependence of the effective interaction $V(\Omega_m)$, mediated by a soft boson, at $T = 0$. Away from a QCP, $V(\Omega_m)$ tends to a finite value at $\Omega_m = 0$. Right at a QCP, the boson becomes massless, and at frequencies below the upper cutoff Λ , the dimensionless $V(\Omega_m)$ behaves as $\log \Lambda/|\Omega_m|$ at $\gamma = 0+$ and as $(\tilde{g}/|\Omega_m|)^\gamma$ at a finite γ . b) T_c as a function of the parameter $B = \gamma(\Lambda/\tilde{g})^\gamma$, which determines the crossover between the behavior at a finite γ (the limit of large B) and at $\gamma = 0+$ (the limit of small B)

different, because the effective interaction $V(\Omega)$, mediated by a critical massless boson, is a singular function of frequency. Quite generally, the dimensionless interaction behaves at the smallest Ω_m on the Matsubara axis as $V(\Omega_m) = (\tilde{g}/|\Omega_m|)^\gamma$, where $\gamma > 0$ is some exponent (Figure a). This holds at frequencies below some upper cutoff Λ . At larger $\Omega_m > \Lambda$, the interaction drops even further, and can be safely neglected.

In this communication, we consider the pairing at small γ . This limit attracted a lot of attention in the last few years from various sub-communities of physicists [16–31]. We consider this limit analytically for $V(\Omega)$, which crosses over from $(\tilde{g}/|\Omega_m|)^\gamma$ behavior at a finite γ to the logarithmic behavior at $\gamma = 0+$ (the dimensionless $V(\Omega) = \lambda \log \Lambda/|\Omega_m|$). In the latter case, $T_c \sim \Lambda \exp(-\pi/(2\sqrt{\lambda}))$. This expression is similar to the one in the BCS case, but with $\sqrt{\lambda}$ instead of λ in the exponent, because the “Cooper” logarithm appears from the combination of the logarithms in fermion and boson propagators. At a finite γ , the transition temperature remains finite even if $\Lambda \rightarrow \infty$ and its dependence on γ is $T_c \sim \tilde{g}(1/\gamma)^{1/\gamma}$. This T_c rapidly increases as γ decreases.

When both Λ and γ are finite, one expects the crossover between the expressions for T_c at finite γ and $\Lambda \rightarrow \infty$ and at $\gamma = 0+$ and a finite Λ . This crossover is the main theme of our paper. We find the full crossover function for T_c and show that the two limiting cases

correspond to small and large values of the single parameter $B = \gamma(\Lambda/\tilde{g})^\gamma$.

The structure of the paper is the following. Section 1 is a preface for the paper. Section 2 is the detailed Introduction. In Sec. 3 we present the set of coupled Eliashberg equations for the pairing vertex $\Phi(\omega_m)$ and the fermionic self-energy $\bar{\Sigma}(\omega_m)$ and combine them into the equation for the gap function $\Delta(\omega_m)$. In Sec. 4 we analyze the structure of the logarithmic perturbation theory for $\gamma = 0+$ and $\gamma > 0$, keeping a finite high frequency cutoff Λ . We show that for $\gamma = 0+$, the summation of the leading logarithms capture $T_c \sim \Lambda \exp(-\pi/(2\sqrt{\lambda}))$, although logarithmic series are not geometric, in distinction from the BCS theory. However, for a finite γ , summation of the logarithms does not give rise to a pairing instability — the pairing susceptibility does not diverge. In Sec. 5 we go beyond perturbation theory. We re-express the integral Eliashberg equation as an approximate differential equation for the pairing vertex and solve it. We show that for $\gamma = 0+$, the solution coincides with the result of summation of the logarithmic series. For $\gamma > 0$, we show that the absence of an instability within the logarithmic approximation implies that there is a threshold on the strength of the pairing interaction. We find the threshold and show explicitly that, once the interaction exceeds the threshold, the normal state becomes unstable against pairing at some finite T_c . We show

that for a finite γ , the calculation of the pairing instability is ultra-violet convergent, hence T_c remains finite even when the cutoff Λ is set to infinity. We analyze the crossover between the forms of T_c at a finite γ and at $\gamma = 0+$ and show that the crossover is governed by the single parameter $B = \gamma(\Lambda/\tilde{g})^\gamma$.

In Sec. 6 we analyze the pairing at small γ from the renormalization group (RG) perspective — as the flow of the 4-fermion pairing vertex at a finite γ . We show that the solution of the RG equations describes the same crossover between T_c at a finite γ and at $\gamma = 0+$. We present our conclusions in Sec. 7.

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

REFERENCES

1. P. Monthoux, D. Pines, and G. G. Lonzarich, *Nature* **450**, 1177 (2007).
2. D. J. Scalapino, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1383 (2012). NoStop
3. M. R. Norman, *Novel Superfluids*, Oxford Univ. Press, Oxford (2014), Ch. Unconventional Superconductivity.
4. S. Maiti and A. V. Chubukov, *Novel Superfluids*, Oxford Univ. Press, Oxford (2014), Ch. Superconductivity from Repulsive Interaction.
5. B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida, and J. Zaanen, *Nature* **518**, 179 (2015).
6. T. Shibauchi, A. Carrington, and Y. Matsuda, *Ann. Rev. Condens. Matter Phys.* **5**, 113 (2014).
7. R. M. Fernandes and A. V. Chubukov, *Rep. Progr. Phys.* **80**, 014503 (2016).
8. E. Fradkin, S. A. Kivelson, M. J. Lawler, J. P. Eisenstein, and A. P. Mackenzie, *Ann. Rev. Condens. Matter Phys.* **1**, 153 (2010).
9. K.-Y. Yang, T. M. Rice, and F.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **73**, 174501 (2006).
10. L. Fratino, P. Sémon, G. Sordi, and A.-M. S. Tremblay, *Sci. Rep.* **6**, 22715 (2016).
11. S. Sachdev, *Rep. Progr. Phys.* **82**, 014001 (2018).
12. P. Coleman, *Introduction to Many-Body Physics*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2015).
13. Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, *Nature* **556**, 43 (2018).
14. A. Abanov and A. V. Chubukov, *Phys. Rev. B* **102**, 024524 (2020).
15. G. M. Eliashberg, *JETP* **11**, 696 (1960) [*ZhETF* **38**, 966 (1960)].
16. D. F. Mross, J. McGreevy, H. Liu, and T. Senthil, *Phys. Rev. B* **82**, 045121 (2010).
17. M. A. Metlitski, D. F. Mross, S. Sachdev, and T. Senthil, *Phys. Rev. B* **91**, 115111 (2015).
18. S. Raghu, G. Torroba, and H. Wang, *Phys. Rev. B* **92**, 205104 (2015).
19. R. Mahajan, D. M. Ramirez, S. Kachru, and S. Raghu, *Phys. Rev. B* **88**, 115116 (2013); A. L. Fitzpatrick, S. Kachru, J. Kaplan, and S. Raghu, *Phys. Rev. B* **88**, 125116 (2014); A. L. Fitzpatrick, S. Kachru, J. Kaplan, and S. Raghu, *Phys. Rev. B* **89**, 165114 (2014); G. Torroba and H. Wang, *Phys. Rev. B* **90**, 165144 (2014); A. L. Fitzpatrick, G. Torroba, and H. Wang, *Phys. Rev. B* **91**, 195135 (2015), and references therein.
20. H. Wang, S. Raghu, and G. Torroba, *Phys. Rev. B* **95**, 165137 (2017).
21. H. Wang, Y. Wang, and G. Torroba, *Phys. Rev. B* **97**, 054502 (2018).
22. A. L. Fitzpatrick, S. Kachru, J. Kaplan, S. Raghu, G. Torroba, and H. Wang, *Phys. Rev. B* **92**, 045118 (2015).
23. Y.-M. Wu, A. Abanov, and A. V. Chubukov, *Phys. Rev. B* **99**, 014502 (2019).
24. D. T. Son, *Phys. Rev. D* **59**, 094019 (1999).
25. A. V. Chubukov and J. Schmalian, *Phys. Rev. B* **72**, 174520 (2005).
26. T. Schäfer and F. Wilczek, *Phys. Rev. D* **60**, 114033 (1999).
27. R. D. Pisarski and D. H. Rischke, *Phys. Rev. D* **61**, 051501 (2000).
28. Q. Wang and D. H. Rischke, *Phys. Rev. D* **65**, 054005 (2002).
29. J. A. Damia, M. Solís, and G. Torroba, *Phys. Rev. B* **102**, 045147 (2020).
30. D. V. Khveshchenko, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 075303 (2009).
31. C. M. Varma, P. B. Littlewood, S. Schmitt-Rink, E. Abrahams, and A. E. Ruckenstein, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1996 (1989); C. M. Varma, *Rev. Mod. Phys.* **92**, 031001 (2020).

NICKELATE SUPERCONDUCTORS: AN ONGOING DIALOG BETWEEN THEORY AND EXPERIMENTS

A. S. Botana^a, *F. Bernardini*^b, *A. Cano*^{c*}

^a *Department of Physics, Arizona State University
Tempe, AZ 85287, USA*

^b *Dipartimento di Fisica, Università di Cagliari
IT-09042, Monserrato, Italy*

^c *Université Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, Institut Néel
38042, Grenoble, France*

Received December 4, 2020,
revised version December 4, 2020
Accepted for publication December 5, 2020

Contribution for the JETP special issue in honor of I. E. Dzyaloshinskii's 90th birthday

DOI: 10.31857/S0044451021040131

Unconventional superconductivity, understood as superconductivity beyond the electron-phonon paradigm, remains a defining problem in condensed matter [1]. The challenge is exemplified by the high- T_c cuprates, and nickelates joined the club last year after Hwang and collaborators reported superconductivity in Sr-doped NdNiO₂ thin films [2]. Here, we provide an overview on nickelate superconductors.

Experimental facts. Rare-earth infinite-layer nickelates $R\text{NiO}_2$ have been known for decades [3–6]. This special type of nickelates can be seen as the $n = \infty$ members of the series $R_{n+1}\text{Ni}_n\text{O}_{2n+2}$, with each member containing n -NiO₂ planes (see Fig. 1, R — rare-earth). The synthesis of these materials is typically achieved by first growing the nickelate in its $R\text{NiO}_3$ perovskite version, and then removing the apical oxygens from the NiO₆ octahedra with reducing agents such as hydrogen [7]. This is the so-called topotactic reduction which, in practice, may have unwanted consequences such as hydrogen intercalation into the sample [8]. Superconductivity in $R\text{NiO}_2$ ($R = \text{Pr}, \text{Nd}$) emerges via charge carrier doping as in the cuprates. This has only been achieved by means of thin-film growth techniques [9], while superconductivity in doped bulk samples is yet to be reported [10–12].

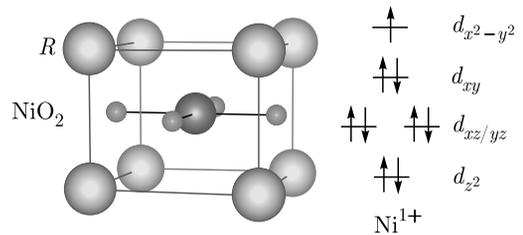


Fig. 1. Ball-and-stick model of the unit cell of the infinite-layer nickelates $R\text{NiO}_2$ and sketch of the formal $3d^9$ electronic configuration of a Ni^{1+} atom in square-planar coordination. The set of d orbitals is frequently divided into the subsets e_g -like = $\{d_{x^2-y^2}, d_{z^2}\}$ and t_{2g} -like = $\{d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}\}$ as in octahedral coordination

Figure 2 shows the temperature-composition phase diagram of Sr-doped NdNiO₂ and PrNiO₂ [13, 14]. The measured resistivity as a function of temperature shows metallic behavior, with a low-temperature upturn systematically observed (Fig. 2). This upturn can be attributed to weak localization, or it could be reminiscent of Kondo physics [15]. These systems can be seen as weak insulators or bad metals all along the phase diagram, in marked contrast to cuprates. Besides, no signature of long-range magnetic order has been reported so far for the parent infinite-layer nickelates [4, 5, 16]. However, a recent NMR study has pointed out the presence of antiferromagnetic fluctuations and quasi-static antiferromagnetic order below 40 K in Nd_{0.85}Sr_{0.15}NiO₂ [17].

* E-mail: andres.cano@neel.cnrs.fr

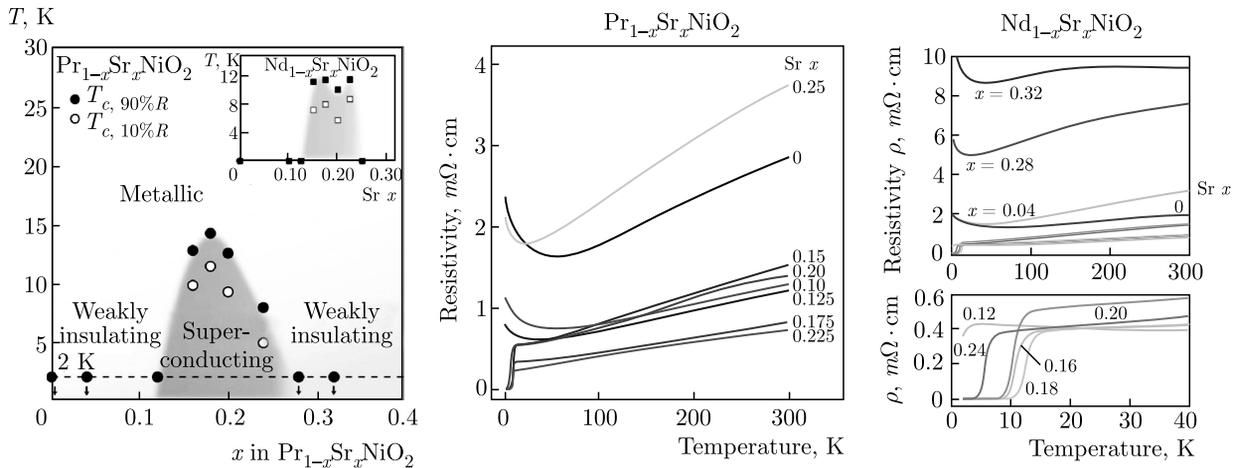


Fig. 2. Temperature vs composition phase diagram of the superconducting infinite-layer nickelates reported so far — i. e. Sr-doped NdNiO_2 and PrNiO_2 thin films on SrTiO_3 substrates — and corresponding resistivity data (from [13] and [14]). Sr-doping is equivalent to hole doping in these systems. The superconducting T_c reaches 15 K in the best superconducting samples. The resistivity in the normal state shows metallic behavior as a function of temperature, with a Kondo-like upturn systematically observed for both underdoped and overdoped samples. The metallicity is however rather poor, and hence these systems can be seen as bad metals with weakly insulating features. At the same time, enhanced metallicity has been repeatedly reported in superconducting samples when compared to the non-superconducting ones

The transport data reported so far is still sample dependent, with nominally equivalent samples displaying finite resistivity or a complete drop [13, 18, 19]. Also, whether the original LaNiO_2 reference compound hosts superconductivity or not remains an important open question. This difference may be “simply” due to sample quality and/or the presence of topotactic hydrogen in LaNiO_2 — i. e. the formation of LaNiO_2H instead of LaNiO_2 [8]. Otherwise, it may be more intrinsically related to the rare-earth elements themselves — i. e. closed vs open $4f$ shells and the corresponding magnetic moments.

Figure 3 illustrates the measured Hall coefficient for $R\text{NiO}_2$ that has been observed to change sign both as a function of temperature and as a function of doping. This evidences an underlying multiband character in infinite-layer nickelates, which is another important fundamental difference when compared to cuprates. Such a multiband picture has been confirmed by X-ray spectroscopic techniques [20–22]. However, in contrast to the Hall data, the changes in the X-ray spectra observed as a function of Sr-doping have been interpreted in terms of doped holes residing in the $\text{Ni-}3d_{x^2-y^2}$ orbitals without necessarily invoking multiband effects [21].

The single particle tunneling spectrum has been measured on $(\text{Nd,Sr})\text{NiO}_2$ [23]. The spectrum was

found to be inhomogeneous, with different features at different locations of the sample. One of the predominant features correspond to a V-shape spectrum. However, features corresponding to a full s -wave gap are equally observed and, in some cases, even a mixture of the two.

Theoretical considerations.

Single-particle picture. At the single-particle DFT level, the calculations support the multiband picture of the infinite-layer nickelates in agreement with experimental data [20, 24–34]. These calculations reveal a large Fermi-surface sheet due to $\text{Ni-}3d_{x^2-y^2}$ holes akin to that in cuprates (see Fig. 4). However, the Fermi surface displays additional electron pockets due to $5d$ states associated to the rare-earth $5d$ states ($5d_{z^2}$ at Γ and $5d_{xy}$ at A). This can be seen as a self-doping effect promoted by the hybridization of these formally empty states with the $\text{Ni-}3d$ bands. This effect is totally absent in the cuprates. Moreover, the $\text{Ni-}3d_{z^2}$ states turn out to be partially occupied and additionally hybridized with the R - $5d$ ones. Thus, the full e_g -like = $\{d_{x^2-y^2}, d_{z^2}\}$ sector of the $\text{Ni-}3d$ states becomes “active” in infinite-layer nickelates. In part, this results from the comparatively large difference in on-site energies promoting charge from $\text{O-}2p$ to $\text{Ni-}3d$ orbitals, i. e. the so-called charge-transfer energy ~ 4 eV.

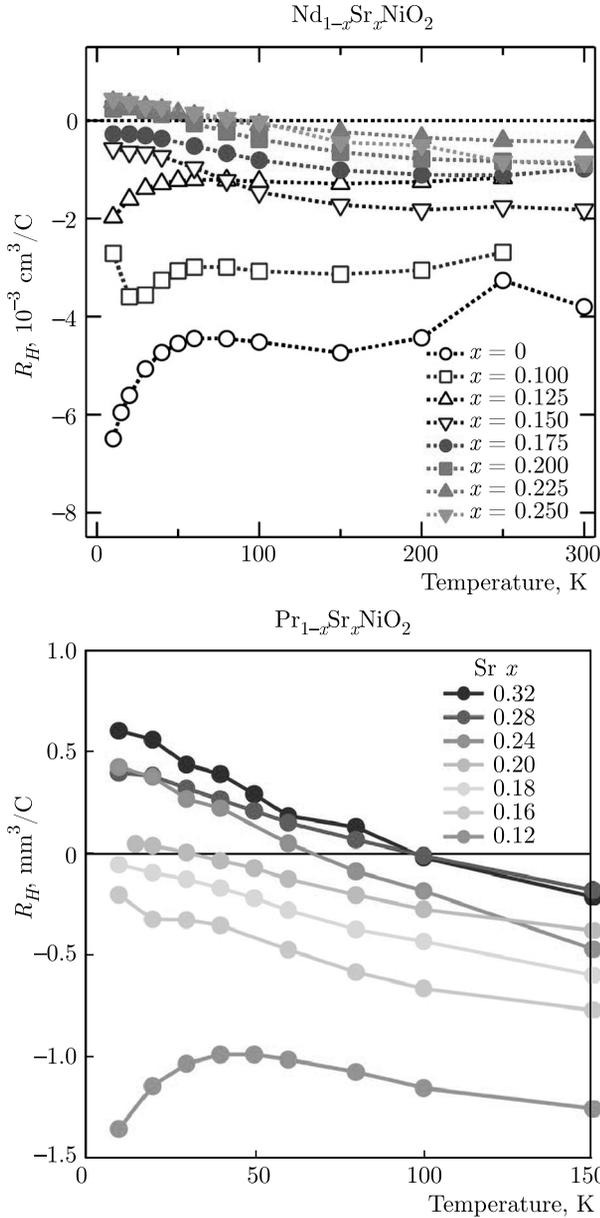


Fig. 3. Hall coefficient R_H measured in NdNiO_2 and PrNiO_2 as a function of temperature and Sr doping [13, 14]. In both cases, the Hall coefficient below 100 K changes sign as a function of Sr content (x in $\text{R}_{1-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_2$). The main charge carriers have electron character in the parent compounds ($x = 0$), which eventually changes to holes upon increasing doping. This was the first experimental hint of an underlying multi-band picture

Many-body correlation effects: Cooper pairing. The standard electron-phonon mechanism has been ruled out as the main reason for superconductivity in infinite-layer nickelates [28]. Instead, repulsive interactions mediated by spin-fluctuations were right away

argued to drive the Cooper pairing in these systems [26, 27, 36, 37]. Specifically, d -wave superconductivity was concluded from complementary random phase approximation (RPA) and fluctuation exchange (FLEX) calculations for many-body multi-orbital Hamiltonians in which the non-interacting part maps the relevant DFT bands. More recently, these results have been confirmed using advanced techniques in which the starting vertex is non-perturbative so that the local correlations are fully included [38].

The same conclusion about the d -wave symmetry of the superconducting gap was reached in [27] from a standard t - J model constructed in a similar way for the $\text{Ni-}3d_{x^2-y^2}$ states. Further, the specific self-doping features of the nickelates have inspired an extended t - J model that generically addresses the strong-coupling limit of similar multiband systems [39]. Alternatively, if the Hund's coupling J between $d_{x^2-y^2}$ and d_{z^2} Ni orbitals plays a dominant role, it has been pointed out that the Cooper pairing can be interpreted within a spin-freezing scenario as due to local-moment fluctuations, rather than to pure antiferromagnetic fluctuations [40].

Many-body correlation effects: Electronic structure. The DFT picture has been revised using many-body perturbation theory at the GW level, thus treating correlations *ab initio* [41, 42]. The low-energy physics remains essentially unaffected, with only small changes obtained in the interacting Fermi surface and in the quasiparticle spectral weights near the Fermi level. The $\text{Ni-}3d_{x^2-y^2}$ bandwidth reduces slightly while the $\text{Ni-}3d_{z^2}$ one increases as the O-2 p states are further shifted to lower energies (1.5 eV further down from the Fermi level) [41]. The latter, however, represents a rather substantial change, and hence suggests that the canonical charge-transfer-insulator picture is even more unlikely for the infinite-layer nickelates in the GW framework. These changes are also tied to an important shift of the empty 4 f states [41], which should be taken as a warning regarding their role in the overall physics of these materials.

DFT+DMFT (dynamical mean-field theory) calculations according to Hubbard-Hund interaction Hamiltonians have been performed to further scrutinize the correlated nature of the different orbitals and clarify the multiband nature in RNiO_2 [15, 35, 38, 40, 43–51]. In addition, DMFT has also been applied in combination with the quasiparticle self-consistent GW approximation in a parameter-free fashion [42, 52]. The overall multiband picture remains robust and the re-

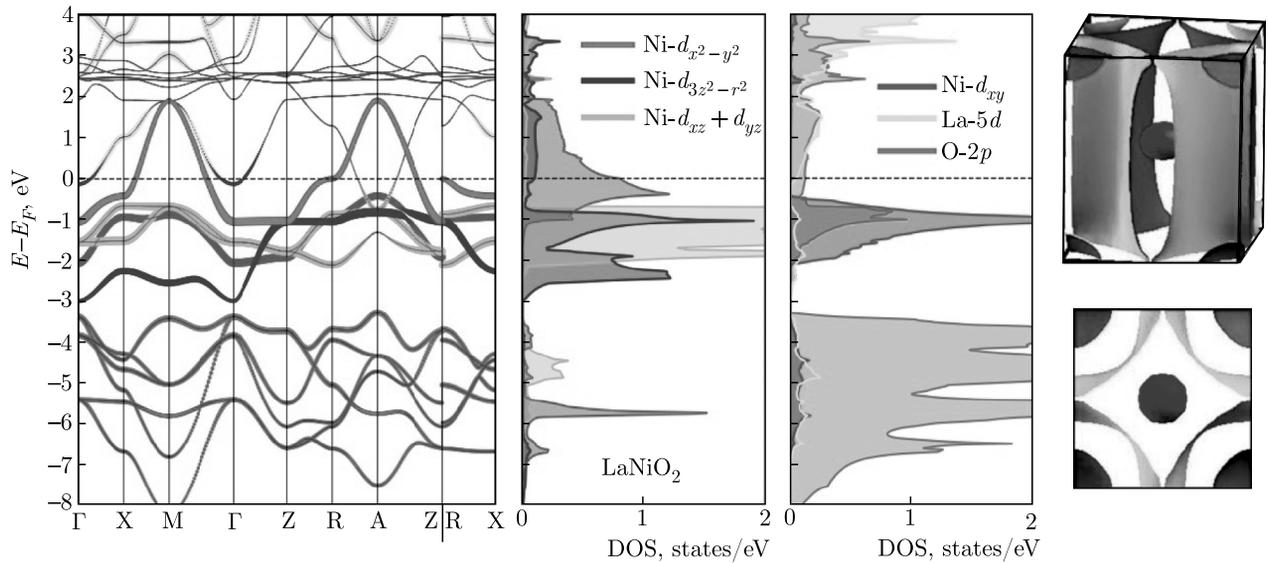


Fig. 4. Electronic structure of the reference material LaNiO_2 obtained at the DFT level (fat-band plot, density of states (DOS) and Fermi surface from [25] and [35]). In addition to the main $\text{Ni-}3d_{x^2-y^2}$ cuprate-like band crossing the Fermi level, the $\text{Ni-}3d_{z^2}$ states are not completely occupied in these systems. Further, the system has a multiband character due to $\text{La-}5d$ states that give rise to additional electron pockets and “self-dope” the $\text{Ni-}3d_{x^2-y^2}$ hole-like Fermi surface. The $\text{O-}2p$ states, in turn, are comparatively far below the Fermi level

sults confirm the above trends. However, the effective mass renormalization or inverse quasiparticle weight $m^*/m = 1/Z$ undergoes substantial orbital-selective changes [35, 44, 46]. The $\text{Ni-}d_{x^2-y^2}$ band is found to have a tendency towards localization such that a Mott gap can eventually open if the Hubbard interaction is large enough [44, 45]. The $\text{R-}5d$ self-doping bands, in contrast, remain much more weakly correlated [44, 45]. Beyond that, the DMFT results define an apparent Hubbard vs Hund dichotomy in which the multiband aspects of infinite-layer nickelates are emphasized differently [53].

Magnetism. A magnetic ground state is consistently obtained in theoretical studies [20, 24, 25, 48, 49, 53–57]. In DFT+DMFT a near degeneracy of spin orders is obtained that implies magnetic frustration especially upon doping [48, 49]. This frustration arises due to the involvement of both $3d_{x^2-y^2}$ and $3d_{z^2}$ Ni orbitals and may be responsible for the experimental suppression of long-range magnetic order. A complementary point of view is obtained via DFT calculations, as the antiferromagnetic ground state portrays a one-dimensional-like van Hove singularity of d_{z^2} character pinned at the Fermi level [58]. This singularity makes the antiferromagnetic phase eventually unsta-

ble to spin-density disproportionation, breathing and half-breathing lattice distortions, and charge-density disproportionation. A different point of view suggests that $5d$ conduction electrons could screen the Ni spins, suppressing magnetism and giving rise to a Kondo effect like that seen in heavy fermion materials [15]. Beyond that, an intrinsic difference that could be behind the differing properties across the RNiO_2 series, notably the emergence of superconductivity itself, is the presence/absence of magnetic rare-earth elements [33, 59].

Interfacial and surface effects. The local electronic properties of the infinite-layer nickelate thin films were first addressed in [60] and shortly after in [61]. The epitaxial growth of the $\text{RNiO}_2/\text{SrTiO}_3$ heterostructures can in principle yield different atomic boundaries between the sample and the substrate [60]. The most obvious configuration corresponds to a fully reduced nickelate having its ($\text{RO} \rightarrow$) R layer directly on top of the TiO_2 -terminated substrate. This configuration, however, was found to be energetically unstable, which is a local-scale manifestation of the thermodynamic fragility of these phases. Thus, the infinite-layer nickelate prefers to face a RO layer to the substrate, and the same conclusion holds even for a direct-growth

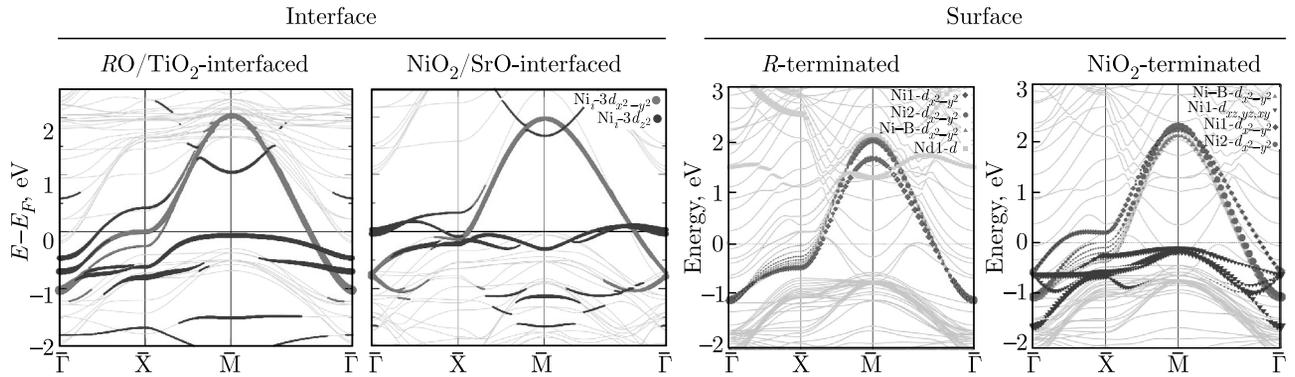


Fig. 5. Electronic band structure of the infinite-layer nickelates at the $R\text{NiO}_2/\text{SrTiO}_3$ interface (left) and at the surface (right) for different atomic configurations (the colors highlight the main contributions of the interfacial/surface Ni-3d states near the Fermi level; adapted from [60] and [62]). In both cases the nature of the self-doping effect — obtained from the R -5d states in the bulk — changes or even disappears depending on the local atomic configuration. At the same time, other Ni-3d states are pushed closer to the Fermi level and locally supplement the system with flat band features

process. This “chemical” reconstruction was further shown to produce drastic changes in the electronic structure at the interface [60]. The interfacial chemical reconstruction according to the $R \rightarrow \text{Sr} \rightarrow \text{RO} \rightarrow \text{SrO}$ sequence is to some extent equivalent to localized hole doping. This local doping was found to deplete the self-doping R -5d states at the interface. Specifically, the R -5d states are first replaced by Ti-3d ones, which are then pushed above the Fermi level for the SrO configuration (see Fig. 5). At the same time, the interfacial Ni-3d_{z²} states are driven closer to the Fermi energy so that they manifestly participate in the low-energy physics. Thus, the Kondo-lattice features are expected to be fundamentally different at the interfaces where, in addition, the Ni- e_g sector will likely be fully active. Besides, this sector is supplemented by a markedly flat band character of the interfacial Ni-3d_{z²} states, so that interface-specific correlation effects may be promoted [60].

This picture was subsequently confirmed for thin films with asymmetric boundaries [61, 63, 64]. In that case, the different polar discontinuities yield an effective built-in electric field across the film and polar layers can be formed at the surface and at the interface [63]. These layers show antiparallel NiO₂ displacements, but otherwise are decoupled. At the interface with the substrate, a two-dimensional electron gas extending over several layers together with the aforementioned depletion of the self-doping R -5d states is obtained [61, 63]. In addition, the combined effect of magnetism (G -AFM order) and correlations has been

considered at the DFT+ U level [63]. This enhances the itineracy of the Ni-3d_{z²} orbitals at the interface with the substrate, while the magnetism is essentially suppressed at the surface to vacuum. Further, the effect of the nickelate termination anticipated in [60] is specifically considered in relation to superconductivity in [62]. Thus, it is argued that the d -wave superconducting gap expected for the bulk may transform into a s_{\pm} -wave one at the NiO₂-terminated surface, and it is also suggested that a surface $s + id$ -wave state may be realized under the appropriate conditions.

Conclusions and perspectives. The recent discovery of superconductivity in infinite-layer nickelates has created intense excitement. These systems have been rapidly scrutinized from many different angles, using a battery of experimental and theoretical tools. The initial motivation of drawing analogies with the high- T_c cuprates has thus been surpassed. Instead, the accumulated results have now consolidated these systems as a new class of unconventional superconducting materials.

Specifically, the rare-earth infinite-layer nickelates have been confirmed to host a distinct multiband interplay, on top of which electronic correlations build and determine the main properties of these systems. This interplay is present already within the Ni sector itself, as not only the Ni-3d_{x²-y²} states but also the Ni-3d_{z²} ones are found to be active. This further introduces specific correlation effects and the bad metallic, or weakly insulating behavior is now understood as a

direct manifestation of these correlations. However, a Hubbard vs Hund dichotomy has emerged that is yet to be clarified. In addition, the rare-earth states introduce extra specific ingredients such as the self-doping effect and a $4f$ -ness that may qualitatively be even more important. When it comes to the central question, that is, the emergence of superconductivity in these materials, it has been ascribed to spin fluctuations (in a broad sense), and there is now experimental evidence of incipient antiferromagnetic order.

Additional progress to further clarify these aspects, as well as the actual superconducting properties beyond T_c can be naturally expected [65]. In this context, it is fundamental to determine whether the lack of superconductivity in the LaNiO_2 reference material is intrinsic and also why thin films are superconducting while bulk samples are not.

More importantly, a crucial issue to address is: is there a whole new family of nickel-based unconventional superconductors waiting to be discovered? This question currently motivates the experimental and computational search of new alternative materials [66–74]. Other layered nickelates are obtained via oxygen reduction from the corresponding Ruddlesden–Popper phases [75,76]. The $n = 2$ and 3 materials, in particular, have been known for a while and, similarly to the $n = \infty$ ones, have also been discussed as candidate superconductors [66–71,77]. Recently, La-based $n = 4$ –6 parent Ruddlesden–Popper phases have also been synthesized [78]. Reduction of these compounds is particularly promising as they would realize d -electron counts that can be directly mapped into the dome area of filling. In addition, current epitaxial growth techniques can be exploited as an alternative route to engineer Ni-based heterostructures mimicking the $R_{n+1}\text{Ni}_n\text{O}_{2n+2}$ series with the advantage of better sample quality and doping control [60]. The infinite-layer case itself has proven to be a challenging but successful example in this respect.

Shedding light on these issues will not only help understanding superconductivity in these specific low-valence layered nickelates but will also provide new perspectives about the nature of unconventional superconductivity in general.

Acknowledgments. We dedicate this review on this 1-year-old topic to I. E. Dzyaloshinskii in celebration of his 90th birthday. We thank M. R. Norman and X. Blase for useful comments.

Funding. A. B. acknowledges the support from NSF DMR 2045826.

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

REFERENCES

1. M. R. Norman, *Science* **332**, 196 (2011).
2. D. Li, K. Lee, B. Y. Wang, M. Osada, S. Crossley, H. R. Lee, Y. Cui, Y. Hikita, and H. Y. Hwang, *Nature (London)* **572**, 624 (2019).
3. M. Crespin, P. Levitz, and L. Gataineau, *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* **79**, 1181 (1983).
4. M. Hayward, M. Green, M. Rosseinsky, and J. Sloan, *J. Amer. Chem. Soc.* **121**, 8843 (1999).
5. M. Hayward and M. Rosseinsky, *Sol. St. Sci.* **5**, 839 (2003).
6. M. Crespin, O. Isnard, F. Dubois, J. Choisnet, and P. Odier, *J. Sol. St. Chem. France* **178**, 1326 (2005).
7. A. Ikeda, T. Manabe, and M. Naito, *Physica C* **506**, 83 (2014).
8. L. Si, W. Xiao, J. Kaufmann, J. M. Tomczak, Y. Lu, Z. Zhong, and K. Held, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 166402 (2020).
9. K. Lee, B. H. Goodge, D. Li, M. Osada, B. Y. Wang, Y. Cui, L. F. Kourkoutis, and H. Y. Hwang, *APL Mater.* **8**, 041107 (2020).
10. Q. Li, C. He, J. Si, X. Zhu, Y. Zhang, and H.-H. Wen, *Commun. Mater.* **1**, 16 (2020).
11. B.-X. Wang, H. Zheng, E. Kriviyakina, O. Chmaissem, P. P. Lopes, J. W. Lynn, L. C. Gallington, Y. Ren, S. Rosenkranz, J. F. Mitchell, and D. Phelan, *Phys. Rev. Mater.* **4**, 084409 (2020).
12. C. He, X. Ming, Q. Li, X. Zhu, J. Si, and H.-H. Wen, *arXiv:2010.11777*.
13. D. Li, B. Y. Wang, K. Lee, S. P. Harvey, M. Osada, B. H. Goodge, L. F. Kourkoutis, and H. Y. Hwang, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 027001 (2020).
14. M. Osada, B. Y. Wang, K. Lee, D. Li, and H. Y. Hwang, *arXiv:2010.16101*.
15. G.-M. Zhang, Y.-F. Yang, and F.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **101**, 020501 (2020).
16. A. Ikeda, Y. Krockenberger, H. Irie, M. Naito, and H. Yamamoto, *Appl. Phys. Express* **9**, 061101 (2016).

17. Y. Cui, C. Li, Q. Li, X. Zhu, Z. Hu, Y.-F. Yang, J. S. Zhang, R. Yu, H.-H. Wen, and W. Yu, arXiv:2011.09610.
18. S. Zeng, C. S. Tang, X. Yin, C. Li, M. Li, Z. Huang, J. Hu, W. Liu, G. J. Omar, H. Jani, Z. S. Lim, K. Han, D. Wan, P. Yang, S. J. Pennycook, A. T. S. Wee, and A. Ariando, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 147003 (2020).
19. M. Osada, B. Y. Wang, B. H. Goodge, K. Lee, H. Yoon, K. Sakuma, D. Li, M. Miura, L. F. Kourkoutis, and H. Y. Hwang, *Nano Lett.* **20**, 5735 (2020).
20. M. Hepting, D. Li, C. J. Jia, H. Lu, E. Paris, Y. Tseng, X. Feng, M. Osada, E. Been, Y. Hikita, Y. D. Chuang, Z. Hussain, K. J. Zhou, A. Nag, M. Garcia-Fernandez, M. Rossi, H. Y. Huang, D. J. Huang, Z. X. Shen, T. Schmitt, H. Y. Hwang, B. Moritz, J. Zaanen, T. P. Devereaux, and W. S. Lee, *Nature Mater.* **19**, 381 (2020).
21. M. Rossi, H. Lu, A. Nag, D. Li, M. Osada, K. Lee, B. Y. Wang, S. Agrestini, M. Garcia-Fernandez, Y. D. Chuang, Z. X. Shen, H. Y. Hwang, B. Moritz, K.-J. Zhou, T. P. Devereaux, and W. S. Lee, arXiv:2011.00595.
22. B. H. Goodge, D. Li, M. Osada, B. Y. Wang, K. Lee, G. A. Sawatzky, H. Y. Hwang, and L. F. Kourkoutis, arXiv:2005.02847.
23. Q. Gu, Y. Li, S. Wan, H. Li, W. Guo, H. Yang, Q. Li, X. Zhu, X. Pan, Y. Nie, and H.-H. Wen, arXiv:2006.13123.
24. K.-W. Lee and W. E. Pickett, *Phys. Rev. B* **70**, 165109 (2004).
25. A. S. Botana and M. R. Norman, *Phys. Rev. X* **10**, 011024 (2020).
26. H. Sakakibara, H. Usui, K. Suzuki, T. Kotani, H. Aoki, and K. Kuroki, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 077003 (2020).
27. X. Wu, D. Di Sante, T. Schwemmer, W. Hanke, H. Y. Hwang, S. Raghu, and R. Thomale, *Phys. Rev. B* **101**, 060504 (2020).
28. Y. Nomura, M. Hirayama, T. Tadano, Y. Yoshimoto, K. Nakamura, and R. Arita, *Phys. Rev. B* **100**, 205138 (2019).
29. J. Gao, S. Peng, Z. Wang, C. Fang, and H. Weng, *Nat. Sci. Rev.* (2020), <https://doi.org/10.1093/nsr/nwaa218>, nwaa218.
30. P. Jiang, L. Si, Z. Liao, and Z. Zhong, *Phys. Rev. B* **100**, 201106 (2019).
31. E. Been, W.-S. Lee, H. Y. Hwang, Y. Cui, J. Zaanen, T. Devereaux, B. Moritz, and C. Jia, arXiv:2002.12300.
32. F. Bernardini, V. Olevano, and A. Cano, *Phys. Rev. Res.* **2**, 013219 (2020).
33. J. Kapeghian and A. S. Botana, *Phys. Rev. B* **102**, 205130 (2020).
34. J. Krishna, H. LaBollita, A. O. Fumega, V. Pardo, and A. S. Botana, *Phys. Rev. B* **102**, 224506 (2020).
35. Y. Wang, C.-J. Kang, H. Miao, and G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **102**, 161118 (2020).
36. T. Zhou, Y. Gao, and Z. Wang, *Sci. China Phys. Mech. Astron.* **63**, 287412 (2020).
37. P. Adhikary, S. Bandyopadhyay, T. Das, I. Dasgupta, and T. Saha-Dasgupta, *Phys. Rev. B* **102**, 100501 (2020).
38. M. Kitatani, L. Si, O. Janson, R. Arita, Z. Zhong, and K. Held, *npj Quant. Mater.* **5**, 59 (2020).
39. Y.-H. Zhang and A. Vishwanath, *Phys. Rev. Res.* **2**, 023112 (2020).
40. P. Werner and S. Hoshino, *Phys. Rev. B* **101**, 041104 (2020).
41. V. Olevano, F. Bernardini, X. Blase, and A. Cano, *Phys. Rev. B* **101**, 161102 (2020).
42. F. Petocchi, V. Christiansson, F. Nilsson, F. Aryasetiawan, and P. Werner, arXiv:2006.00394.
43. S. Ryee, H. Yoon, T. J. Kim, M. Y. Jeong, and M. J. Han, *Phys. Rev. B* **101**, 064513 (2020).
44. F. Lechermann, *Phys. Rev. B* **101**, 081110 (2020).
45. J. Karp, A. S. Botana, M. R. Norman, H. Park, M. Zingl, and A. Millis, *Phys. Rev. X* **10**, 021061 (2020).
46. I. Leonov, S. L. Skornyakov, and S. Y. Savrasov, *Phys. Rev. B* **101**, 241108 (2020).
47. F. Lechermann, *Phys. Rev. X* **10**, 041002 (2020).
48. I. Leonov and S. Y. Savrasov, arXiv:2006.05295.
49. X. Wan, V. Ivanov, G. Resta, I. Leonov, and S. Y. Savrasov, arXiv:2008.07465.
50. C.-J. Kang and G. Kotliar, arXiv:2007.15383.
51. Z.-J. Lang, R. Jiang, and W. Ku, arXiv:2005.00022.
52. B. Kang, C. Melnick, P. Semon, G. Kotliar, and S. Choi, arXiv:2007.14610.

53. F. Lechermann, arXiv:2012.09796.
54. H. Zhang, L. Jin, S. Wang, B. Xi, X. Shi, F. Ye, and J.-W. Mei, *Phys. Rev. Res.* **2**, 013214 (2020).
55. Y. Gu, S. Zhu, X. Wang, J. Hu, and H. Chen, *Commun. Phys.* **3**, 84 (2020).
56. Z. Liu, Z. Ren, W. Zhu, Z. Wang, and J. Yang, *npj Quant. Mater.* **5**, 31 (2020).
57. A. S. Botana and V. Pardo, arXiv:2012.02711.
58. M.-Y. Choi, K.-W. Lee, and W. E. Pickett, *Phys. Rev. Res.* **2**, 033445 (2020).
59. M.-Y. Choi, K.-W. Lee, and W. E. Pickett, *Phys. Rev. B* **101**, 020503 (2020).
60. F. Bernardini and A. Cano, *J. Phys. Mater.* **3**, 03LT01 (2020).
61. B. Geisler and R. Pentcheva, *Phys. Rev. B* **102**, 020502 (2020).
62. X. Wu, K. Jiang, D. Di Sante, W. Hanke, A. P. Schnyder, J. Hu, and R. Thomale, arXiv:2008.06009.
63. Y. Zhang, L.-F. Lin, W. Hu, A. Moreo, S. Dong, and E. Dagotto, *Phys. Rev. B* **102**, 195117 (2020).
64. R. He, P. Jiang, Y. Lu, Y. Song, M. Chen, M. Jin, L. Shui, and Z. Zhong, *Phys. Rev. B* **102**, 035118 (2020).
65. B. Y. Wang, D. Li, B. H. Goodge, K. Lee, M. Osada, S. P. Harvey, L. F. Kourkoutis, M. R. Beasley, and H. Y. Hwang, *Nature Phys.* (2021), <https://doi.org/10.1038/s41567-020-01128-5>, arXiv:2012.06560.
66. A. S. Botana, V. Pardo, and M. R. Norman, *Phys. Rev. Mater.* **1**, 021801 (2017).
67. J. Zhang, A. S. Botana, J. W. Freeland, D. Phelan, H. Zheng, V. Pardo, M. R. Norman, and J. F. Mitchell, *Nature Phys.* **13**, 864 (2017).
68. V. V. Poltavets, K. A. Lokshin, M. Croft, T. K. Mandal, T. Egami, and M. Greenblatt, *Inorg. Chem.* **46**, 10887 (2007).
69. V. V. Poltavets, K. A. Lokshin, S. Dikmen, M. Croft, T. Egami, and M. Greenblatt, *J. Amer. Chem. Soc.* **128**, 9050 (2006).
70. V. V. Poltavets, M. Greenblatt, G. H. Fecher, and C. Felser, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 046405 (2009).
71. V. V. Poltavets, K. A. Lokshin, A. H. Nevidomskyy, M. Croft, T. A. Tyson, J. Hadermann, G. Van Tendeloo, T. Egami, G. Kotliar, N. Aprobets-Warren, A. P. Dioguardi, N. J. Curro, and M. Greenblatt, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 206403 (2010).
72. J. Gawraczyński, D. Kurzydłowski, R. A. Ewings, S. Bandaru, W. Gadomski, Z. Mazej, G. Ruani, I. Bergenti, T. Jaroń, A. Ozarowski, S. Hill, P. J. Leszczyński, K. Tokár, M. Derzsi, P. Barone, K. Wohlfeld, J. Lorenzana, and W. Grochala, *Proc. Nat. Acad. Sci.* **116**, 1495 (2019).
73. M. Hirayama, T. Tadano, Y. Nomura, and R. Arita, *Phys. Rev. B* **101**, 075107 (2020).
74. F. Bernardini, V. Olevano, X. Blase, and A. Cano, *J. Phys. Mater.* **3**, 035003 (2020).
75. Z. Z. MG Greenblatt and M. Whangbo, *Synth. Met.* **85**, 1451 (1997).
76. M. Greenblatt, *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* **2**, 174 (1997).
77. J. Karp, A. Hampel, M. Zingl, A. S. Botana, H. Park, M. R. Norman, and A. J. Millis, *Phys. Rev. B* **102**, 245130 (2020).
78. Z. Li, W. Guo, T. T. Zhang, J. H. Song, T. Y. Gao, Z. B. Gu, and Y. F. Nie, *APL Mater.* **8**, 091112 (2020).

АСИМПТОТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ АНИЗОТРОПНОЙ КЛАССИЧЕСКОЙ ДИФФУЗИИ В НЕОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ

П. С. Кондратенко^{*}, А. Л. Матвеев^{**}, Ю. Н. Обухов^{***}

*Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук
115191, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 27 сентября 2020 г.,
после переработки 27 сентября 2020 г.
Принята к публикации 29 сентября 2020 г.

Разработана асимптотическая теория классической анизотропной диффузии в неоднородных средах. При выводе использован формализм дифференциальной геометрии, заимствованный из общей теории относительности. Получена простая аналитическая формула для концентрации, элементами которой являются линейные интегралы вдоль геодезической — траектории концентрационного сигнала. Сама траектория вытекает из вариационного принципа, которому удовлетворяет показатель экспоненты в выражении для концентрации, и определяется из обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка для вектора, касательного к геодезической линии. Теория справедлива на расстояниях от источника примеси, значительно превышающих размер основной области ее локализации.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040143

1. ВВЕДЕНИЕ

Классическая диффузия в неоднородных средах является практически важной задачей. Численные расчеты по решению уравнения диффузии с переменным в пространстве коэффициентом, особенно для концентрации на далеких расстояниях, являются довольно затратными по ресурсу и времени. В то же время для описания классических процессов [1–3], а также неклассических процессов переноса [4–11] разнообразные аналитические методы (как точные, так и приближенные) широко используются в различных областях естествознания — от физики полупроводников до гидрогеологии.

В работе [12] предложен новый подход к описанию неклассических процессов переноса в средах с крупномасштабными неоднородностями на расстояниях от источника примеси, значительно больших размера основной области ее распределения. Результат для концентрации в [12] сведен к линейным ин-

тегралам вдоль специальной кривой — траектории концентрационного сигнала. Эта траектория определяется из вариационного принципа, приводящего к обыкновенному дифференциальному уравнению первого порядка для единичного вектора касательной к самой траектории. Такой подход к теории процессов переноса по форме близок к геометрической оптике в электродинамике [13] (или к квазиклассическому приближению в квантовой механике [14]). При этом роль луча в асимптотической теории переноса играет траектория концентрационного сигнала, а эйконала — показатель экспоненты в выражении для концентрации. Недавно [15] асимптотический подход к описанию процессов переноса, развитый в [12], применен к классической диффузии в неоднородных средах. В обеих работах — [12, 15] материальная среда, по которой происходит перенос примеси, считалась изотропной.

Цель настоящей работы состоит в том, чтобы обобщить асимптотическую теорию на более общий случай классической диффузии в неоднородных анизотропных средах. Структура статьи следующая. После формулировки задачи в разд. 2 дан вывод формулы для концентрации. В разд. 3 приведено краткое обсуждение. В Приложении выведены результаты для однородной анизотропной среды.

^{*} E-mail: kondrat@ibrae.ac.ru

^{**} E-mail: alex27_matveev@mail.ru

^{***} E-mail: obukhov@ibrae.ac.ru

2. АСИМПТОТИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА ДЛЯ КОНЦЕНТРАЦИИ

Уравнение диффузии в неоднородной анизотропной среде имеет традиционный вид:

$$\partial_t c(\mathbf{r}, t) = \partial_i (D^{ij} \partial_j c(\mathbf{r}, t)), \quad (1)$$

где $c(\mathbf{r}, t)$ — концентрация примеси, зависящая от времени t и пространственных координат $\mathbf{r} = x^k$, $k = 1, 2, 3$ («радиус-вектор»), и

$$\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}, \quad \partial_i = \frac{\partial}{\partial x^i}; \quad D^{ij} = D^{ji} = D^{ij}(\mathbf{r})$$

— симметричный тензор диффузии. Далее мы будем использовать формализм дифференциальной геометрии, который составляет математическую основу общей теории относительности (см. [16]). В частности, напомним правило Эйнштейна, которое предполагает суммирование по одинаковым индексам.

Найдем решение уравнения диффузии (1) для концентрации на далеких расстояниях от источника примеси, используя и обобщая геометрические методы, развитые ранее в работах [12, 15].

Задав начальное условие в форме

$$c(\mathbf{r}, 0) = N \delta(\mathbf{r}), \quad (2)$$

перепишем уравнение (1) в представлении Лапласа:

$$p c_p(\mathbf{r}) - \partial_i (D^{ij} \partial_j c_p(\mathbf{r})) = N \delta(\mathbf{r}). \quad (3)$$

На асимптотически далеких расстояниях от источника концентрацию примеси, как обычно, ищем в виде

$$c_p(\mathbf{r}) = A_p(\mathbf{r}) e^{-\Gamma_p(\mathbf{r})}, \quad \Gamma_p(\mathbf{r}) \gg 1. \quad (4)$$

Отсюда в первом приближении по малому параметру $\propto \Gamma_p^{-1}$ получаем уравнение

$$p - D^{ij} (\partial_i \Gamma_p) (\partial_j \Gamma_p) = 0. \quad (5)$$

Введем 3-вектор u^i , касательный к траектории $x^i(s)$ концентрационного сигнала

$$u^i = g^{ij} \partial_j \Gamma_p, \quad (6)$$

где определим эффективную метрику в среде

$$ds^2 = g_{ij} dx^i dx^j. \quad (7)$$

Компоненты метрического тензора задаются тензором диффузии

$$g^{ij} = \frac{D^{ij}}{p}, \quad g_{ij} = p D_{ij}. \quad (8)$$

Как обычно D_{ij} обозначает матрицу обратную к D^{ij} :

$$D_{ij} D^{jk} = \delta_i^k.$$

Согласно (6), (8), и (5), имеем нормировку

$$g_{ij} u^i u^j = 1, \quad (9)$$

т.е. вектор (6) касательной к лучу концентрационного сигнала имеет единичную длину в эффективной метрике (7). Тем самым, квазиэйконол $\Gamma_p(\mathbf{r})$ дается равенством

$$\Gamma_p(\mathbf{r}) = \int_0^{\mathbf{r}} ds = \int_0^{\mathbf{r}} \sqrt{g_{ij} dx^i dx^j}. \quad (10)$$

Интегрирование здесь происходит по траектории концентрационного сигнала, которая определяется из вариационного принципа:

$$\delta \Gamma_p(\mathbf{r}) = 0, \quad (11)$$

откуда получается уравнение для траектории сигнала как геодезической:

$$\frac{d}{ds} u^i + \{^i_{jk}\} u^j u^k = 0. \quad (12)$$

Здесь символы Кристоффеля (связность эффективной римановой метрики) определены равенством

$$\{^i_{jk}\} = \frac{1}{2} g^{il} (\partial_j g_{kl} + \partial_k g_{jl} - \partial_l g_{jk}). \quad (13)$$

Отметим, что фактическим параметром разложения, в результате которого мы пришли к уравнению (5), является комбинация $(\min(r, L) |\nabla \Gamma_p|)^{-1}$, где r — расстояние от источника до точки наблюдения, а L — характерный масштаб длины, на котором заметно меняется коэффициент диффузии. Уравнение для предэкспоненты A_p из (4) получается в следующем порядке малости по параметру $(\min(r, L) |\nabla \Gamma_p|)^{-1}$ после подстановки (4) в (3):

$$2g^{ij} (\partial_i A_p) (\partial_j \Gamma_p) + A_p (\partial_i g^{ij}) (\partial_j \Gamma_p) + A_p g^{ij} \partial_i \partial_j \Gamma_p = 0. \quad (14)$$

Отсюда с учетом (6) находим

$$2 \frac{dA_p}{ds} + A_p \partial_i u^i = 0. \quad (15)$$

Прежде чем выписать решение уравнения (15), выясним поведение второго слагаемого в нем при $|\mathbf{r}| \ll L$. Подставляя в (6) вытекающее из (10) приближенное равенство

$$\Gamma_p(\mathbf{r}) \approx \sqrt{p D_{ij} x^i x^j}, \quad (16)$$

справедливое при $|\mathbf{r}| \ll L$, получим

$$\partial_i u^i \approx \frac{2}{\sqrt{p D_{ij} x^i x^j}}, \quad |\mathbf{r}| \ll L. \quad (17)$$

С учетом этого соотношения решение уравнения (15) можно представить в форме

$$A_p = B_p \exp[-H(\mathbf{r})] / \int_0^{\mathbf{r}} \sqrt{D_{ij} dx^i dx^j}, \quad (18)$$

где

$$H(\mathbf{r}) = \int_0^{\mathbf{r}} ds \left(\frac{1}{2} \partial_i u^i - \frac{1}{s} \right). \quad (19)$$

Отметим, что эта величина не зависит от лапласовской переменной, так как p под интегралом в (19) сокращается. Подставляя (18) и (10) в (4) с учетом (8) имеем

$$c_p(\mathbf{r}) = B_p \exp \left\{ -\sqrt{p} \int_0^{\mathbf{r}} \sqrt{D_{ij} dx^i dx^j} - H(\mathbf{r}) \right\} / \int_0^{\mathbf{r}} \sqrt{D_{ij} dx^i dx^j}. \quad (20)$$

Константу интегрирования B_p можно фиксировать, перейдя к случаю диффузии в анизотропной однородной среде, который рассмотрен в Приложении. При выполнении неравенства $|\mathbf{r}| \ll L$ выражение (20) должно переходить в соответствующее выражение для однородной среды с постоянным тензором диффузии, равным $D^{ij}(0)$. Поэтому сопоставляя (20) с (A.5) с учетом того, что

$$\int_0^{\mathbf{r}} \sqrt{D_{ij} dx^i dx^j} \simeq \sqrt{D_{ij}(0) x^i x^j}, \quad (21)$$

$$H(\mathbf{r}) \rightarrow 0,$$

при $|\mathbf{r}| \ll L$ находим

$$B_p = \frac{N}{4\pi\sqrt{D_0}}, \quad D_0 = \det(D^{ij}(0)). \quad (22)$$

Подставляя выражения (22) и (19) в (20) и совершая обратное преобразование Лапласа, приходим к окончательному результату для концентрации примеси при классической диффузии в анизотропной неоднородной среде:

$$c(\mathbf{r}, t) = \frac{N}{\sqrt{D_0(4\pi t)^3}} \times \exp \left\{ -\frac{1}{4t} \left(\int_0^{\mathbf{r}} \sqrt{D_{ij} dx^i dx^j} \right)^2 + \int_0^{\mathbf{r}} ds \left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2} \partial_i u^i \right) \right\}. \quad (23)$$

Подчеркнем, что интегралы здесь, как и в (18)–(20), берутся вдоль траектории концентрационного сигнала, определяемой уравнением геодезической (12).

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе предложено дальнейшее развитие метода вычисления распределения концентрации на асимптотически далеких расстояниях от источника примеси в среде, обладающей анизотропией и крупномасштабными неоднородностями. Установлено, что показатель экспоненты $\Gamma_p \gg 1$ в выражении для концентрации (4) удовлетворяет нелинейному уравнению в частных производных первого порядка (5). Это позволило при вычислении функции $\Gamma_p(\mathbf{r})$ воспользоваться вариационным принципом, в результате чего выражение для функции $\Gamma_p(\mathbf{r})$ свелось к линейному интегралу вдоль траектории концентрационного сигнала, оказавшейся геодезической для эффективной римановой метрики. Тем самым, ясно прослеживается аналогия с геометрической оптикой и квазиклассическим приближением в квантовой механике. Предэкспонента $A_p(\mathbf{r})$ в выражении для концентрации (4) найдена в ведущем приближении по малому параметру $\propto \Gamma_p^{-1}$.

Результатом работы является асимптотическая формула (23) для концентрации примеси при переносе посредством классической анизотропной диффузии в неоднородной среде. Формула справедлива

на расстояниях от источника примеси, значительно больше размера основной области ее распределения.

Достоинство формулы в ее простоте. Элементами формулы являются однократные интегралы вдоль траектории концентрационного сигнала, соединяющей источник примеси с точкой наблюдения. Сама траектория есть следствие вариационного принципа и определяется вытекающим из него обыкновенным дифференциальным уравнением первого порядка для единичного касательного вектора.

Возможной областью приложения развитой теории может быть диффузия в неравномерно нагретых кристаллах, где коэффициент диффузии сильно зависит от температуры, а также диффузия в замагниченной плазме.

Предлагаемый метод может быть обобщен на случай неклассических процессов переноса в анизотропных неоднородных средах путем обобщения полученных ранее результатов в работах [12, 17].

Благодарности. Авторы выражают глубокую благодарность Л. В. Матвееву за плодотворное обсуждение результатов.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 18-19-00533).

Эту работу авторы посвящают Юбилею Игоря Ехильевича Дзялошинского, чьим учеником является один из нас (П. С. К.).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Перенос в анизотропной однородной среде

Рассмотрим перенос примеси в анизотропной однородной ($D^{ij} = \text{const}$) среде на основе классической диффузии с начальным условием

$$c(\mathbf{r}, 0) = N \delta(\mathbf{r}). \quad (\text{A.1})$$

В этой задаче концентрация в представлении Лапласа имеет вид

$$c_p(\mathbf{r}) = N \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{p + D^{ij}k_i k_j}. \quad (\text{A.2})$$

После замены переменной интегрирования получаем

$$c_p(\mathbf{r}) = \frac{N}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dq q^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \times \frac{\exp \left[iq \sqrt{D_{ij} x^i x^j} \cos \theta \right]}{\sqrt{D}(p + q^2)}, \quad D = \det(D^{ij}). \quad (\text{A.3})$$

Интегрируя по угловой переменной θ , имеем

$$c_p(\mathbf{r}) = \frac{N}{i(2\pi)^2} \int_{-\infty}^\infty dq q \frac{\exp \left[iq \sqrt{D_{ij} x^i x^j} \right]}{\sqrt{DD_{ij} x^i x^j}(p + q^2)}. \quad (\text{A.4})$$

Далее, интегрируя по переменной q , находим

$$c_p(\mathbf{r}) = \frac{N}{4\pi \sqrt{DD_{ij} x^i x^j}} \exp \left[-\sqrt{pD_{ij} x^i x^j} \right]. \quad (\text{A.5})$$

Наконец, выполняя обратное преобразование Лапласа, имеем выражение для концентрации примеси при переносе путем классической диффузии в однородной анизотропной среде

$$c(\mathbf{r}, t) = \frac{N}{\sqrt{D(4\pi t)^3}} \exp \left[-\frac{D_{ij} x^i x^j}{4t} \right]. \quad (\text{A.6})$$

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Crank, *The mathematics of Diffusion*, 2nd ed., Clarendon Press, Oxford (1975).
2. H. S. Carslaw and J. C. Jaeger, *Conduction of Heat in Solids*, Clarendon Press, Oxford (1959).
3. S. R. de Groot and P. Mazur, *Nonequilibrium Thermodynamics*, North-Holland, New York (1962).
4. Q. Gu, E. A. Schiff, S. Grebner, F. Wang, and R. Schwarz, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3196 (1996).
5. H. Sher and M. Lax, *Phys. Rev. B* **7**, 4491 (1973).
6. M. Weiss, H. Hashimoto, and T. Nilsson, *Biophysical J.* **84**, 4043 (2003).
7. D. S. Banks and C. Fradin, *Biophysical J.* **89**, 2960 (2005).
8. S. P. Neuman, *Water Resources Research* **26**, 1749 (1990).
9. M. Sahimi, *Phys. Rep.* **306**, 213 (1998).

10. J. P. Bouchaud and A. Georges, Phys. Rep. **195**, 127 (1990).
11. L. Bolshov, P. Kondratenko, K. Pruess, and V. Semenov, Vadose Zone J. **7**, 1135 (2008).
12. П. С. Кондратенко, Письма в ЖЭТФ **106**, 581 (2017).
13. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред. Теоретическая физика*, т. VIII, Наука, Москва (2005).
14. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика: нерелятивистская теория. Теоретическая физика*, т. III, Наука, Москва (2004).
15. П. С. Кондратенко, А. Л. Матвеев, ЖЭТФ **157**, 703 (2020).
16. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля. Теоретическая физика*, т. II, Наука, Москва (2014).
17. Л. А. Большов, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев, УФН **189**, 691 (2019).

НЕКЛАССИЧЕСКИЙ ПЕРЕНОС ПРИМЕСИ В МОДЕЛИ ДЫХНЕ С ПАРАМЕТРАМИ, ЗАВИСЯЩИМИ ОТ КООРДИНАТ. ПРИНЦИП ФЕРМА

*П. С. Кондратенко**, *А. Л. Матвеев*

*Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук
115191, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 2 ноября 2020 г.,
после переработки 2 ноября 2020 2020 г.
Принята к публикации 4 ноября 2020 2020 г.

Разработана асимптотическая теория переноса примеси в простейшей регулярно-неоднородной среде — модели Дыхне, демонстрирующей субдиффузионный транспортный режим, с параметрами, испытывающими крупномасштабные пространственные зависимости. Результаты для концентрации на расстояниях от источника примеси, значительно превышающих размер основной области ее локализации, выражаются через линейные интегралы вдоль траекторий концентрационных сигналов. Эти траектории получаются из вариационного принципа, который является аналогом принципа Ферма в геометрической оптике. Интегралы вдоль траекторий представляют собой аналоги длины оптического пути. Вид интегралов зависит от режима переноса, а траектории в зависимости от режима могут быть как плоскими, так и трехмерными кривыми.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040155

1. ВВЕДЕНИЕ

Уже многие десятилетия неклассические режимы переноса примеси являются предметом интенсивных исследований (см., например, обзор [1]). Неклассическими (аномальными) принято называть режимы, в которых зависимость размера основной области локализации примеси от времени на больших временах описывается соотношением $R(t) \sim t^\gamma$, где, в отличие от классической диффузии, показатель степени $\gamma \neq 1/2$. Различают супердиффузионные (быстрые), $\gamma > 1/2$, и субдиффузионные (медленные), $\gamma < 1/2$, неклассические режимы переноса. Аномальные процессы встречаются в самых разнообразных средах — от полупроводников до геологических структур. Физическими предпосылками таких процессов могут быть дальнедействующие корреляции или (и) долговременные релаксации характеристик среды, формирующих процессы переноса. В тех случаях, когда размер $R(t)$ оказывается мень-

ше длины корреляции l или (и) текущее время t меньше времени релаксации τ , режим переноса в определенном смысле является неравновесным и может стать неклассическим. При этом в сравнении с классической диффузией свойство $R(t) < l$ служит ускоряющим фактором, а $t < \tau$ — замедляющим.

Обычно при аналитическом описании неклассических процессов среда на больших пространственных масштабах предполагается в среднем однородной. Между тем, реальные среды обладают крупномасштабными неоднородностями. В такой ситуации даже классические процессы адвекции–диффузии требуют выполнения довольно трудоемких численных расчетов. Дополнительные, причем принципиальные трудности возникают в случае неклассических процессов, для которых управляющие уравнения для концентрации являются интегродифференциальными, а входящие туда ядра во всех деталях остаются неизвестными.

С целью преодоления указанных трудностей в работе [2] предложен новый подход, базирующийся на асимптотическом описании процессов переноса. Подразумевается важная для практики ситуация,

* E-mail: kondrat@ibrae.ac.ru

когда расстояние от источника примеси до точки наблюдения велико в сравнении с размерами основной области локализации примеси в заданный момент времени. Как показывает анализ, на таких расстояниях, с одной стороны, формирование концентрации обусловлено коротковолновой частью механизма переноса. С другой, зависимость концентрации от расстояния до источника носит экспоненциальный характер. Формально, таким образом, ситуация напоминает ту, которая имеет место в волновой оптике или квантовой механике, когда становится применимым соответственно приближение геометрической оптики или квазиклассическое приближение. В итоге, концентрация примеси в асимптотической области координат и времени состоит из экспоненты с вещественным показателем — эйконалом, убывающим на далеких расстояниях от источника примеси, и предэкспоненциального множителя. Эйконал удовлетворяет уравнению в частных производных первого порядка, решение его получается на основе вариационного принципа, который является аналогом принципа Ферма. Вывод результатов в [2] проведен на примере модели случайной адвекции, приводящей к неклассическому — супердиффузионному режиму переноса [3]. В работах [4, 5] асимптотический подход был применен к анализу переноса примеси на основе классической диффузии (изотропной и анизотропной) в неоднородной среде.

В настоящей работе асимптотический подход приложен к простейшей модели, демонстрирующей субдиффузионный режим переноса и смену режимов во времени, — модели Дыхне [6, 7] с переменными в пространстве параметрами.

Дальнейшая структура статьи следующая. В разд. 2 описана постановка задачи. Раздел 3 посвящен выводу соотношений для эйконала — показателя экспоненты в выражении для концентрации в различных предельных интервалах. В разд. 4 установлены соотношения для предэкспоненциальных множителей и получены асимптотические выражения для концентрации. В заключительном разделе кратко подведены итоги.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Первоначально модель Дыхне [6, 7] была сформулирована следующим образом. Диффузионный перенос примеси происходит в пространстве, состоящем из области I (трещины) — плоскопараллельного слоя толщиной a , заполненного средой с коэффициентом диффузии D , и области II (матрицы) —

остальной части бесконечного пространства, заполненной средой с коэффициентом диффузии d , причем $d \ll D$. В начальный момент времени примесь сосредоточена в одной точке внутри трещины, и начальная концентрация при $t = 0$ задана равенством

$$c(\mathbf{r}, t = 0) = N\delta(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Здесь N — полное число частиц примеси, $\mathbf{r} = (\boldsymbol{\rho}, z)$ — радиус-вектор, в котором ось z направлена по нормали к трещине, $\boldsymbol{\rho} = (x, y)$ — двумерная координата вдоль границы плоскопараллельного слоя. Начало координат выбрано так, что границы между областями I и II соответствуют $z = \pm a/2$. Параметры модели a, D, d являются константами. Модель Дыхне является простейшей физической моделью, демонстрирующей неклассическое поведение переноса примеси и смену транспортных режимов во времени: в интервале времени $t \ll t_1$ — быстрая классическая диффузия, $t_1 \ll t \ll t_2$ — субдиффузия, $t \gg t_2$ — медленная классическая диффузия, где $t_1 = a^2/4d$, $t_2 = (D/d)^2 t_1$.

В настоящей работе параметры D, d будут предполагаться функциями координат, удовлетворяющими прежнему условию $d \ll D$, так что уравнение переноса примеси имеет вид

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \text{div}(\mathfrak{D}\nabla c), \quad (2)$$

$$\mathfrak{D}(\mathbf{r}) = D(\mathbf{r})\theta\left(\frac{a}{2} - |z|\right) + d(\mathbf{r})\theta\left(|z| - \frac{a}{2}\right)$$

с обычными граничными условиями, требующими непрерывности концентрации $c(\mathbf{r}, t)$ и нормальной составляющей потока примеси $-\mathfrak{D}(\mathbf{r})\nabla c(\mathbf{r}, t)$ при $|z| = a/2$.

Будем считать, что характерные масштабы координатной зависимости функций $D(\mathbf{r})$ и $d(\mathbf{r})$ соответственно $L_f \sim |\nabla \ln D(\mathbf{r})|^{-1}$ и $L_m \sim |\nabla \ln d(\mathbf{r})|^{-1}$ удовлетворяют условиям

$$L_f \gg a, \quad L_m \gtrsim \frac{D}{d}a. \quad (3)$$

Поэтому в дальнейшем, пренебрегая зависимостью коэффициента диффузии внутри трещины (при $|z| < a/2$) от координаты z , будем обозначать его $D(\boldsymbol{\rho})$.

На малых временах, когда $t \ll t_0$, где $t_0 = a^2/16D_0$, $D_0 = D(0)$, матрица не влияет на перенос внутри трещины и он идет в режиме трехмерной классической диффузии с постоянным коэффициентом диффузии D_0 . На временах $t \gg t_0$ распределение примеси при $|z| < a/2$ по толщине

является практически однородным. Поэтому с учетом граничных условий и начального условия (1), после интегрирования уравнения диффузии (2) по толщине трещины и перехода в представление Лапласа приходим к уравнению

$$pc_p(\rho) - \operatorname{div}(D(\rho)\nabla c_p(\rho)) - \frac{1}{a}d(\rho) \frac{\partial c_p(\rho, z)}{\partial z} \Big|_{z=-a/2-0}^{z=a/2+0} = \frac{1}{a}N\delta(\rho), \quad |z| \leq \frac{a}{2}. \quad (4)$$

Здесь p — переменная Лапласа,

$$c_p = \int_0^\infty c(t)e^{-pt} dt.$$

Нас будет интересовать концентрация на асимптотически далеких расстояниях от источника примеси, когда $r \gg R(t)$, где $R(t)$ — размер основной области ее локализации в момент времени t . Тогда решение уравнения (4) удобно представить в форме [1]

$$c_p(\rho) = A_p(\rho) \exp[-\Gamma_p(\rho)], \quad \Gamma_p(\rho) \gg 1. \quad (5)$$

Для того чтобы раскрыть третье слагаемое в левой части уравнения (4), требуется рассмотреть уравнение диффузии в матрице. С учетом граничных условий и при выполнении неравенства

$$|\nabla\Gamma_p(\rho)| \ll \sqrt{\frac{p}{d}} \quad (6)$$

уравнение диффузии в матрице согласно (2) принимает вид

$$pc_p(\mathbf{r}) = d_0 \frac{\partial^2 c_p(\mathbf{r})}{\partial t^2}, \quad |z| > \frac{a}{2}. \quad (7)$$

Здесь обозначено

$$d_0 = d(\mathbf{r}) \Big|_{\rho=0, z=a/2}. \quad (8)$$

В уравнении (7) и далее для простоты считаем, что $d(\mathbf{r})|_{z=a/2} = d(\mathbf{r})|_{z=-a/2}$.

С учетом граничного условия для концентрации указанное уравнение имеет очевидное решение:

$$pc_p(\mathbf{r}) = c_p(\rho) \exp \left[- \left(|z| - \frac{a}{2} \right) \sqrt{\frac{p}{d_0}} \right]. \quad (9)$$

Подстановка его в (4) приводит к замкнутому уравнению для концентрации в трещине:

$$\left(p + \sqrt{\frac{p}{t_1}} \right) c_p(\rho) - \operatorname{div}(D(\rho)\nabla c_p(\rho)) = \frac{1}{a}N\delta(\rho). \quad (10)$$

Здесь обозначено

$$t_1 = \frac{a^2}{4d_0}. \quad (11)$$

При выполнении неравенства (6) матрица по отношению к примеси в трещине играет роль ловушки. Это приводит к замедлению режима переноса в трещине, в то же время не отменяя участие ее в формировании режима переноса. Иная ситуация возникает при выполнении противоположного неравенства:

$$|\nabla\Gamma_p(\rho)| \gg \sqrt{\frac{p}{d}}. \quad (12)$$

В этом случае матрица полностью берет на себя формирование режима переноса. Для его описания предназначено вытекающее из (2) уравнение

$$pc_p(\mathbf{r}) = \operatorname{div}(d(\mathbf{r})\nabla c_p(\mathbf{r})), \quad |z| \geq a/2. \quad (13)$$

Его решение в асимптотической области имеет вид, аналогичный (5):

$$c_p(\mathbf{r}) = A_p(\mathbf{r}) \exp[-\Gamma_p(\mathbf{r})], \quad \Gamma_p(\mathbf{r}) \gg 1. \quad (14)$$

3. ЭЙКОНАЛ

Благодаря неравенствам $\Gamma_p(\rho) \gg 1$ и $\Gamma_p(\mathbf{r}) \gg 1$ возникают малые параметры

$$\begin{aligned} \min[(r, L_f)|\nabla\Gamma_p|]^{-1} &\ll 1, \\ \min[(r, L_m)|\nabla\Gamma_p|]^{-1} &\ll 1. \end{aligned} \quad (15)$$

В главном приближении по ним после подстановки выражений (5) и (14) соответственно в уравнения (10) и (13) приходим к уравнениям

$$(\nabla\Gamma_{1p}(\rho))^2 = \frac{p}{D(\rho)}, \quad p \gg \frac{1}{t_1}, \quad (16)$$

$$(\nabla\Gamma_{2p}(\rho))^2 = \frac{\sqrt{p/t_1}}{D(\rho)}, \quad \frac{1}{t_2} \ll p \ll \frac{1}{t_1}, \quad (17)$$

$$(\nabla\Gamma_{3p}(\mathbf{r}))^2 = \frac{p}{d(\mathbf{r})}, \quad p \ll \frac{1}{t_2}, \quad (18)$$

где характерное время $t_2 = (D/d)^2 t_1$ получается из сравнения $|\nabla\Gamma_p(\rho)| \sim \sqrt{p/d}$. Отметим, что именно благодаря второму неравенству из (3) с учетом только что приведенного выражения для характерного времени t_2 , оказалось возможным при $p \gg t_2^{-1}$ воспользоваться приближенным равенством $d(\mathbf{r}) \simeq d_0$.

Далее для удобства перейдем от функций Γ_{sp} к их безразмерным аналогам ψ_s :

$$\begin{aligned}\Gamma_{sp}(\boldsymbol{\rho}) &= \kappa_s(p)\psi_s(\boldsymbol{\rho}), \quad s = 1, 2, \\ \Gamma_{3p}(\mathbf{r}) &= \kappa_3(p)\psi_3(\mathbf{r}),\end{aligned}\quad (19)$$

где размерные множители $\kappa_s(p)$ определены равенствами

$$\begin{aligned}\kappa_1(p) &= \sqrt{\frac{p}{D_0}}, \quad \kappa_2(p) = \left[\frac{p}{D_0^2 t_1}\right]^{1/4}, \\ \kappa_3(p) &= \sqrt{\frac{p}{d_0}}.\end{aligned}\quad (20)$$

На основе (16)–(18) с учетом (19), (20) приходим к уравнениям для безразмерных функций ψ_s :

$$\begin{aligned}(\nabla\psi_{sp}(\boldsymbol{\rho}))^2 &= (n_s(\boldsymbol{\rho}))^2, \quad s = 1, 2, \\ (\nabla\psi_{3p}(\mathbf{r}))^2 &= (n_3(\mathbf{r}))^2,\end{aligned}\quad (21)$$

в которых величины n_s определены равенствами

$$\begin{aligned}n_1(\boldsymbol{\rho}) &= \sqrt{\frac{D_0}{D(\boldsymbol{\rho})}}, \quad n_2(\boldsymbol{\rho}) = n_1(\boldsymbol{\rho}), \\ n_3(\mathbf{r}) &= \sqrt{\frac{d_0}{d(\mathbf{r})}}.\end{aligned}\quad (22)$$

Уравнения (21) являются уравнениями в частных производных первого порядка и по своей форме совпадают с уравнением эйконала в геометрической оптике (ГО) [8]. Поэтому в соответствии с теорией таких уравнений решения записываются в форме

$$\begin{aligned}\psi_1(\boldsymbol{\rho}) &= \int_0^{\boldsymbol{\rho}} n_1(\boldsymbol{\rho}) dl_1, \quad \psi_2(\boldsymbol{\rho}) = \psi_1(\boldsymbol{\rho}), \\ \psi_3(\mathbf{r}) &= \int_0^{\mathbf{r}} n_3(\mathbf{r}) dl_3.\end{aligned}\quad (23)$$

Здесь интегрирование происходит вдоль траекторий концентрационных сигналов, являющихся аналогом лучей в ГО. Сами траектории определяются из вариационного принципа:

$$\delta \int_0^{\boldsymbol{\rho}} n_1(\boldsymbol{\rho}) dl_1 = 0, \quad \delta \int_0^{\mathbf{r}} n_3(\mathbf{r}) dl_3 = 0, \quad (24)$$

который является аналогом принципа Ферма в ГО. Из (24) вытекают уравнения для единичных векторов, касательных к траекториям

$$\begin{aligned}\frac{d\boldsymbol{\nu}_1(\boldsymbol{\rho})}{dl} &= \frac{1}{n_1(\boldsymbol{\rho})} \left(\nabla n_1(\boldsymbol{\rho}) - \boldsymbol{\nu}_1 \frac{dn_1(\boldsymbol{\rho})}{dl} \right), \\ \boldsymbol{\nu}_2(\boldsymbol{\rho}) &\equiv \boldsymbol{\nu}_1(\boldsymbol{\rho}),\end{aligned}\quad (25)$$

$$\begin{aligned}\frac{d\boldsymbol{\nu}_3(\mathbf{r})}{dl} &= \frac{1}{n_3(\mathbf{r})} \left(\nabla n_3(\mathbf{r}) - \boldsymbol{\nu}_3 \frac{dn_3(\mathbf{r})}{dl} \right), \\ \boldsymbol{\nu}_3 &\equiv \boldsymbol{\nu}_3(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (26)$$

Траектории при $s = 1, 2$ являются плоскими, а траектория с $s = 3$ — пространственной. Функции n_s могут быть названы индексами концентрационной рефракции, а $\psi_1(\boldsymbol{\rho})$ и $\psi_3(\mathbf{r})$ — длинами концентрационных путей.

4. КОНЦЕНТРАЦИЯ ПРИМЕСИ В АСИМПТОТИЧЕСКОМ ПРЕДЕЛЕ

В следующем приближении по малому параметру $[\min(r, L)|\nabla\Gamma_p|]^{-1} \ll 1$ из уравнений (10) и (13) после подстановки в них выражений (5) и (14), соответственно, получаются уравнения для предэкспонент:

$$\begin{aligned}\frac{d \ln A_{sp}(\boldsymbol{\rho})}{d\psi_s} + \frac{1}{2} \operatorname{div} \left(\frac{\boldsymbol{\nu}_s}{n_s} \right) &= 0, \quad d\psi_s = n_s dl_s, \\ s &= 1, 2,\end{aligned}\quad (27)$$

$$\frac{d \ln A_{3p}(\mathbf{r})}{d\psi_3} + \frac{1}{2} \operatorname{div} \left(\frac{\boldsymbol{\nu}_3}{n_3} \right) = 0, \quad d\psi_3 = n_3 dl_3. \quad (28)$$

Напомним, что величины, отмеченные значком $s = 1, 2$, зависят от двумерной координаты $\boldsymbol{\rho}$, а со значком $s = 3$ являются функциями трехмерной координаты \mathbf{r} . Решения уравнений (27), (28), удовлетворяющих условию сшивки с точными решениями для однородной среды

$$c_{sp}^{(0)}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{N}{a\sqrt{8\pi\kappa_s\rho}} \exp(-\kappa_s\rho), \quad s = 1, 2, \quad (29)$$

$$c_{3p}^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{N}{4\pi d_0 r} \exp(-\kappa_3 r),$$

имеют вид

$$\begin{aligned}c_{sp}(\boldsymbol{\rho}) &= \frac{N}{aD_0\sqrt{8\pi\kappa_s(p)\psi_s(\boldsymbol{\rho})}} \times \\ &\times \exp(-\kappa_s\psi_s(\boldsymbol{\rho}) - H_s(\boldsymbol{\rho})), \quad s = 1, 2,\end{aligned}\quad (30)$$

$$H_1(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{2} \int_0^{\boldsymbol{\rho}} \left(\operatorname{div} \left(\frac{\boldsymbol{\nu}_s}{n_s} \right) - \frac{1}{\psi_s(\boldsymbol{\rho})} \right) d\psi_s(\boldsymbol{\rho}),$$

$$H_2(\boldsymbol{\rho}) = H_1(\boldsymbol{\rho}),$$

$$c_{3p}(\mathbf{r}) = \frac{N}{4\pi\psi_3(r)} \exp(-\kappa_3(p)\psi_3(\mathbf{r}) - H_3(\mathbf{r})),$$

$$H_3(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \int_0^{\mathbf{r}} d\psi_3 \left(\operatorname{div} \left(\frac{\boldsymbol{\nu}_3}{n_3} \right) - \frac{2}{\psi_3} \right). \quad (31)$$

Концентрации в пространственно-временном представлении $c(\rho, t)$ и $c(\mathbf{r}, t)$ получаются путем применения операции обратного преобразования Лапласа к выражениям (30), (31):

$$c(t) = \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} A_p \exp[pt - \Gamma_p] \frac{dp}{2\pi i}, \quad \text{Re } b > 0. \quad (32)$$

Благодаря условию $\Gamma_p \gg 1$, интеграл здесь берется методом стационарной фазы:

$$c(t) = \frac{A_{p_0}}{\sqrt{2\pi \left| \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial p^2} \right|_{p=p_0}}} \exp[-\Gamma(t)], \quad (33)$$

$$\Gamma(t) = \Gamma_{p_0} - p_0 t, \quad \left. \frac{\partial \Gamma}{\partial p} \right|_{p=p_0} - t = 0.$$

В результате сопоставления (30), (31) с (32), (33) с учетом выражений (20) приходим к выражениям

$$c(\rho, t) = \frac{N}{4\pi a D_0 t} \exp[-\Gamma_1(\rho) - H_1(\rho)], \quad (34)$$

$$\Gamma_1(\rho) = \frac{\psi_1^2(\rho)}{4D_0 t}$$

при условии $\Gamma_1(\rho) \gg \max[t/t_1, 1]$;

$$c(\rho, t) = \frac{N}{4\pi a D_0 t \sqrt{3}} \exp[-\Gamma_2(\rho) - H_2(\rho)], \quad (35)$$

$$\Gamma_2(\rho) = \frac{3}{4} \left(\frac{\psi_1^4(\rho)}{4D_0^2 t_1 t} \right)^{1/3},$$

при условии $\max[t/t_2, 1] \ll \Gamma_2(\rho) \ll 3t/t_1$;

$$c(\mathbf{r}, t) = \frac{N}{(4\pi d_0 t)^{3/2}} \exp[-\Gamma_3(\mathbf{r}) - H_3(\mathbf{r})], \quad (36)$$

$$\Gamma_3(\mathbf{r}) = \frac{\psi_3^2(\mathbf{r})}{4d_0 t}$$

при условии $1 \ll \Gamma_3(\mathbf{r}) \ll t/t_2$.

Отмеченные условия применимости выражений (34)–(36) определяются тем, какому из интервалов (16)–(18) принадлежит стационарное значение p_0 переменной Лапласа в (33). Асимптотические выражения (34), (35) и (36) порождены, соответственно, режимами быстрой классической двумерной диффузии, двумерной субдиффузии и медленной классической трехмерной диффузии. Как видно из условий их применимости, они описывают первые по удаленности от источника примеси ступени асимптотик во временных интервалах соответственно $t \ll t_1$,

$t_1 \ll t \ll t_2$ и $t \gg t_2$. Вместе с тем (34) и (35) являются вторыми ступенями соответственно в интервалах $t_1 \ll t \ll t_2$ и $t \gg t_2$, а выражение (34) описывает также третью (наиболее удаленную) ступень асимптотики на самых поздних временах $t \gg t_2$.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сформулируем основные результаты. На основе асимптотического подхода получены выражения для концентрации примеси в модели Дыхне с переменными в пространстве параметрами — простейшей физической модели, демонстрирующей неклассическое (субдиффузионное) поведение переноса и смену транспортных режимов во времени.

Экспоненциальное убывание концентрационных асимптотик позволило получить для показателей экспонент дифференциальные уравнения в частных производных первого порядка. Поэтому в предельных временных интервалах асимптотические выражения сведены к однократным интегралам вдоль траекторий концентрационных сигналов, которые определяются из вариационного принципа — аналога принципа Ферма в геометрической оптике. Интегралы вдоль траекторий являются аналогами длины оптического пути, а соответствующие им подынтегральные выражения — аналогами индекса рефракции. Основное отличие в результатах модели с пространственно-зависимыми параметрами от модели Дыхне с постоянными параметрами сводится к замене расстояний от источника примеси до точки наблюдения соответствующими им длинами концентрационного пути — интегралами вдоль траектории концентрационных сигналов от индексов рефракции.

Благодарности. В заключение авторы выражают глубокую благодарность Л. В. Матвееву за полезное обсуждение результатов.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-19-00533).

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. А. Большов, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев, УФН **189**, 691 (2019).
2. П. С. Кондратенко, Письма в ЖЭТФ **106**, 581 (2017).

3. A. M. Dykhne, I. L. Dranikov, P. S. Kondratenko, and L. V. Matveev, *Phys. Rev. E* **72**, 061104 (2005).
4. П. С. Кондратенко, А. Л. Матвеев, *ЖЭТФ* **157**, 703 (2020).
5. П. С. Кондратенко, А. Л. Матвеев, Ю. Н. Обухов, *ЖЭТФ* **159**, 719 (2021).
6. А. М. Дыхне, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев, *Письма в ЖЭТФ* **80**, 464 (2004).
7. П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев, *ЖЭТФ* **80**, 494 (2007).
8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Физматлит, Москва (2005).

ДИНАМИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ ЗАРЯДОВ В НЕМАТИКЕ С ОТРИЦАТЕЛЬНОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ

С. А. Пикин*

Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника»
119333, Москва, Россия

Поступила в редакцию 3 сентября 2020 г.,
после переработки 3 сентября 2020 г.
Принята к публикации 4 сентября 2020 г.

Я хочу выразить свое уважение И. Е. Дзялошинскому — соавтору книги «Метод квантовой теории поля в статистической физике», Englewood Cliffs: Prentice Hall (1963), написанной А. А. Абрикосовым, Л. П. Горьковым и И. Е. Дзялошинским, которая стала настольной книгой для молодых теоретиков. И. Е. Дзялошинский является соавтором научного открытия «Магнитоэлектрический эффект» — классического результата современной физики. Сегодня стали общепринятыми термины «вектор Дзялошинского» и «взаимодействие Дзялошинского–Мория». И. Е. Дзялошинский всегда поддерживает новые идеи и поиск новых материалов, например, жидких кристаллов. Последние обладают уникальными свойствами, например, они имеют необычные фазовые диаграммы и структуры границ сегнетоэлектрических доменов, которые связаны с дефектами и примесями в жидкокристаллических решетках. В данной работе показано, что помимо обычной электрогидродинамической (ЭГД) неустойчивости с бесконечными вдоль оси y доменами на плоскости xy (возникающими при соблюдении необходимых условий) и бесконечными x -полосами (возникающими из-за флексоэлектрической (ФЭ) неустойчивости), существуют также локализованные ЭГД-возбуждения. Эти явления приводят к своеобразной фазовой диаграмме в переменном электрическом поле.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040167

1. ВВЕДЕНИЕ

Работа [1] посвящена экспериментам с нематиком в переменном поле и содержит интересные наблюдения, которые пока не имеют теоретического объяснения. Прежде всего, нематик имел отрицательную анизотропию проводимости и потому был устойчив по отношению к электрогидродинамической (ЭГД) неустойчивости [1]. Кроме того, наблюдаемые явления совсем не похожи на явления, возникающие из-за флексоэлектрического эффекта. В этом нематике наблюдалось движение так называемых «пуль» — ориентационно деформированных частей нематика. Основной механизм образования таких «пуль» до сих пор не очень ясен и требует даль-

нейших экспериментальных и теоретических исследований. При поле E , параллельном оси z , пули вытянуты вдоль оси y , перпендикулярно оси x . При этом их размер вдоль этой оси L_x мал (порядка толщины нематического слоя). Размер L_y увеличивался с увеличением напряженности поля $\langle E^2 \rangle$, а длина L_x была постоянной. Движение «пуль» начиналось в одном и том же направлении на больших участках ячейки, но на других участках с той же вероятностью возникало движение в противоположном направлении. Скорость движения линейно зависела от $\langle E^2 \rangle$. Существование таких «пуль» возможно в некоторой области параметров системы (фазовой диаграммы). Эти эффекты могут быть связаны с определенными электролитическими свойствами [2, 3] очень чистого нематического жидкого кристалла (НЖК), т. е. НЖК, свободного от заряженных примесей. Это явление присуще обычным жидким электролитам, когда играют роль инъекци-

* E-mail: pikin@ns.crys.ras.ru

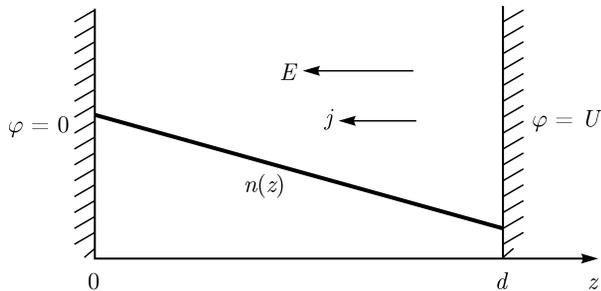


Рис. 1. Неравномерное распределение подвижных носителей заряда при слабом электрическом токе [3]

онные свойства электродов. Качественно эти факты можно объяснить с учетом инжектированных ионов и объемных зарядов в нематике под действием осциллирующего поля. Известно, что интенсивность потока инжектируемых ионов зависит от напряженности поля, создаваемого вблизи поверхности электрода внешними источниками и объемным зарядом внутри диэлектрика [4, 5]. В общем случае роль ионов разных знаков в протекании тока определяется электрохимическими процессами на двух электродах, но часто результирующий ток создается одним сортом ионов, при этом ионы противоположного знака остаются в покое [3]. В данной работе предполагается, что инжектируемые ионы создают слабый постоянный ток в осциллирующем поле. Известно [3], что при небольшом количестве инжектированных носителей электрический ток j пропорционален приложенному напряжению U , а количество инжектированных электронов около катода уменьшается с увеличением тока электронов и ограничено объемным зарядом (см. рис. 1). Связанные с зарядами возмущения иногда возникают в тех местах электродов, где внешней энергии достаточно для создания инжекции. Площадь пули $L_x L_y$ может увеличиваться за счет увеличения L_y , но L_x практически не меняется и остается приблизительно порядка толщины ячейки d .

Вся эта картина наблюдалась в переменном электрическом поле (при действии высокочастотного электромагнитного поля) и при наличии электродов. Цель данной работы — продемонстрировать возможность формирования динамической системы полос, состоящей из движущихся заряженных дефектов нематической структуры на фоне невозмущенного нематика. Это явление является пороговым по напряженности переменного электрического поля в зависимости от частоты, оно зависит от потока инжектированных электронов. Следует подчеркнуть, что такой эффект существует независи-

мо от широко известных электрогидродинамической (ЭГД) и флексоэлектрической (ФЭ) неустойчивостей [6, 7].

2. РАЗМЕР ДЕФЕКТОВ

Интенсивность потока инжектированных электронов зависит от поля E , создаваемого на поверхности электрода внешним источником. Для возникновения некоторого количества инжектированных электронов необходимо конечное время τ (необходим отрыв электронов от электродов, связывание электронов с молекулами нематика, «одевание» искажений ориентационной структуры на захваченные электроны и т. д.). Следовательно, размер L_y можно оценить как

$$L_y \sim v_y \tau, \quad (1)$$

где средняя скорость заряженных искажений v_y в вязкой жидкости зависит от интенсивности $\langle E^2 \rangle$, определяющей плотность инжектированных электронов. Значение τ из уравнения (1) существенно влияет на размер L_y , который при малом времени τ может быть небольшим и сравнимым с L_x . В работе [1] показано, что в некоторых случаях значения L_y могут быть велики. В наблюдаемых искажениях $L_y/L_x \sim 10 \div 20$.

3. ДВИЖЕНИЕ ДЕФЕКТОВ

Предположим, что концентрация инжектированных электронов n пропорциональна средней плотности энергии поля $\langle E^2 \rangle$, а именно, $n = b \langle E^2 \rangle$, где b — константа, а значение n связано со средней макроскопической скоростью движения (движение некоторых доменных стенок, ЭГД-роллов и т. д.) $\langle v \rangle$ соотношением

$$\langle v \rangle = \eta n, \quad (2)$$

где η — электрокинетический коэффициент. Таким образом, имеет место зависимость

$$\langle v \rangle = \eta b \langle E^2 \rangle. \quad (3)$$

Соотношения (2), (3) являются основными постулатами данного подхода, связывая инжектирование зарядов в электролитическую ячейку с макроскопическим движением жидкости в ней при наличии переменного поля.

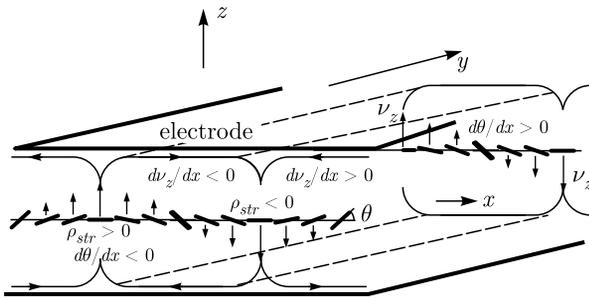


Рис. 2. Трехмерное изображение искажений в НЖК

В соответствии с [2, 3] можно оценить электрокинетический коэффициент. Можно использовать случай, когда массовый поток ионизированных молекул с плотностью ρ (по оси z — через растворитель) равен $\rho v_z = -j m/e$; макроскопическое движение жидкой смеси со скоростью v_z — это импульс единицы объема жидкости ρv_z [3]. Если \mathbf{n} ориентирован перпендикулярно ионному потоку, то происходит падение напряжения на расстоянии порядка толщины слоя d ($\varphi(0) = 0, \varphi(d) = U$), таким образом, получаем следующее уравнение [2]:

$$\rho D^\perp \left(\frac{dn}{dz} \right) = j_z [\beta^\perp + (m/e) (1 - n)], \quad (4)$$

где D_{ki} — тензор диффузии и β_{ki} — симметричные кинетические коэффициенты [2, 8] (индекс \perp означает собственное значение тензора). Здесь для простоты предполагается, что химический потенциал раствора определяется как производная термодинамического потенциала раствора (на единицу массы) по его концентрации n (например, по концентрации отрицательных ионов); n — отношению массы электролита к полной массе жидкости в данном элементе объема. Ячейка ЭГД имеет большую длину по оси y . Сечение ячейки в плоскости xy схематично показано на рис. 2 с характерными распределениями скорости жидкости и ориентации директора.

Приведенный ниже рисунок (рис. 3) может быть характерным для «пуль», если имеется универсальная причина появления посторонних зарядов. На самом деле эти структурные образования создаются и создают соответствующие оптические изображения в результате взаимодействия инжектированного электронного облака с нематическими молекулами. Например, можно сказать об определенных связанных состояниях инжектированного электрона с ароматическими электроактивными молекулами, когда отрицательные ионы образуются при захвате электронов этими молекулами по некоторым резонанс-

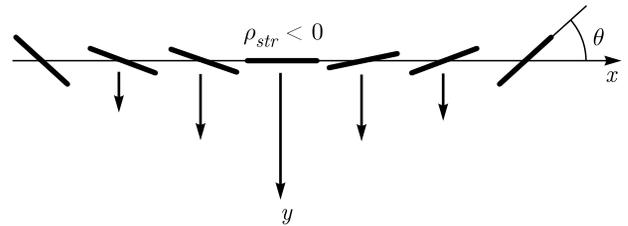


Рис. 3. Характерные распределения скорости жидкости и ориентации директора на двумерном сечении искажения (при наличии посторонних зарядов)

ным механизмам [9]. В других работах [10, 11] отмечается важная роль локализации и перераспределения ионов в «пулях». Формирование ограниченного анионного состояния связано с однократным резонансом с захватом электрона на определенную орбиталь. Этот механизм сопровождается максимумом ионного тока [9]. На рис. 3 показано образование ЭГД при относительно большой длине ориентации исходной однородной структуры (возмущения L_y вдоль оси y); колонны (пунктирные линии) этих возмущений (распределения потоков и сил в колоннах показаны как в эффekte ЭГД [6]). В такой колонне директор становится почти параллельным потоку (состояние с максимумом ионного тока). В колоннах с перпендикулярной ориентацией потоков (исходное однородное состояние нематика) наблюдается минимум ионного тока при отрицательной анизотропии электропроводности. Таким образом, электроны не связываются с молекулами планарного неискаженного нематика при отрицательной анизотропии электропроводности (базовый фон), а прилипают к искаженным структурам — «пулям» НЖК (покрывая их электронными «оболочками»).

Находящиеся в таком слое захваченных инжектированных электронов нематические молекулы напоминают уединенные волны. Все они в оптическом представлении выглядят как два параллельных блока конечной длины ($\sim L_y$) и ширины ($\sim d$). Эти блоки, очевидно, связаны с левой и правой сторонами колонн (см. рис. 3) с максимумами токов. При прямом столкновении таких «пуль» эти блоки «стряхивают» захваченный инжектированный электрон, и «пули» исчезают.

При боковом столкновении «пуль» исчезает только часть захваченных электронов, такие «пули» могут восстанавливаться и как бы проходить друг через друга. Они также могут отражаться от твердых препятствий или даже быть полностью уничтожены ими. Часть инжектированных электронов переносит электрические заряды в жидкости

под действием поля E , а другие инжектированные электроны прилипают к молекулам НЖК, запасая «пули». «Пули», заряженные одинаково, испытывают кулоновское отталкивание. Полностью заряженные подвижные искажения, «одетые» электронами, напоминают уединенные волны (солитоны): они могут распространяться одна за другой вдоль оси y со скоростью $\langle v \rangle$, что связано с взаимным отталкиванием. В этом случае направление движения y эквивалентно направлению назад.

4. ПОРОГОВЫЙ ХАРАКТЕР НЕУСТОЙЧИВОСТИ

Рассматриваемое явление является пороговым по напряженности переменного электрического поля в зависимости от частоты, оно существенно зависит от потока инжектированных электронов. Если пороговое значение $I_{th} = \langle E^2 \rangle_{th}$ пропорционально частоте переменного поля ω на некотором интервале значений ω (часть фазовой диаграммы), то нетрудно видеть, что среднее значение $\langle v \rangle$ как функция ω является прямой линией на том же интервале значений ω . Аналогичным образом можно сделать вывод, что концентрация инжектированных электронов пропорциональна пороговой напряженности поля, заряд полностью заряженного дефекта нематической структуры равен $nae \sim \langle E^2 \rangle_{th}$; поле действует на такой дефект с силой, пропорциональной этому заряду. Здесь a — коэффициент, показывающий степень прилипания электронов к молекулам НЖК.

На поверхности электрода (в плоскости xy) импульс сохраняется: движущиеся заряженные дефекты начинают заполнять поле наблюдения, но с симметрией движения вправо и влево по полосам, то есть суммарные импульсы «пуль» уравнивают друг друга. Соответственно, $\langle v_{bullets} \rangle = a\eta n$, где na — концентрация движущихся полностью заряженных «пуль». Таким образом, пороговое значение $I_{th} = \langle E^2 \rangle_{th}$ определяет количество заряженных «пуль», а их скорости (см. (3)) находятся из соотношения

$$n = bI_{th}, \quad \langle v \rangle = abI_{th}\eta. \quad (5)$$

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В тонком слое нематика при действии переменного поля при отсутствии заряженных примесей описанные выше процессы имеют место, если

инжекция электронов происходит под действием постоянного или переменного поля. Электрическое поле $E = E_z = E_0 \cos(\omega t)$ направлено перпендикулярно поверхности нематического слоя, т.е. эффект ЭГД изотропен в плоскости конденсатора. Поэтому здесь существенны двумерные возмущения потоков с инжектированными зарядами. Ячейки с искажениями теперь могут занимать всю плоскость xy , создавая полосчатую структуру с равными условиями движения посторонних зарядов вдоль оси y . В таких ячейках действуют электрические поля, приводящие в движение заряженные «пули» как искажения ориентационной структуры. «Пули» с инжектированными электронами под действием упомянутых полей могут двигаться в любом направлении, но ось y имеет предпочтение. Рисунок 5 из работы [1] (см. также соответствующие видео, приведенные в [1]) можно понять следующим образом: заряженные «пули» уходят на катод и исчезают из поля зрения. Одновременно «пули» в соседней группе полос с альтернативным (по оси y) движением уносятся потоком в обратном направлении. Эта работа совершенно феноменологическая. Чтобы найти микроскопические значения параметров a, b, η и τ , необходимо построить микроскопические уравнения, описывающие обсуждаемый процесс. Вообще говоря, эти феноменологические параметры должны соответствовать членам соответствующих уравнений движения заряженных дефектов ЭГД в нематиках.

Благодарности. Автор выражает благодарность Е. С. Пикиной за полезные и плодотворные обсуждения, а также Е. И. Кацу и В. Е. Дмитриенко за проявленный интерес к работе.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и образования (государственная программа ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук).

ЛИТЕРАТУРА

1. B.-X. Li, V. Borshch, R.-L. Xiao, S. Paladugu, T. Turiv, S. V. Shiyakovskii, and O. D. Lavrentovich, *Nat. Commun.* **9**, 2912 (2018).
2. V. G. Levich, *Fiziko-Chimicheskaya Gidrodinamika*, Fizmatgiz, Moscow (1959).
3. L. D. Landau and E. M. Lifshits, *Electrodinamika Sploshnyh Sred*, Fizmatgiz, Moscow (1959).

4. B. L. Smorodin and A. V. Taraut, *Fluid Dynamics* **45**, 1 (2010).
5. V. A. Il'in, A. N. Mordvinov, and D. A. Petrov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **147**, 181 (2015).
6. S. A. Pikin *Structural Transformations in Liquid Crystals*, Gordon & Breach Science Publishers, New York (1991).
7. P. G. de Gennes and J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, Clarendon Press, Oxford (1993).
8. S. A. Pikin, *Surface. X-Ray, Synchrotron and Neutron Investigations* **19**, 72 (2019).
9. S. A. Pshenichnyuk, A. V. Kuhto, I. N. Kuhto, and N. L. Asfandiarov, *Russian Journal of Physical Chemistry* **29**, 82 (2010).
10. S. Aya and F. Araoka, *Nature Communications* **11**, 3248 (2020).
11. Y. Shen and I. Dierking, *Soft Matter* **22**, (2020). see Isao electronic supplementary information (ESI). DOI:10.1039/d0sm00676a.

КОМБИНИРОВАННЫЕ ДЕФЕКТЫ В ФЕРРОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ НЕМАТИКАХ

*Е. И. Кац**

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

Поступила в редакцию 12 октября 2020 г.,
после переработки 19 октября 2020 г.
Принята к публикации 19 октября 2020 г.

Весьма важная и влиятельная идея о так называемых комбинированных топологических дефектах, была предложена впервые в космологии (см., например, основополагающую работу [1]) для описания возникновения различных топологических дефектов на ранних стадиях эволюции вселенной. Эта идея позднее была детально разработана теоретически и подтверждена тонкими экспериментами на сверхтекучем гелии-3, проведенными группой исследователей из Лаборатории Низких Температур в Хельсинки и институтов физических проблем им. П. Л. Капицы и теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук. В настоящей публикации, мотивированной именно этими исследованиями, возможность таких комбинированных дефектов иллюстрируется на значительно менее экзотическом примере жидких кристаллов.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040179

1. ВВЕДЕНИЕ

Для меня участие в этом юбилейном выпуске ЖЭТФ не только большая честь и возможность высказать свое поздравление И. Е. Дзялошинскому. Фактически, именно И. Е. Дзялошинский внедрил в отечественную науку (и проиллюстрировал в серии работ в 70-ые годы прошлого 20-ого века) понятие о жидких кристаллах как объекта, подлежащего изучению методами теоретической физики. Поэтому работа о жидких кристаллах, направленная в данный юбилейный сборник, является для меня естественным выражением благодарности юбиляру, от которого автор впервые узнал об их существовании.

С тех пор жидкие кристаллы уже перестали быть просто промежуточным состоянием некоторых органических веществ. Многочисленные обзоры и монографии (см., например, [2–6] и цитированную там литературу), могут быть использованы для ознакомления с достижениями физики жидких

кристаллов вплоть до первых десятилетий 21-ого века. Однако сказанное выше не означает, что фундаментальная наука о жидких кристаллах закончена и единственной мотивацией для продолжения изучения жидких кристаллов остались многообещающие практические приложения жидких кристаллов. Фундаментальная физика жидких кристаллов совсем не закончена. Более того, обнаруживаются и идентифицируются новые типы жидких кристаллов (например, нематика с модулированной структурой, так называемые *twist-bend*, в основном состоянии которого имеется ненулевая деформация кручения (*twist*) и поперечного изгиба (*bend*) поля директора), см., например, [7,8]. Еще более впечатляет открытие ферроэлектрического нематика N_F [9,10]. Интересно отметить, что возможность существования такой системы была предсказана теоретически более 100 лет тому назад, одним из создателей квантовой механики М. Борном [11], однако до работы [9] все попытки экспериментального обнаружения N_F были неудачны.

Разумеется, это открытие [9] стимулирует много новых исследований, посвященных ферроэлектрическим нематикам. Собственно, некоторые возможные направления таких работ обсуждаются авто-

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

рами публикаций [9, 10]. Данная статья посвящена одному из таких направлений. Дело в том, что в системах с несколькими типами упорядочения с нетривиальными пространствами вырождения соответствующих параметров порядка возможно существование так называемых комбинированных дефектов (отметим, что об этом факте упомянуто в комментарии Лаврентовича [10]). Многочисленные примеры этих комбинированных дефектов (возникающих в таких, казалось бы, далеких друг от друга объектах, как бесконечная вселенная или сверхтекучий He-3 в нанопористой матрице) приведены и проанализированы в работах [12, 13]. В этой заметке будет предложен еще один пример системы с комбинированными дефектами, но уже, так сказать, из обыденного мира существующих при комнатных температурах жидких кристаллов.

2. ГОМОТОПИЧЕСКИЕ ГРУППЫ ДЛЯ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ ПЕРЕХОДОВ $I-N-N_F$

Для системы, о которой пойдет речь в данной работе, существенно наличие двух относительно близких слабых (т. е. близких к непрерывным) фазовых переходов первого рода: $I-N$ (где I — изотропная жидкость, обладающая полной трехмерной симметрией вращений и трансляций, а N — нематический жидкий кристалл), где эта исходная полная симметрия понижается до одноосной вращательной симметрии $D_{\infty h}$ (вращений на произвольный угол вокруг одной выделенной оси, задаваемой единичным вектором \mathbf{n} ($\mathbf{n} \equiv -\mathbf{n}$) директором при сохранении полной трансляционной симметрии). Следующий при понижении температуры фазовый переход в ферроэлектрическую фазу N_F нарушает аполярную симметрию директора $\mathbf{n} \equiv -\mathbf{n}$. Фактически, по определению абсолютной температуры T , оба перехода в существующих при комнатных температурах ($T \simeq 300$ К) жидких кристаллах близки, так как области стабильности фаз $\Delta T \simeq (20-50)$ К всегда удовлетворяет неравенству $\Delta T < T$.

Все возможные топологические дефекты, существующие в нематической фазе N и в ферроэлектрической фазе N_F , хорошо изучены и известны [15]. Пространство вырождения параметра порядка в фазе N является проективной плоскостью P^2 , (т. е. сфера, факторизованная из-за аполярной симметрии $\mathbf{n} \rightarrow -\mathbf{n}$ по антиподальным точкам):

$$P^2 = S^2/Z_2, \tag{1}$$

где Z_2 — это группа из двух элементов, e и $e^2 = 1$. Основная и обманчиво простая идея о применении теории гомотопии к описанию топологических дефектов сводится к наблюдению за изменением физического параметра порядка на замкнутом контуре (размерности n), окружающем изучаемый дефект. При этом топология дефекта определяется соответствующим элементом π_n фундаментальной гомотопической группы. Фундаментальные гомотопические группы для P^2 (см., например, [14]) таковы:

$$\pi_1(P^2) = Z_2, \quad \pi_2(P^2) = Z, \tag{2}$$

где Z — группа целых чисел. Отсюда следует, что в нематической фазе возможны топологически стабильные линейные дефекты (дисклинации) с полуцелыми топологическими зарядами $\pm 1/2$ и нуль-мерные дефекты (монополи, называемые в нематиках ежами) с целочисленными топологическими зарядами $\pm N$. Эквивалентность (или не эквивалентность) ежей с разноименными зарядами зависит от наличия в системе дисклинаций.

В полярной фазе N_F дискретная симметрия $\mathbf{n} \rightarrow -\mathbf{n}$ нарушена. Соответственно пространство вырождения полярного параметра порядка это сфера S^2 . Соответственно фундаментальные гомотопические группы в этом случае

$$\pi_1(S^2) = 0, \quad \pi_2(S^2) = Z, \tag{3}$$

однако теперь положительные и отрицательные заряды ежей определены однозначно, так как топологически стабильные линейные дефекты (первая фундаментальная гомотопическая группа тривиальна) вообще отсутствуют.

На этом месте можно было бы закончить описание топологических дефектов в фазах N и N_F , если бы оба перехода $I-N$ и $I-N_F$ были бы полностью независимы друг от друга. Однако из того обстоятельства, что оба фазовых перехода не изолированы, следует, что нематический директор, сохраняя часть своей свободы, может быть определен и в фазе N_F . При конечной энергии зацепления директора \mathbf{n} и ферроэлектрической поляризации \mathbf{P}

$$F_{int} = \gamma_{int}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{P})^2, \tag{4}$$

в N_F можно ввести характерный пространственный масштаб

$$\xi_{int} = \sqrt{K/\gamma_{int}}, \tag{5}$$

где K — модуль ориентационной упругости Франка [2]. Соответственно на масштабах $r < \xi_{int}$ нематический директор сохраняет свои степени свободы и, таким образом, существует возможность образования

линейных сингулярностей (дисклинаций). Однако в фазе N_F первая фундаментальная гомотопическая группа π_1 тривиальна и потому свободные дисклинации не могут быть топологически стабильными. Однако при фазовом переходе $N-N_F$ нарушается дискретная группа симметрии $\mathbf{n} \rightarrow -\mathbf{n}$. Такое нарушение симметрии может приводить к наличию двух вырожденных состояний системы, что приводит к возможности существования в фазе N_F доменных стенок. В свою очередь, эти доменные стенки могут топологически «защитить» дисклинации, связывающие доменные стенки.

Интересно отметить, что космологическая динамика такого рода дефектов (струн топологически защищенных доменными стенками) была изучена в рамках калибровочных моделей в работах [16, 17]. Вне зависимости от конкретных характеристик физической системы такой комбинированный дефект требует для своего описания использования так называемых относительных гомотопических групп, краткое описание которых будет представлено в следующем разделе.

3. ОТНОСИТЕЛЬНЫЕ ГОМОТОПИЧЕСКИЕ ГРУППЫ ДЛЯ ОПИСАНИЯ КОМБИНИРОВАННЫХ ДЕФЕКТОВ В ФЕРРОЭЛЕКТРИЧЕСКОМ НЕМАТИКЕ N_F

Возможность комбинированных дефектов связана с существованием вблизи фазового перехода N_F-N двух пространственных (и энергетических) масштабов, на которых имеют место отличные друг от друга симметрии пространств вырождения R_1 и R_2 . Для описания объектов инвариантных на обоих многообразиях R_1 и R_2 используются относительные гомотопические группы $\pi_n(R_1, R_2)$. В работе [12] была предложена элегантная процедура вычисления относительных гомотопических групп. А именно, для интересующего нас случая с двумя фазовыми переходами $I-N$ и $N-N_F$ пространство вырождения

$$R_1 = G/S^2,$$

где G — первичная (исходная) группа симметрии изотропной жидкости. С другой стороны,

$$R_2 = P^2/S^2$$

и, следовательно,

$$R_1/R_2 = GS^2/S^2P^2 = G/P^2. \quad (6)$$

Таким образом, мы находим, что

$$\pi_n(R_1, R_2) \simeq \pi_n(P^2). \quad (7)$$

Следовательно, все топологически защищенные в нематической фазе объекты сохраняют свои топологические заряды и в ферроэлектрической нематической фазе N_F .

В общем случае проведенное выше простое рассмотрение не позволяет различить, какие из этих дефектов могут существовать сами по себе (т. е. как свободные), а какие обязаны быть связаны в комбинированные дефекты. Полный анализ требует знания точной последовательности относительных гомотопических групп. В такой последовательности относительные гомотопические классы $\pi_{k+1}(R_1, R_2)$ отображаются в гомотопические классы меньшей размерности $\pi_k(R_2)$. Однако в нашем случае свободные дисклинации в фазе N_F запрещены ($\pi_1(S^2) = 0$) и потому допустимы только комбинированные дефекты: дисклинации, связывающие доменные стенки.

Имеется также и другой тип комбинированных дефектов. Поскольку для обоих многообразий (R_1, R_2) гомотопическая группа π_2 не тривиальна, в фазе N_F возможны два типа монополей (ежей): свободные ежи с однозначно определяемой их топологическим зарядом структурой $\pi_2(S^2) = \mathbb{Z}$, а также комбинированные дефекты.

Хотя в принципе можно себе представить конфигурацию полей директора и вектора электрической поляризации, в которой точечный дефект (еж) ограничивает линейный дефект (дисклинацию), такой комбинированный дефект не является топологически устойчивым (только энергетические соображения, связанные с анизотропной энергией Франка или энергией диполь-дипольного взаимодействия, могут стабилизировать такой не топологический комбинированный дефект). Однако существует другая возможность. Если в нематическом жидком кристалле присутствуют одновременно точечные и линейные дефекты (ежи и дисклинации), то при обходе вокруг дисклинации еж превращается в антиежа (меняется знак топологического заряда, см., например, [15]). В ферроэлектрическом нематическом жидком кристалле такое преобразование с изменением знака точечного дефекта (ежа) требует пересечения доменной стенки (топологически стабильной в фазе N_F). Я благодарю рецензента этой работы, указавшему на это обстоятельство. Многочисленные примеры аналогичных топологически защищенных комбинированных дефектов (образующих в сверхтекучем He-3 и некоторых космологических теориях «бусы» струн и монополей) могут быть найдены в работах [18–20].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучены комбинированные топологические дефекты на примере недавно открытого ферроэлектрического жидкого кристалла. Показано, что возможно существование таких комбинированных дефектов двух типов: дисклинаций, связывающих доменные стенки, и цепочек монополей (ежей) с их зеркальными отображениями в доменных стенках — антимонополями (антиежами). На момент написания этой статьи, насколько это известно автору, нет экспериментального подтверждения существования комбинированных дефектов в ферроэлектрическом нематике. На теоретическом фронте также остаются открытыми интересные вопросы о динамике комбинированных дефектов, их взаимодействии друг с другом, со свободными дефектами и мягкими (гидродинамическими) степенями свободы жидкого кристалла. Практически не изучены (и не только в жидких кристаллах, а вообще в физике упорядоченных конденсированных сред) структуры, связанные с редко обсуждаемыми в физической литературе фундаментальными гомотопическими группами высшего чем $n = 2$ порядка. Среди них особый интерес именно для жидких кристаллов представляет гомотопическая группа π_3 . Дело в том, что π_3 описывает топологию так называемых текстур, т. е. неоднородных распределений параметра порядка, поэтому строго говоря не дефектов, но не сводимых малыми деформациями к тривиальным конфигурациям. Вспомогательная и непростая задача это вычисление гомотопической группы π_3 . Например, для пространства вырождения S^2 известен результат Хопфа $\pi_3(S^2) = \mathbb{Z}$ (и целые числа, заряды Z , называются инвариантами Хопфа). Изучение этого круга вопросов выходит за рамки данной работы и является предметом отдельного рассмотрения.

Отметим в заключение, что нематическая ферроэлектрическая фаза с однородной поляризацией может оказаться неустойчивой по отношению фазы с модулированной поляризацией [21]. Дело в том, что для полярного и четного по отношению к инверсии времени вектора электрического дипольного момента всегда имеет место диполь-флексодиполь-взаимодействие вида

$$F_{fp} = \beta_1 \mathbf{P}^2(\nabla \mathbf{P}) + \beta_2 \mathbf{P} \nabla(\mathbf{P}^2). \quad (8)$$

Такое взаимодействие (запрещенное симметрией по отношению к обращению времени в ферромагнетиках) при достаточно большой величине коэффициентов взаимодействия β_1 и β_2 приводит к энергетической выгоды структур с модулированной

поляризацией (и из-за взаимодействия (4) также и к модуляции директора \mathbf{n}). Так называемая *splay* нематическая фаза [22], является одной из возможных структур, возникающих из-за упомянутой выше неустойчивости однородного ферроэлектрического нематика. Однако описанная в этой работе классификация комбинированных дефектов применима и в этом случае.

Благодарности. Я глубоко признателен Г. Е. Воловику за подробные обсуждения идеологии комбинированных топологических дефектов, стимулировавшие эту работу.

ЛИТЕРАТУРА

1. T. W. Kibble, *J. Phys. A Math. Gen.* **9**, 1387 (1976).
2. P. G. de Gennes and J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, Clarendon Press, Oxford (1993).
3. P. Oswald and P. Pieranski, *Smectics and Columnar Liquid Crystals*, Taylor and Francis, New York (2006).
4. М. Клеман, О. Д. Лаврентович, *Основы физики частично упорядоченных сред*, Физматлит, Москва (2007).
5. I.-C. Khoo, *Liquid Crystals* (2d edition), Wiley, New York (2007).
6. L. M. Blinov, *Structure and Properties of Liquid Crystals*, Springer, New York (2011).
7. A. Mertelj, L. Cmok, N. Sebastian, R. J. Mandle, R. R. Parker, A. C. Whitwood, J. W. Goodby, and M. Copic, *Phys. Rev. X* **8**, 041025 (2018).
8. M. Chiappini, T. Drwenski, R. van Roij, and M. Dijkstra, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 068001 (2019).
9. Xi Chen, E. Korblova, D. Dong, X. Wei, R. Shao, L. Radzihovsky, M. Glaser, J. E. MacLennan, D. Bedrov, D. M. Walba, and N. A. Clark, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **117**, 14021 (2020).
10. O. D. Lavrentovich, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **117**, 14629 (2020).
11. M. Born, *Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss.* **30**, 614 (1916).
12. G. E. Volovik and K. Zhang, *Phys. Rev. Res.* **2**, 023263 (2020).
13. J. T. Makinen, V. V. Dmitriev, J. Nissinen, J. Rysti, G. E. Volovik, A. N. Yudin, K. Zhang, and V. B. Eltsov, *Nature Communications* **10**, 237 (2019).
14. G. E. Volovik, *Письма в ЖЭТФ* **109**, 509 (2019).

15. Г. Е. Воловик, В. П. Минеев, ЖЭТФ **72**, 2256 (1977).
16. T. W. B. Kibble, G. Lazarides, and Q. Shafi, Phys. Rev. D **26**, 435 (1982).
17. T. W. B. Kibble, G. Lazarides, and Q. Shafi, Phys. Lett. B **113**, 237 (1982).
18. V. B. Eltsov, J. Nissinen, and G. E. Volovik, Europhys. News **50**, 34 (2019).
19. Г. Е. Воловик, Письма в ЖЭТФ **158**, 17 (2020).
20. G. Lazarides and Q. Shafi, JHEP **10**, 193 (2019).
21. D. Blankschtein and R. M. Hornreich, Phys. Rev. B **32**, 3214 (1985).
22. N. Sebastian, L. Смoк, R. J. Mandle, M. R. de la Fuente, I. D. Olenik, M. Copic, and A. Mertelj, Phys. Rev. Lett. **124**, 037801 (2020).

СКОБКИ ПУАССОНА ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ТИПА И ИХ ОБОБЩЕНИЯ

А. Я. Мальцев^{a*}, С. П. Новиков^{a,b}

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

^b Математический институт им. В. А. Стеклова Российской академии наук
119991, Москва, Россия

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

Рассматриваются гамильтоновы структуры гидродинамического типа и некоторые их обобщения. Обсуждаются вопросы о структуре и специальных формах соответствующих скобок Пуассона и связь таких структур с теорией интегрирования систем гидродинамического типа.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040180

1. ВВЕДЕНИЕ

Данная работа будет посвящена гамильтоновым структурам, играющим в настоящее время важнейшую роль во многих областях математики и математической физики. А именно, мы будем, главным образом, рассматривать здесь гамильтоновы структуры гидродинамического типа и некоторые их важные обобщения. Традиционно, гамильтоновы структуры гидродинамического типа связаны со скобками Пуассона, возникающими в гидродинамике и представляющими собой скобки для соответствующих гидродинамических плотностей. Скобки такого типа представляют собой, как правило, выражения первого порядка по пространственным производным и могут быть представлены в следующем общем виде:

$$\{U^\nu(\mathbf{x}), U^\mu(\mathbf{y})\} = g^{\nu\mu i}(\mathbf{U}(\mathbf{x})) \delta_{x^i}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) + b_\lambda^{\nu\mu i}(\mathbf{U}(\mathbf{x})) U_{x^i}^\lambda \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (1.1)$$

где $\mathbf{U}(\mathbf{x})$ — полный набор гидродинамических плотностей в рассматриваемой задаче.

Скобки (1.1) в гидродинамике обычно связаны с гамильтонианами гидродинамического типа, т. е. гамильтонианами вида

$$H = \int P_H(\mathbf{U}(\mathbf{x})) d^n x, \quad (1.2)$$

где n — размерность рассматриваемой задачи. Нетрудно видеть, что гамильтонианам (1.2) в гамильтоновой структуре (1.1) соответствуют системы вида

$$U_t^\nu = V_\mu^{\nu i}(\mathbf{U}(\mathbf{x})) U_{x^i}^\mu, \quad (1.3)$$

$$\nu, \mu = 1, \dots, N, \quad i = 1, \dots, n.$$

Скобка (1.1) и система (1.3) записаны в наиболее общей форме, не отражающей никакой специфики гидродинамических переменных $\mathbf{U}(\mathbf{x})$. Нетрудно видеть, что приведенная форма является инвариантной по отношению к любым “точечным” заменам переменных $\tilde{\mathbf{U}} = \tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{U})$ при соответствующих преобразованиях величин $g^{\nu\mu i}(\mathbf{U})$, $b_\lambda^{\nu\mu i}(\mathbf{U})$ и $V_\mu^{\nu i}(\mathbf{U})$. Вместе с тем, конечно, в реальной гидродинамике каждая переменная, как правило, имеет свой особый физический смысл, а соответствующие скобки (1.1) и системы (1.3) обладают связанной с этим дополнительной структурой. Как хорошо известно [1], в наиболее простом случае баротропного течения идеальной жидкости скобки Пуассона плотности жидкости $\rho(\mathbf{x})$ и компонент ее скорости $v^i(\mathbf{x})$ могут быть записаны в виде

* E-mail: maltsev@itp.ac.ru

$$\begin{aligned} \{\rho(\mathbf{x}), \rho(\mathbf{y})\} &= 0, \quad \{v^i(\mathbf{x}), \rho(\mathbf{y})\} = \nabla_{x^i} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \\ \{v^i(\mathbf{x}), v^k(\mathbf{y})\} &= \frac{1}{\rho(\mathbf{x})} \left(\frac{\partial v^k}{\partial x_i} - \frac{\partial v^i}{\partial x^k} \right) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \end{aligned} \quad (1.4)$$

а соответствующий такому течению гамильтониан имеет при этом вид

$$H = \int \left(\frac{\rho v^2}{2} + \epsilon(\rho) \right) d^3x.$$

Чрезвычайно важным свойством скобки (1.4) является то, что условие

$$\operatorname{rot} \mathbf{v}(\mathbf{x}) = 0 \quad (1.5)$$

сохраняется при любой гамильтоновой динамике жидкости. Определяя при этом потенциал течения $\Phi(\mathbf{x})$ согласно стандартной формуле

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \nabla \Phi(\mathbf{x}),$$

легко проверить, что переменные $\rho(\mathbf{x})$ и $\Phi(\mathbf{x})$ задают каноническую скобку Пуассона

$$\begin{aligned} \{\rho(\mathbf{x}), \rho(\mathbf{y})\} &= 0, \quad \{\Phi(\mathbf{x}), \Phi(\mathbf{y})\} = 0, \\ \{\Phi(\mathbf{x}), \rho(\mathbf{y})\} &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \end{aligned} \quad (1.6)$$

Можно отметить также, что по своему физическому смыслу переменные $\rho(\mathbf{x})$ могут быть отнесены к переменным типа действия, а переменные $\Phi(\mathbf{x})$ — к угловым (фазовым) переменным. Как также хорошо известно, введение канонических переменных для скобки (1.4) в более общем случае завихренных течений является более сложным и связано с определением переменных Клебша для таких течений (см. [2]).

Гамильтоновы структуры (1.1) возникают также и для более общего случая небаротропных течений, а также уравнений магнитной гидродинамики [3]. Можно показать, что как в баротропном, так и в более общем небаротропном случае, введение канонических переменных (переменных Клебша) для гамильтоновых структур связано с представлением соответствующих уравнений в виде лагранжевой системы со связями (см. [4, 5]). Более того, данный подход оказывается плодотворным и при описании неизоэнтропических течений классической жидкости, а также сверхтекучести [6]. Можно отметить, что в последнем случае лагранжев и гамильтоновы подходы часто оказываются важной составляющей не только в описании определенных аспектов динамики сверхтекучей жидкости, но и в установлении уравнений такой динамики в целом (см. [7–11]). В общем случае построение канонических

переменных для гамильтоновых структур в гидродинамике является весьма важной задачей, связанной с описанием многих особенностей соответствующих течений, включая их топологические особенности (см. [12, 13]).

Ниже мы покажем, что во многих случаях для скобок гидродинамического типа естественным является более расширенное определение канонической формы. Кроме того, помимо канонической формы скобки (1.1) чрезвычайно важной при исследовании соответствующих гамильтоновых систем является также другая (диагональная) форма этой скобки. Последнее обстоятельство будет наиболее очевидно в случае одной пространственной размерности, где теория таких скобок (и их обобщений) является основой теории интегрируемых систем гидродинамического типа. Часто бывают важны и другие структуры скобок Пуассона (1.1), в частности, их ли-алгебраическая структура (см. [14–16]).

К обобщениям гамильтоновых структур гидродинамического типа можно отнести структуры, содержащие одновременно гидродинамические и фазовые переменные, структуры, объединяющие гидродинамическую и ли-алгебраическую части, структуры, содержащие высшие производные и нелокальные добавки и т. п. Огромное многообразие чрезвычайно важных структур такого типа было рассмотрено Дзялошинским и Воловиком в работе [17]. В частности, как было показано в [17], к огромному множеству приложений гамильтоновых структур, обобщающих структуры гидродинамического типа, относятся описание упругой динамики кристаллов с примесями и дефектами, динамики жидких кристаллов, динамики магнетиков самых различных типов, а также спиновых стекол.

2. ОДНОМЕРНЫЕ ГАМИЛЬТОНОВЫ СТРУКТУРЫ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ТИПА

В случае одной пространственной переменной системы гидродинамического типа имеют вид

$$U_t^\nu = V_\mu^\nu(\mathbf{U}) U_x^\mu. \quad (2.1)$$

Матрица $V_\mu^\nu(\mathbf{U})$ является матрицей линейного преобразования на касательном пространстве многообразия с координатами \mathbf{U} , в частности, она обладает соответствующим законом преобразования при точечных заменах $\tilde{\mathbf{U}} = \tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{U})$.

Система (2.1) является гиперболической в некоторой области значений \mathbf{U} , если в каждой точке этой

области все собственные значения $V_\mu^\nu(\mathbf{U})$ являются вещественными, а соответствующие собственные векторы образуют базис в касательном пространстве. Система (2.1) называется строго гиперболической в некоторой области, если в каждой точке этой области собственные значения $V_\mu^\nu(\mathbf{U})$ вещественны и попарно различны.

В случае двухкомпонентных систем (т.е. $\mathbf{U} = (U^1, U^2)$) каждая строго гиперболическая система (2.1) может быть приведена к диагональному виду

$$R_t^\nu = v^\nu(\mathbf{R}) R_x^\nu \quad (2.2)$$

с помощью вещественной замены переменных $\mathbf{R} = \mathbf{R}(\mathbf{U})$. В случае $N \geq 3$, однако, такое приведение, вообще говоря, не всегда возможно. В общем случае строго гиперболическая система (2.1) может быть локально приведена к диагональной форме (с помощью вещественной замены координат), если соответствующий ей тензор Хантьеса тождественно равен нулю. В координатной форме компоненты тензора Хантьеса могут быть записаны в виде

$$H_{\mu\lambda}^\nu(\mathbf{U}) = V_\sigma^\nu(\mathbf{U}) V_\tau^\sigma(\mathbf{U}) N_{\mu\lambda}^\tau(\mathbf{U}) - V_\sigma^\nu(\mathbf{U}) N_{\tau\lambda}^\sigma(\mathbf{U}) V_\mu^\tau(\mathbf{U}) - V_\sigma^\nu(\mathbf{U}) N_{\mu\tau}^\sigma(\mathbf{U}) V_\lambda^\tau(\mathbf{U}) + N_{\sigma\tau}^\nu(\mathbf{U}) V_\mu^\sigma(\mathbf{U}) V_\lambda^\tau(\mathbf{U}),$$

где $N_{\mu\lambda}^\nu(\mathbf{U})$ — тензор Нейенхейса оператора $V_\mu^\nu(\mathbf{U})$:

$$N_{\mu\lambda}^\nu(\mathbf{U}) = V_\mu^\sigma(\mathbf{U}) \frac{\partial V_\lambda^\nu}{\partial U^\sigma} - V_\lambda^\sigma(\mathbf{U}) \frac{\partial V_\mu^\nu}{\partial U^\sigma} + V_\sigma^\nu(\mathbf{U}) \frac{\partial V_\mu^\sigma}{\partial U^\lambda} - V_\sigma^\nu(\mathbf{U}) \frac{\partial V_\lambda^\sigma}{\partial U^\mu}.$$

В общем случае функции $R(\mathbf{U})$, удовлетворяющие в силу системы (2.1) уравнению

$$R_t = v(\mathbf{U}) R_x$$

для какой-либо функции $v(\mathbf{U})$, называются инвариантами Римана системы (2.1). При этом система (2.1) может обладать некоторым набором независимых инвариантов Римана, количество которых, однако, недостаточно для полной диагонализации системы.

Гамильтонова теория систем (2.1) связана, прежде всего, с локальными одномерными скобками Пуассона гидродинамического типа, введенными Дубровиным и Новиковым [18]. Скобка Дубровина – Новикова на пространстве полей $(U^1(x), \dots, U^N(x))$ имеет вид

$$\{U^\nu(x), U^\mu(y)\} = g^{\nu\mu}(\mathbf{U}) \delta'(x - y) + b_\lambda^{\nu\mu}(\mathbf{U}) U_x^\lambda \delta(x - y). \quad (2.3)$$

Как было показано Дубровиным и Новиковым, выражение (2.3) с невырожденным тензором $g^{\nu\mu}(\mathbf{U})$ определяет скобку Пуассона на пространстве полей $\mathbf{U}(x)$ в том и только том случае, если:

- 1) Тензор $g^{\nu\mu}(\mathbf{U})$ определяет симметричную псевдориманову метрику нулевой кривизны с верхними индексами на пространстве параметров (U^1, \dots, U^N) ;
- 2) Величины

$$\Gamma_{\mu\lambda}^\nu = -g_{\mu\sigma} b_\lambda^{\sigma\nu},$$

где $g^{\nu\sigma}(\mathbf{U}) g_{\sigma\mu}(\mathbf{U}) = \delta_\mu^\nu$, являются символами Кристоффеля для соответствующей метрики $g_{\nu\mu}(\mathbf{U})$.

Как следует из приведенных выше утверждений, любая скобка Дубровина – Новикова может быть записана в канонической форме [18]

$$\{n^\nu(x), n^\mu(y)\} = \epsilon^\nu \delta^{\nu\mu} \delta'(x - y), \quad \epsilon^\nu = \pm 1 \quad (2.4)$$

после перехода к плоским координатам $n^\nu = n^\nu(\mathbf{U})$ метрики $g_{\nu\mu}(\mathbf{U})$. Естественно ввести при этом группу точечных канонических преобразований скобки (2.4), которая, как легко видеть, совпадает в этом случае с соответствующей группой $O(K, N - K)$.

Функционалы

$$N^\nu = \int_{-\infty}^{+\infty} n^\nu(x) dx$$

являются аннуляторами скобки Дубровина – Новикова, в то время как функционал

$$P = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^N \epsilon^\nu (n^\nu)^2(x) dx$$

представляет функционал импульса для скобки (2.3).

Часто бывает удобно также записывать каноническую форму скобки Дубровина – Новикова в более общем виде:

$$\{n^\nu(x), n^\mu(y)\} = \eta^{\nu\mu} \delta'(x - y),$$

где $\eta^{\nu\mu}$ — произвольная постоянная (невырожденная) симметрическая матрица. Нетрудно видеть, что группа (точечных) канонических преобразований скобки Пуассона расширяется при этом до $GL_N(\mathbb{R})$.

В случае если N — четное, $N = 2K$, и метрика $g_{\nu\mu}(\mathbf{U})$ имеет сигнатуру (K, K) , можно выбрать плоские координаты $(a^1, \dots, a^K, b^1, \dots, b^K)$ таким

образом, что соответствующие ненулевые скобки Пуассона примут вид

$$\{a^\alpha(x), b^\beta(y)\} = \delta^{\alpha\beta} \delta'(x - y).$$

В этом случае, проводя вещественное нелокальное преобразование

$$\Phi^\alpha(x) = \int a^\alpha(x) dx,$$

мы получаем скобку Пуассона в канонической форме

$$\begin{aligned} \{b^\alpha(x), b^\beta(y)\} &= 0, \quad \{\Phi^\alpha(x), \Phi^\beta(y)\} = 0, \\ \{\Phi^\alpha(x), b^\beta(y)\} &= \delta^{\alpha\beta} \delta(x - y). \end{aligned}$$

В некоторой степени особенную роль играют также скобки Пуассона, являющие линейными по координатам $\mathbf{U}(x)$:

$$\begin{aligned} \{U^\nu(x), U^\mu(y)\} &= \\ &= \left((b_\lambda^{\nu\mu} + b_\lambda^{\mu\nu}) U^\lambda + g_0^{\nu\mu} \right) \delta'(x - y) + \\ &\quad + b_\lambda^{\nu\mu} U_x^\lambda \delta(x - y), \quad (2.5) \\ b_\lambda^{\nu\mu} &= \text{const}, \quad g_0^{\nu\mu} = \text{const}. \end{aligned}$$

Координаты $\mathbf{U}(x)$ при этом, как правило, естественно связаны с рассматриваемой задачей, а сами скобки (2.5) описываются ли-алгебраическими структурами. В случае одной пространственной переменной классификация соответствующих алгебр Ли, а также допустимых коциклов на них была построена в работе [19], где в частности, была открыта связь таких скобок с теорией фробениусовых и квазифробениусовых алгебр.

Скобка (2.3) имеет также две другие важные формы на пространстве полей $\mathbf{U}(x)$. Первая из них — «лиувиллева» форма [16, 18], имеющая вид

$$\begin{aligned} \{U^\nu(x), U^\mu(y)\} &= \\ &= \left(\gamma^{\nu\mu}(\mathbf{U}) + \gamma^{\mu\nu}(\mathbf{U}) \right) \delta'(x - y) + \frac{\partial \gamma^{\nu\mu}}{\partial U^\lambda} U_x^\lambda \delta(x - y) \end{aligned}$$

для некоторых функций $\gamma^{\nu\mu}(\mathbf{U})$.

Лиувиллева форма скобки Дубровина–Новикова называется также физической и соответствует случаю, когда интегралы от координат U^ν

$$I^\nu = \int_{-\infty}^{+\infty} U^\nu(x) dx$$

коммутируют друг с другом.

Другая важная форма скобки Дубровина–Новикова — диагональная форма. Она соответствует случаю, когда координаты U^ν являются ортогональными координатами для метрики $g_{\nu\mu}(\mathbf{U})$, и, соответственно, тензор $g^{\nu\mu}(\mathbf{U})$ в определении (2.3) имеет диагональную форму. Такая форма скобки Дубровина–Новикова тесно связана с теорией интегрируемых систем гидродинамического типа.

Новиковым была высказана гипотеза, что все системы гидродинамического типа, приводимые к форме (2.2) и являющиеся гамильтоновыми по отношению к какой-либо скобке (2.3), являются интегрируемыми. Эта гипотеза была доказана Царевым в работе [20], где был предложен метод интегрирования таких систем (обобщенный метод годографа).

Построение решений системы (2.2) методом Царева состоит в нахождении коммутирующих с ней систем (коммутирующих потоков), имеющих такой же вид, характеристические скорости $w^\nu(\mathbf{R})$ которых удовлетворяют при этом системе уравнений

$$\frac{\partial_\mu w^\nu}{w^\mu - w^\nu} = \frac{\partial_\mu v^\nu}{v^\mu - v^\nu}, \quad \mu \neq \nu \quad (2.6)$$

($\partial_\mu \equiv \partial/\partial R^\mu$).

Каждое из решений $\mathbf{w}(\mathbf{R}) = (w^1(\mathbf{R}), \dots, w^N(\mathbf{R}))$ системы (2.6) порождает решение $\mathbf{R}(x, t)$ системы (2.2), определяемое из алгебраической системы

$$w^\nu(\mathbf{R}) = t v^\nu(\mathbf{R}) + x, \quad \nu = 1, \dots, N.$$

Система (2.6) для функции $w^\nu(\mathbf{R})$ представляет собой переопределенную систему линейных уравнений с переменными коэффициентами, условия совместности которой имеют вид

$$\begin{aligned} \partial_\lambda \left(\frac{\partial_\mu v^\nu}{v^\mu - v^\nu} \right) &= \partial_\mu \left(\frac{\partial_\lambda v^\nu}{v^\lambda - v^\nu} \right), \quad (2.7) \\ \nu &\neq \mu, \quad \mu \neq \lambda, \quad \lambda \neq \nu. \end{aligned}$$

Как можно показать (см. [20, 21]), выполнение условий (2.7) обеспечивает в случае общего положения полноту решений системы (2.6), достаточную для (локального) решения общей задачи Коши соответствующей системы (2.2).

Как было показано в работе [20], условие гамильтоновости системы (2.2) по отношению к любой скобке Дубровина–Новикова влечет за собой соотношения (2.7) и, таким образом, позволяет проинтегрировать эту систему методом Царева. В действительности, множество диагональных систем, удовлетворяющих условию (2.7), заметно шире, чем совокупность таких же систем, гамильтоновых по отношению к локальной скобке Пуассона, поэтому

все диагональные системы, удовлетворяющие условиям (2.7), были названы Царевым полугамильтоновыми. Как оказалось позднее, в класс полугамильтоновых систем попадают также системы, являющиеся гамильтоновыми по отношению к обобщениям скобки Дубровина–Новикова — слабонелокальной скобке Мохова–Ферапонтова и скобке Ферапонтова. Дадим здесь соответствующие определения:

Скобкой Мохова–Ферапонтова [22] на пространстве полей $\mathbf{U}(x)$ называется скобка, представляемая в виде

$$\{U^\nu(x), U^\mu(x)\} = g^{\nu\mu}(\mathbf{U}) \delta'(x - y) + b_\lambda^{\nu\mu}(\mathbf{U}) U_x^\lambda \delta(x - y) + \frac{1}{2} c U_x^\nu \operatorname{sgn}(x - y) U_y^\mu. \quad (2.8)$$

Общей скобкой Ферапонтова [23–26] на пространстве полей $\mathbf{U}(x)$ называется скобка вида

$$\begin{aligned} \{U^\nu(x), U^\mu(y)\} &= \\ &= g^{\nu\mu}(\mathbf{U}) \delta'(x - y) + b_\lambda^{\nu\mu}(\mathbf{U}) U_x^\lambda \delta(x - y) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k=1}^g e_k w_{(k)\lambda}^\nu(\mathbf{U}) U_x^\lambda \operatorname{sgn}(x - y) \times \\ &\times w_{(k)\delta}^\mu(\mathbf{U}) U_y^\delta, \quad e_k = \pm 1. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Аналогично сформулированным ранее условиям для функций $g^{\nu\mu}(\mathbf{U})$ и $b_\lambda^{\nu\mu}(\mathbf{U})$ для скобки Дубровина–Новикова, можно сформулировать условия для коэффициентов в выражениях (2.8) и (2.9), при выполнении которых соответствующие выражения определяют скобки Пуассона на пространстве полей $\mathbf{U}(x)$. Именно, выражение (2.8) с невырожденным тензором $g^{\nu\mu}(\mathbf{U})$ определяет скобку Пуассона на пространстве полей $\mathbf{U}(x)$ в том и только том случае, если [22]:

1) Тензор $g^{\nu\mu}(\mathbf{U})$ определяет симметричную псевдориманову метрику постоянной кривизны c (с верхними индексами) на пространстве параметров (U^1, \dots, U^N) ;

2) Величины

$$\Gamma_{\mu\gamma}^\nu = -g_{\mu\lambda} b_\gamma^{\lambda\nu}$$

являются символами Кристоффеля для соответствующей метрики $g_{\nu\mu}(\mathbf{U})$.

Выражение (2.9) с невырожденным тензором $g^{\nu\mu}(\mathbf{U})$ определяет скобку Пуассона на пространстве полей $\mathbf{U}(x)$ в том и только том случае, если [23]:

1) Тензор $g^{\nu\mu}(\mathbf{U})$ определяет симметричную псевдориманову метрику с верхними индексами на пространстве параметров (U^1, \dots, U^N) ;

2) Величины

$$\Gamma_{\mu\gamma}^\nu = -g_{\mu\lambda} b_\gamma^{\lambda\nu}$$

являются символами Кристоффеля для соответствующей метрики $g_{\nu\mu}(\mathbf{U})$;

3) Аффиноры $w_{(k)\lambda}^\nu(\mathbf{U})$ и тензор кривизны метрики $R_{\mu\lambda}^{\nu\tau}(\mathbf{U})$ удовлетворяют условиям

$$g_{\nu\tau} w_{(k)\mu}^\tau = g_{\mu\tau} w_{(k)\nu}^\tau, \quad \nabla_\nu w_{(k)\lambda}^\mu = \nabla_\lambda w_{(k)\nu}^\mu, \quad (2.10)$$

$$R_{\mu\lambda}^{\nu\tau} = \sum_{k=1}^g e_k \left(w_{(k)\mu}^\nu w_{(k)\lambda}^\tau - w_{(k)\mu}^\tau w_{(k)\lambda}^\nu \right), \quad (2.11)$$

$$[w_k, w_{k'}] = 0$$

(коммутативность).

Ферапонтовым было указано также, что соотношения (2.10), (2.11) являются соотношениями Гаусса–Кодацци для подмногообразия M^N с плоской нормальной связностью в псевдоевклидовом пространстве E^{N+g} . При этом тензор $g_{\nu\mu}$ играет роль первой квадратичной формы M^N , а $w_{(k)}$ — роль операторов Вейнгартена, соответствующих «параллельным» полям единичных нормалей \mathbf{n}_k [23–26]. Кроме того, Ферапонтовым было показано, что скобка (2.9) получается как результат ограничения по Дираку скобки Дубровина–Новикова, определенной в пространстве E^{N+g} для подмногообразия M^N [24].

Каноническая форма скобки Мохова–Ферапонтова, записанная в плотностях аннуляторов, а также выражение для функционала импульса этой скобки были предложены в работе [27].

Канонические формы (а также канонические функционалы) общих слабонелокальных скобок Ферапонтова были исследованы в работе [28]. По определению, скобка (2.9) имеет в переменных $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathbf{U})$ каноническую форму, если выполняются соотношения

$$\begin{aligned} \{n^\nu(x), n^\mu(y)\} &= \\ &= \left(\epsilon^\nu \delta^{\nu\mu} - \sum_{k=0}^g e_k f_{(k)}^\nu(\mathbf{n}) f_{(k)}^\mu(\mathbf{n}) \right) \delta'(x - y) - \\ &- \sum_{k=0}^g e_k \left(f_{(k)}^\nu(\mathbf{n}) \right)_x f_{(k)}^\mu(\mathbf{n}) \delta(x - y) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k=0}^g e_k \left(f_{(k)}^\nu(\mathbf{n}) \right)_x \operatorname{sgn}(x - y) \left(f_{(k)}^\mu(\mathbf{n}) \right)_y \end{aligned}$$

($\epsilon^\nu = \pm 1$) для некоторых функций $f_{(k)}^\nu(\mathbf{n})$, таких что $f_{(k)}^\nu(0, \dots, 0) = 0$.

Здесь можно отметить, что каноническая форма скобки Ферапонтова в общем случае определена неоднозначно. Наиболее естественно связывать каноническую форму скобки (2.9) с какой-либо фиксированной точкой \mathbf{U}_0 на многообразии параметров \mathbf{U} . С точкой \mathbf{U}_0 естественно при этом связать пространство «петель», начинающихся и заканчивающихся в точке \mathbf{U}_0 , т. е. пространство $\mathcal{L}_{\mathbf{U}_0}$ отображений

$$\mathbb{R} \rightarrow \{\mathbf{U}\},$$

таких что

$$\mathbf{U}(x) \rightarrow \mathbf{U}_0, \quad x \rightarrow \pm\infty.$$

С геометрической точки зрения, построение канонических координат, отвечающих точке \mathbf{U}_0 , связано с упомянутым выше вложением многообразия параметров \mathcal{M}^N в псевдоевклидово пространство E^{N+g} , определяемое скобкой (2.9). А именно, рассмотрим соответствующее вложение

$$\mathcal{M}^N \rightarrow E^{N+g}$$

и выберем (псевдо)евклидову систему координат в E^{N+g} с началом в точке $\mathbf{U}_0 \in \mathcal{M}^N \subset E^{N+g}$ так, чтобы первые N координат касались подмногообразия \mathcal{M}^N в точке \mathbf{U}_0 , а оставшиеся g были ортогональны \mathcal{M}^N в этой точке. Ограничение первых N координат в E^{N+g} на \mathcal{M}^N и задают в этом случае набор канонических координат $n^\nu(\mathbf{U})$, отвечающих точке \mathbf{U}_0 . Ограничение оставшихся g координат на подмногообразии \mathcal{M}^N задает еще g дополнительных функций $h^k(\mathbf{U})$, также играющих важную роль.

Значения (вектор)функций $\mathbf{f}_{(k)}(\mathbf{n})$ в приведенной выше канонической форме совпадают со значениями проекций базисных параллельных полей нормалей к \mathcal{M}^N в пространстве E^{N+g} на плоскость, касательную к \mathcal{M}^N в точке \mathbf{U}_0 . В частности, для скобки Мохова – Ферапонтова, соответствующей случаю (псевдо)сферы в E^{N+1} , мы имеем $f^\nu = \sqrt{|c|} n^\nu$.

Как можно показать (см. [28]), соответствующие функционалы

$$N^\nu = \int_{-\infty}^{+\infty} n^\nu(x) dx$$

задают аннуляторы скобки (2.9) на пространстве $\mathcal{L}_{\mathbf{U}_0}$. Функционалы

$$H^k = \int_{-\infty}^{+\infty} h^k(x) dx$$

являются при этом гамильтонианами, порождающими потоки

$$U_t^\nu = w_{(k)\mu}^\nu(\mathbf{U}) U_x^\mu$$

на пространстве $\mathcal{L}_{\mathbf{U}_0}$ в силу скобки (2.9).

Любая скобка (2.9) с невырожденным тензором $g^{\nu\mu}(\mathbf{U})$ имеет также локальный функционал импульса P на пространствах $\mathcal{L}_{\mathbf{U}_0}$, имеющий форму

$$P = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_{\nu=1}^N \epsilon^\nu n^\nu n^\nu + \sum_{k=1}^g e_k h^k h^k \right) dx,$$

где функции $\mathbf{n}(\mathbf{U})$ и $\mathbf{h}(\mathbf{U})$ отвечают точке \mathbf{U}_0 [29].

В работе [28] была также предложена Лиувиллева (физическая) форма общих скобок Ферапонтова, имеющая вид

$$\begin{aligned} \{U^\nu(x), U^\mu(y)\} = & \left(\gamma^{\nu\mu} + \gamma^{\mu\nu} - \sum_{k=1}^g e_k f_{(k)}^\nu f_{(k)}^\mu \right) \delta'(x-y) + \\ & + \left(\frac{\partial \gamma^{\nu\mu}}{\partial U^\lambda} U_x^\lambda - \sum_{k=1}^g e_k (f_{(k)}^\nu)_x f_{(k)}^\mu \right) \delta(x-y) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^g e_k (f_{(k)}^\nu)_x \operatorname{sgn}(x-y) (f_{(k)}^\mu)_y \end{aligned}$$

с некоторыми функциями $\gamma^{\nu\mu}(\mathbf{U})$ и $f_{(k)}^\nu(\mathbf{U})$.

Скобка (2.9) имеет физическую форму в координатах U^μ в том и только том случае, если интегралы

$$J^\nu = \int_{-\infty}^{+\infty} U^\nu(x) dx$$

порождают набор локальных коммутирующих потоков в силу скобки (2.9).

Скобка Ферапонтова (2.9) представляет собой наиболее общий вид (одномерной) слабонелокальной скобки гидродинамического типа. С другой стороны, скобки Ферапонтова, как правило, связаны лишь с интегрируемыми системами гидродинамического типа, поскольку содержат интегрируемые структуры внутри себя. Согласно гипотезе Ферапонтова [26], все диагонализующие полугамильтоновы системы являются гамильтоновыми по отношению к скобкам (2.9), если допустить наличие бесконечного числа членов в их нелокальной части. Эта гипотеза была, в частности, подтверждена в работе [30] для довольно широкого класса полугамильтоновых систем. Данная гипотеза рассматривалась также в работах [31, 32]. Надо сказать, однако, что в общей формулировке строгое доказательство этой гипотезы пока не получено.

В то же время, скобки (2.3) и (2.8) связаны со значительно более широким классом систем, не предполагающих интегрируемости, и являются, в этом смысле, более распространенными в реальных приложениях.

Как в случае скобки Дубровина – Новикова, так и в случае слабонелокальных скобок Мохова – Ферапонтова и Ферапонтова, диагональная форма метрики $g_{\nu\mu}$ является наиболее тесно связанной с теорией интегрирования систем (2.1). При этом проблема диагональных координат для плоских метрик, являлась, как известно, классической проблемой дифференциальной геометрии на протяжении многих лет. Нельзя не сказать здесь, что в последнее время в решении этой проблемы получены новые весьма важные достижения [33, 34], связанные с методом обратной задачи рассеяния. При этом можно отметить, что теория скобок Пуассона также послужила стимулирующим фактором при рассмотрении этой классической задачи.

Надо сказать, однако, что диагональная форма скобок Пуассона не является, конечно, единственно важной при рассмотрении вопросов интегрируемости систем гидродинамического типа. Так, например, канонические координаты скобок играют наиболее важную роль при рассмотрении бигамильтоновых структур (см. [35]), имеющих у подавляющего большинства интегрируемых иерархий. Напомним здесь, что основу бигамильтоновой структуры составляет пара согласованных скобок Пуассона, $\{\dots, \dots\}_1$ и $\{\dots, \dots\}_2$, т. е. скобок, любая линейная комбинация которых

$$\{\dots, \dots\}_1 + \lambda \{\dots, \dots\}_2 \quad (2.12)$$

также определяет скобку Пуассона. Построение бигамильтоновых иерархий, как правило, начинается при этом с аннуляторов или некоторых канонических функционалов, связанных с одной из гамильтоновых структур и играющих роль «родоначальников» соответствующих иерархий. Как мы видели выше, в случае скобок гидродинамического типа такие функционалы связаны именно с каноническими координатами скобки. Можно добавить, что канонические координаты $n^\nu(\lambda)$ для всего пучка (2.12) являются производящими функциями для всех плотностей гамильтонианов рассматриваемой иерархии, производящих высшие потоки.

Нельзя не упомянуть здесь о важной роли согласованных локальных гамильтоновых структур для квантовой теории поля, открытой Дубровиным в 1990-х. Как было показано Дубровиным, специальные пары согласованных скобок Дубровина – Новикова дают классификацию топологических теорий поля, возникающих в качестве приближений в различных теоретико-полевых моделях. Так, пара согласованных скобок Дубровина – Новикова лежит в основе определения фробениусовых многооб-

разий [36, 37], параметризующих решения уравнения ВДВВ, описывающие топологические теории. Более того, дальнейшим развитием теории фробениусовых многообразий стала теория «слабодисперсионных» деформаций таких гамильтоновых структур, дающих поправки к топологическим теориям [38, 39].

Кроме того, во множестве примеров важнейшую роль играют координаты, в которых скобка Пуассона становится линейной по полям, где явно проявляются ли-алгебраические аспекты рассматриваемой задачи.

Еще одним важным обобщением локальных скобок гидродинамического типа являются неоднородные скобки Пуассона, имеющие в общем случае вид

$$\{U^\nu(\mathbf{x}), U^\mu(\mathbf{y})\} = g^{\nu\mu i}(\mathbf{U}(\mathbf{x})) \delta_{x^i}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \left[b_\lambda^{\nu\mu i}(\mathbf{U}(\mathbf{x})) U_{x^i}^\lambda + h^{\nu\mu}(\mathbf{U}) \right] \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (2.13)$$

Скобки (2.13) представляют собой в действительности пары согласованных скобок, поскольку как ее гидродинамическая часть (т. е. (1.1)), так и конечномерная часть $h^{\nu\mu}(\mathbf{U}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ определяют самостоятельные скобки Пуассона на пространстве полей $\mathbf{U}(\mathbf{x})$, согласованные между собой. Можно видеть, кроме того, что тензор $h^{\nu\mu}(\mathbf{U})$ должен определять простую конечномерную скобку на пространстве с координатами \mathbf{U} .

Скобки (2.13), как нетрудно видеть, связаны прежде всего с неоднородными системами гидродинамического типа:

$$U_t^\nu = V_\mu^{\nu i}(\mathbf{U}) U_{x^i}^\mu + f^\nu(\mathbf{U})$$

на пространстве полей $\mathbf{U}(\mathbf{x})$.

Теория скобок (2.13) также в значительной мере нетривиальна и содержит множество интересных геометрических и алгебраических структур. Так, в частности, для одномерных скобок Пуассона

$$\{U^\nu(x), U^\mu(y)\} = g^{\nu\mu}(U(x)) \delta'(x - y) + \left[b_\lambda^{\nu\mu}(U) U_x^\lambda + h^{\nu\mu}(U) \right] \delta(x - y) \quad (2.14)$$

верно следующее утверждение [40]:

Если метрика $g^{\nu\mu}(\mathbf{U})$ невырождена, то преобразованием координат $\mathbf{U} = \mathbf{U}(\mathbf{n})$ скобка (2.14) приводится к виду

$$\{n^\nu(x), n^\mu(y)\} = \eta^{\nu\mu} \delta'(x - y) + \left[c_\lambda^{\nu\mu} n^\lambda + d^{\nu\mu} \right] \delta(x - y),$$

где коэффициенты $\eta^{\nu\mu}$, $c_\lambda^{\nu\mu}$, $d^{\nu\mu}$ постоянны, $c_\lambda^{\nu\mu}$ представляют собой структурные константы полупростой алгебры Ли с метрикой Киллинга $\eta^{\nu\mu}$, а

$d^{\nu\mu} = -d^{\mu\nu}$ — произвольный коцикл на этой алгебре.

В качестве важного примера системы, связанной со скобкой (2.14), можно привести задачу n -волн

$$M_t - \varphi(M_x) = [M, \varphi(M)], \quad (2.15)$$

где $M = (M_{ij}) - (n \times n)$ — матрица с нулевым следом (возможно, с дополнительными симметриями), $\varphi(M) = (\lambda_{ij} M_{ij})$, являющаяся гамильтоновой по отношению к скобке вида (2.14) с $d^{\nu\mu} = 0$, с квадратичным гамильтонианом.

Как хорошо известно (см. [41]), система (2.15) интегрируема методом обратной задачи рассеяния при $\lambda_{ij} = (a_i - a_j)/(b_i - b_j)$.

Заметим здесь также, что гамильтоновы структуры (2.14) имеют и дальнейшие обобщения. Так, в частности, в работе [42] были рассмотрены неоднородные скобки Пуассона, отвечающие метрикам постоянной кривизны (скобкам Мохова–Фералонтова).

В заключение данного раздела, можно отметить, что скобки (2.3), а также (2.8), (2.9), (2.14) представляют выделенные классы более общих локальных одномерных теоретико-полевых скобок

$$\{\varphi^i(x), \varphi^j(y)\} = \sum_{k \geq 0} B_{(k)}^{ij}(\varphi, \varphi_x, \dots) \delta^{(k)}(x - y) \quad (2.16)$$

и слабонелокальных скобок

$$\begin{aligned} \{\varphi^i(x), \varphi^j(y)\} = & \sum_{k \geq 0} B_{(k)}^{ij}(\varphi, \varphi_x, \dots) \delta^{(k)}(x - y) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{k,s=1}^g \kappa_{ks} S_{(k)}^i(\varphi, \varphi_x, \dots) \operatorname{sgn}(x - y) \times \\ & \times S_{(s)}^j(\varphi, \varphi_y, \dots), \quad (2.17) \end{aligned}$$

где κ_{ks} — некоторая произвольная (постоянная) квадратичная форма, $i = 1, \dots, n$, $\varphi(x) = (\varphi^1(x), \dots, \varphi^n(x))$.

Как и в случае скобок гидродинамического типа, скобки (2.16) могут быть связаны с весьма широким многообразием систем эволюционного типа, в то время как скобки (2.17) возникают, как правило, при изучении интегрируемых иерархий (см. [28, 43]).

3. ГАМИЛЬТОНОВЫ СТРУКТУРЫ И ТЕОРИЯ МЕДЛЕННЫХ МОДУЛЯЦИЙ

Развитие теории интегрирования одномерных систем гидродинамического типа в действительности происходило в тесной связи с развитием теории

медленных модуляций (метода Уизема) многофазных решений интегрируемых иерархий. Как впервые было показано Уиземом [44], усредненные уравнения, описывающие эволюцию медленно модулированных параметров однофазных решений уравнения КдФ представляют собой систему гидродинамического типа, приводимую к диагональной форме. Как было затем показано в работе [45], это замечательное свойство присуще также и уравнениям медленных модуляций (уравнениям Уизема) для многофазных решений КдФ. Можно здесь сразу отметить, что построение многофазных решений для интегрируемых иерархий тесно связано с методами алгебраической геометрии в теории обратной задачи рассеяния (см. [46–52]). Как следствие этого, методы теории медленных модуляций для интегрируемых систем также связаны самым тесным образом с алгебро-геометрическими конструкциями. В частности, именно методы алгебраической геометрии позволили установить диагонализуемость уравнений Уизема для многофазных решений КдФ в работе [45]. Будучи универсальным подходом в теории интегрируемых систем, методы алгебраической геометрии позволяют в действительности установить также аналогичный факт для большинства иерархий, интегрируемых методом обратной задачи рассеяния. Таким образом, системы уравнений медленных модуляций для интегрируемых иерархий представляют собой важнейший класс диагонализуемых систем гидродинамического типа.

Как мы уже сказали, для интегрирования диагональных систем гидродинамического типа, как правило, требуется их гамильтоновость. В ряде случаев гамильтоновость систем уравнений может быть связана с их лагранжевым формализмом, что, как правило, позволяет определить соответствующую гамильтонову структуру в канонической форме. Вместе с процедурой построения уравнений медленных модуляций Уиземом [44] была также предложена процедура усреднения локальных лагранжианов (в том числе и при наличии «псевдофаз») и получения локального лагранжева формализма для «усредненной системы». Надо сказать, однако, что локальные лагранжевы структуры имеются далеко не у всех интересных систем эволюционного типа

$$\varphi_t^i = Q^i(\varphi, \varphi_x, \dots), \quad (3.1)$$

и наиболее общим для таких систем является, как правило, наличие более общего гамильтонова формализма со скобкой Пуассона (2.16) (или (2.17)) и гамильтонианом

$$H = \int_{-\infty}^{+\infty} h(\varphi, \varphi_x, \dots) dx. \quad (3.2)$$

Для построения гамильтоновых структур уравнений медленных модуляций в общем случае Дубровина и Новикова [16, 18] была предложена процедура «усреднения» локальных скобок Пуассона (2.16), дающая скобку вида (2.3) для системы Уизема. Дадим здесь краткое описание этой процедуры.

В методе Уизема мы предполагаем, что система (3.1) имеет конечно-параметрическое семейство квазипериодических решений

$$\varphi^i(x, t) = \Phi^i(\mathbf{k}(\mathbf{U})x + \boldsymbol{\omega}(\mathbf{U})t + \boldsymbol{\theta}_0, \mathbf{U}), \quad (3.3)$$

где $\boldsymbol{\theta} = (\theta^1, \dots, \theta^m)$, $\mathbf{k}(\mathbf{U}) = (k^1(\mathbf{U}), \dots, k^m(\mathbf{U}))$, $\boldsymbol{\omega}(\mathbf{U}) = (\omega^1(\mathbf{U}), \dots, \omega^m(\mathbf{U}))$ и $\Phi^i(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{U})$ задают семейство 2π -периодических по всем θ^α функций, зависящих от дополнительных параметров $\mathbf{U} = (U^1, \dots, U^N)$.

В методе Уизема мы производим растяжение $X = \epsilon x$, $T = \epsilon t$ ($\epsilon \rightarrow 0$) обеих координат x и t и считаем параметры \mathbf{U} функциями «медленных» координат X и T .

Метод Дубровина и Новикова основывается на существовании N (равного числу параметров U^ν семейства m -фазных решений (3.1)) локальных интегралов

$$I^\nu = \int \mathcal{P}^\nu(\varphi, \varphi_x, \dots) dx,$$

коммутирующих с гамильтонианом и друг с другом:

$$\{I^\nu, H\} = 0, \quad \{I^\nu, I^\mu\} = 0, \quad (3.4)$$

и может быть описан ниже следующим образом.

Вычислим попарные скобки Пуассона плотностей \mathcal{P}^ν , имеющие форму

$$\{\mathcal{P}^\nu(x), \mathcal{P}^\mu(y)\} = \sum_{k \geq 0} A_k^{\nu\mu}(\varphi, \varphi_x, \dots) \delta^{(k)}(x - y),$$

где

$$A_0^{\nu\mu}(\varphi, \varphi_x, \dots) \equiv \partial_x Q^{\nu\mu}(\varphi, \varphi_x, \dots)$$

согласно (3.4). Соответствующая скобка Дубровина–Новикова на пространстве функций $U(X)$ имеет вид

$$\{U^\nu(X), U^\mu(Y)\} = \langle A_1^{\nu\mu} \rangle(U) \delta'(X - Y) + \frac{\partial \langle Q^{\nu\mu} \rangle}{\partial U^\lambda} U_X^\lambda \delta(X - Y), \quad (3.5)$$

где $\langle \dots \rangle$ означает усреднение на семействе m -фазных решений (3.1), задаваемое формулой

$$\langle F \rangle = \frac{1}{(2\pi)^m} \int_0^{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} F(\Phi, k^\alpha(U)\Phi_{\theta^\alpha}, \dots) d^m \theta.$$

При этом мы выбираем параметры U^ν в виде $U^\nu = \langle P^\nu \rangle$ на соответствующих решениях рассматриваемого нами семейства.

Можно видеть, что метод Дубровина и Новикова в описанной форме связан с консервативной формой системы уравнений медленных модуляций, а именно с формой

$$U_T^\nu = \langle Q^\nu \rangle_X, \quad \nu = 1, \dots, N, \quad (3.6)$$

где

$$\mathcal{P}_t^\nu \equiv \frac{\partial}{\partial x} Q^\nu(\varphi, \varphi_x, \dots)$$

в силу системы (3.1). Можно показать также, что скобка (3.5) имеет в общем случае лиувиллеву форму. Интегралы от координат $U^\nu(X)$ дают в рассматриваемом случае набор N коммутирующих интегралов системы (3.6), а плотностью гамильтониана для системы (3.6) является усредненная плотность гамильтониана исходной системы $\langle h \rangle(X)$.

Здесь можно также отметить, что все интегралы I^μ порождают коммутирующие потоки к системе (3.1) в силу соответствующей скобки (2.16), так что можно, наряду со временем t , рассматривать также зависимость всех решений от дополнительных времен t^μ ($\mu = 1, \dots, N$). При этом также верны соотношения

$$\mathcal{P}_{t^\mu}^\nu \equiv \frac{\partial}{\partial x} Q^{\nu\mu}(\varphi, \varphi_x, \dots)$$

для некоторых функций $Q^{\nu\mu}(\varphi, \varphi_x, \dots)$, а соответствующее семейство решений (3.3) представляет также семейство m -фазных решений для коммутирующих потоков с некоторыми другими значениями величин

$$\boldsymbol{\omega}^\mu(\mathbf{U}) = (\omega^{1\mu}(\mathbf{U}), \dots, \omega^{m\mu}(\mathbf{U})).$$

Системы Уизема для коммутирующих потоков

$$U_{T^\mu}^\nu = \langle Q^{\nu\mu} \rangle_X$$

представляют при этом коммутирующие потоки для системы (3.6) и являются гамильтоновыми по отношению к скобке (3.5) с гамильтонианами

$$H^\mu = \int_{-\infty}^{+\infty} U^\mu(X) dX.$$

В общем случае обоснование метода Дубровина–Новикова требует определенных условий полноты и регулярности соответствующего семейства m -фазных решений (3.1) [53].

Отметим здесь, что процедура Дубровина – Новикова допускает также обобщение на случай слабо-нелокальных гамильтоновых структур, позволяющее получать скобки (2.9) для системы Уизема путем усреднения скобок (2.17) для исходной системы [54]. В целом, эта процедура является довольно удобной как для случая интегрируемых иерархий, так и в более общей ситуации.

Запись усредненных скобок Пуассона в диагональной форме для интегрируемых иерархий, так же как и запись в этой форме соответствующих систем Уизема, связана с алгебро-геометрическими методами обратной задачи рассеяния [18, 21, 55, 56]. Более детально, как и в случае диагонализации самих систем Уизема, диагональные координаты для усредненных скобок Пуассона для таких иерархий связаны с точками ветвления римановых поверхностей, определяющих соответствующие m -фазные решения исходной системы. Как уже было отмечено выше, диагональная форма таких скобок наиболее тесно связана с процедурой интегрирования соответствующих систем гидродинамического типа. Можно отметить также, что и построение наиболее интересных решений усредненных уравнений также опирается на алгебро-геометрические методы (см., например, [57–68]).

Остановимся здесь также на канонических формах усредненных скобок.

Одной из особенностей канонической формы усредненных скобок Пуассона [44, 53, 69, 70] является то, что все величины $k^\alpha(X)$ являются частью канонических координат усредненной скобки и, таким образом, представляют часть плоских координат для соответствующей метрики $g^{\nu\mu}(\mathbf{U})$, удовлетворяющих соотношениям

$$\{k^\alpha(X), k^\beta(Y)\} = 0. \quad (3.7)$$

Кроме того, можно показать, что скобки Пуассона $k^\alpha(X)$ с плотностями $U^\nu(Y)$ могут быть записаны в виде

$$\{k^\alpha(X), U^\nu(Y)\} = \left(\omega^{\alpha\nu}(X) \delta(X - Y) \right)_X. \quad (3.8)$$

Как было показано в работе [71], соотношения (3.7), (3.8) позволяют также модифицировать процедуру Дубровина – Новикова, уменьшив требуемое количество коммутирующих интегралов исходной системы до $N - m$ и представляя усредненную скоб-

ку в координатах $(k^1, \dots, k^m, U^1, \dots, U^{N-m})$ в форме (3.7), (3.8) и

$$\begin{aligned} \{U^\nu(X), U^\mu(Y)\} &= \langle A_1^{\nu\mu} \rangle(U) \delta'(X - Y) + \\ &+ \frac{\partial \langle Q^{\nu\mu} \rangle}{\partial U^\lambda} U_X^\lambda \delta(X - Y), \quad \nu, \mu = 1, \dots, N - m. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Представление усредненной скобки в виде (3.7)–(3.9) связано в действительности еще с одним важным (эквивалентным) представлением системы уравнений медленных модуляций, разделяющим уравнения эволюции фаз

$$S_T^\alpha = \omega^\alpha(\mathbf{S}_X, \mathbf{U})$$

($S_X^\alpha \equiv k^\alpha$) и уравнения переноса, которые могут быть записаны в виде баланса части законов сохранения

$$U_T^\nu = \langle Q^\nu \rangle_X, \quad \nu = 1, \dots, N - m.$$

Представление скобки в виде (3.7)–(3.9) можно также назвать смешанным представлением усредненной скобки, в котором частично используются канонические и частично — лиувиллевы переменные. В одномерном случае, как уже было сказано, скобка может быть полностью приведена к постоянному виду, при этом можно подобрать переменные $\mathbf{J} = (J_1, \dots, J_m)$, $\mathbf{n} = (n^1, \dots, n^{N-2m})$, такие что

$$\{k^\alpha(X), J_\beta(Y)\} = \delta_\beta^\alpha \delta'(X - Y),$$

$$\{n^q(X), n^p(Y)\} = \epsilon^q \delta^{qp} \delta'(X - Y)$$

(остальные скобки равны нулю).

Соотношения

$$\{S^\alpha(X), J_\beta(Y)\} = \delta_\beta^\alpha \delta(X - Y),$$

$$\{n^q(X), n^p(Y)\} = \epsilon^q \delta^{qp} \delta'(X - Y),$$

приближаясь к обычной терминологии в теории скобок Пуассона, можно было бы назвать также псевдоканонической формой скобок гидродинамического типа.

Как было отмечено в [71], использование модифицированной процедуры Дубровина – Новикова и представление усредненной скобки в виде (3.7)–(3.9) является особенно удобным в случае нескольких пространственных переменных. В следующем разделе мы более подробно обсудим «многомерные» скобки Пуассона.

4. МНОГОМЕРНЫЕ СКОБКИ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ТИПА И ИХ ОБОБЩЕНИЯ

Мы перейдем теперь к более общим многомерным скобкам вида (1.1)

$$\{U^\nu(\mathbf{x}), U^\mu(\mathbf{y})\} = g^{\nu\mu i}(\mathbf{U}(\mathbf{x})) \delta_{x^i}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) + b_\lambda^{\nu\mu i}(\mathbf{U}(\mathbf{x})) U_{x^i}^\lambda \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}),$$

наиболее полная теория которых была построена в работах [40, 72, 73].

Мы рассмотрим случай невырожденных скобок (1.1), а именно, потребуем, чтобы все тензоры $g^{\nu\mu i}(\mathbf{U})$ были невырожденными:

$$\det g^{\nu\mu i}(\mathbf{U}) \neq 0, \quad i = 1, \dots, n.$$

Как и в одномерном случае, здесь также можно утверждать, что все тензоры $g^{\nu\mu i}(\mathbf{U})$ представляют собой плоские метрики на пространстве параметров \mathbf{U} , в то время как величины

$$\Gamma_{\mu\lambda i}^\nu = -g_{\mu\sigma i} b_\lambda^{\sigma\nu i}$$

задают соответствующие символы Кристоффеля. В общем случае, для определения корректной скобки Пуассона коэффициенты $g^{\nu\mu i}(\mathbf{U})$ и $b_\lambda^{\nu\mu i}(\mathbf{U})$ должны удовлетворять целому ряду нетривиальных соотношений [40, 73], в частности, все выражения

$$\{U^\nu(x), U^\mu(y)\}^{(i)} = g^{\nu\mu i}(\mathbf{U}(x)) \delta'(x - y) + b_\lambda^{\nu\mu i}(\mathbf{U}(x)) U_x^\lambda \delta(x - y)$$

определяют в этом случае одномерные скобки Пуассона, согласованные друг с другом.

По аналогии с одномерным случаем можно определить каноническую форму невырожденной скобки Пуассона (1.1) как скобку постоянного вида:

$$\{n^\nu(\mathbf{x}), n^\mu(\mathbf{y})\} = \eta^{\nu\mu i} \delta_{x^i}(\mathbf{x} - \mathbf{y}),$$

где все $\eta^{\nu\mu i} = \text{const}$.

Как нетрудно видеть, все функционалы

$$N^\nu = \int n^\nu(\mathbf{x}) d^n x$$

являются в этом случае аннуляторами скобки (1.1).

В отличие от одномерного случая, однако, невырожденности скобки (1.1) здесь оказывается в общем случае недостаточно для возможности ее приведения к каноническому виду с помощью некоторой точечной замены координат, и требуется наложение еще некоторых дополнительных условий об-

щего положения. В частности (см. [73]), невырожденная скобка (1.1) может быть приведена к постоянному виду в некоторых координатах $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathbf{U})$, если хотя бы одна из метрик $g^{\nu\mu i_0}(\mathbf{U})$ образует неособые пары со всеми остальными метриками, т. е. корни любого из уравнений

$$\det (g^{\nu\mu i_0}(\mathbf{U}) - \lambda g^{\nu\mu i}(\mathbf{U})) = 0, \quad i \neq i_0$$

отличны друг от друга.

Приведенное выше условие является условием общего положения, тем не менее, оно часто нарушается в важных примерах. В частности, скобки Пуассона, отвечающие алгебрам Ли векторных полей в \mathbb{R}^n ($N = n$, $n \geq 2$):

$$\{p^i(\mathbf{x}), p^j(\mathbf{y})\} = p^i(\mathbf{x}) \delta_{x^j}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) - p^j(\mathbf{y}) \delta_{y^i}(\mathbf{y} - \mathbf{x})$$

и описывающие n -мерную гидродинамику, не могут быть приведены к постоянному виду. То же самое верно и в отношении ряда других важных примеров скобок гидродинамического типа.

Можно утверждать [40, 72, 73], что в общем случае любая невырожденная скобка (1.1) может быть приведена к линейной (неоднородной) форме

$$\{U^\nu(\mathbf{x}), U^\mu(\mathbf{y})\} = (b_\lambda^{\nu\mu i} + b_\lambda^{\mu\nu i}) U^\lambda + g_0^{\nu\mu i} \delta_{x^i}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) + b_\lambda^{\nu\mu i} U_{x^i}^\lambda \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (4.1)$$

$$b_\lambda^{\mu\nu i} = \text{const}, \quad g_0^{\nu\mu i} = \text{const}$$

с помощью точечной замены координат.

Можно видеть, что теория невырожденных скобок Пуассона в случае нескольких пространственных переменных связана в самом общем случае с теорией бесконечномерных алгебр Ли. Ряд важных классификационных результатов, относящихся к теории многомерных скобок (4.1) и соответствующим им ли-алгебраическим структурам, был получен в работе [72]. В целом, однако, полная задача классификации таких скобок пока окончательно не решена.

Надо сказать, что диагональная форма скобки Пуассона в случае многих пространственных переменных уже не играет той важной роли, какую она играет в одномерном случае. Как следует из результатов работы [73], в случае двух пространственных переменных обе метрики, $g^{\nu\mu 1}(\mathbf{U})$ и $g^{\nu\mu 2}(\mathbf{U})$, могут быть приведены к диагональному виду преобразованием координат, если они образуют неособую пару. В случае $n \geq 3$ одновременное приведение всех метрик $g^{\nu\mu i}(\mathbf{U})$ к диагональному виду, вообще говоря, невозможно.

Так же, как и в одномерном случае, для многомерных скобок (1.1) можно определить лиувиллеву форму, имеющую вид

$$\begin{aligned} \{U^\nu(\mathbf{x}), U^\mu(\mathbf{y})\} = & \\ = & \left(\gamma^{\nu\mu i}(\mathbf{U}) + \gamma^{\mu\nu i}(\mathbf{U}) \right) \delta_{x^i}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \\ & + \left(\gamma^{\nu\mu i}(\mathbf{U}) \right)_{x^i} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \end{aligned}$$

и соответствующую ситуации, когда все функционалы

$$I^\nu = \int U^\nu(\mathbf{x}) d^n x$$

коммутируют друг с другом.

В заключение, нам бы хотелось рассмотреть еще одно обобщение скобок гидродинамического типа, а именно, скобки, содержащие фазовые переменные

$$\{S^\alpha(\mathbf{x}), S^\beta(\mathbf{y})\} = 0,$$

$$\{S^\alpha(\mathbf{x}), U^\nu(\mathbf{y})\} = \omega^{\alpha\nu}(\mathbf{U}, \mathbf{S}_\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} \{U^\nu(\mathbf{x}), U^\mu(\mathbf{y})\} = & g^{\nu\mu i}(\mathbf{U}, \mathbf{S}_\mathbf{x}) \delta_{x^i}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \\ + & b_\lambda^{\nu\mu i}(\mathbf{U}, \mathbf{S}_\mathbf{x}) U_{x^i}^\lambda \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) + f_\alpha^{\nu\mu ij}(\mathbf{U}, \mathbf{S}_\mathbf{x}) S_{x^i x^j}^\alpha \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \end{aligned}$$

Как уже было указано выше, скобки такого типа возникают, например, при усреднении локальных гамильтоновых структур в многомерном случае. В действительности, такие скобки встречаются и во многих других случаях, где переменные $\mathbf{S}(\mathbf{x})$ могут иметь самый различный смысл (классические или квантовые фазы, фазы параметра порядка и т. п.). В частности, скобки такого вида неоднократно встречаются в работе [17]. К еще более общим скобкам подобного типа можно отнести также скобки, где фазовые переменные не коммутируют между собой, а отвечают некоторой ли-алгебраической структуре (см. [17]). Как было также отмечено выше, скобки описанного вида могут встречаться также и в «чистой» гидродинамике, например, при описании потенциальных течений. Довольно часто в качестве переменных $\mathbf{U}(\mathbf{x})$ выбираются плотности законов сохранения, а гидродинамическая часть скобки (4.2) имеет «лиувиллеву» форму.

Нас будет интересовать здесь общая структура скобок (4.2), и в частности, возможность приведения таких скобок к некоторым каноническим формам, близким к рассматривавшимся выше. С физической точки зрения, фазовые переменные $\mathbf{S}(\mathbf{x})$ являются выделенными, поэтому естественно в действительности рассматривать замены координат, сохраняющие неизменными переменные $\mathbf{S}(\mathbf{x})$ и преобразующие лишь оставшиеся координаты $\mathbf{U}(\mathbf{x})$. Надо

сказать при этом, что величины $S_\mathbf{x}^\alpha$ («сверхтекущие скорости») являются уже переменными гидродинамического типа и могут естественно использоваться при заменах «гидродинамических переменных»

$$U^\nu \rightarrow \tilde{U}^\nu(\mathbf{S}_\mathbf{x}, \mathbf{U}).$$

Мы здесь рассмотрим в некотором смысле невырожденный случай, когда матрица частот $\omega^{\alpha\nu}$ имеет полный ранг:

$$\text{rank} \|\omega^{\alpha\nu}(\mathbf{S}_\mathbf{x}, \mathbf{U})\| = m$$

($N - m \geq m$). Как можно показать [74], в этом случае всегда можно перейти к новым гидродинамическим переменным

$$\mathbf{U} \rightarrow (\mathbf{Q}(\mathbf{S}_\mathbf{x}, \mathbf{U}), \mathbf{N}(\mathbf{S}_\mathbf{x}, \mathbf{U})),$$

$$Q_\alpha(\mathbf{x}) = Q_\alpha(\mathbf{S}_{x^1}, \dots, \mathbf{S}_{x^d}, \mathbf{U}(\mathbf{x})), \quad \alpha = 1, \dots, m,$$

$$N^l(\mathbf{x}) = N^l(\mathbf{S}_{x^1}, \dots, \mathbf{S}_{x^d}, \mathbf{U}(\mathbf{x})), \quad l = 1, \dots, N - 2m,$$

в которых скобка (4.2) примет вид

$$\{S^\alpha(\mathbf{x}), S^\beta(\mathbf{y})\} = 0,$$

$$\{S^\alpha(\mathbf{x}), Q_\beta(\mathbf{y})\} = \delta_\beta^\alpha \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}),$$

$$\{S^\alpha(\mathbf{x}), N^l(\mathbf{y})\} = 0, \quad (4.3)$$

$$\{Q_\alpha(\mathbf{x}), Q_\beta(\mathbf{y})\} = J_{\alpha\beta}[\mathbf{S}_\mathbf{x}, \mathbf{N}](\mathbf{x}, \mathbf{y}),$$

$$\{Q_\alpha(\mathbf{x}), N^l(\mathbf{y})\} = J_\alpha^l[\mathbf{S}_\mathbf{x}, \mathbf{N}](\mathbf{x}, \mathbf{y}),$$

$$\{N^l(\mathbf{x}), N^q(\mathbf{y})\} = J^{lq}[\mathbf{S}_\mathbf{x}, \mathbf{N}](\mathbf{x}, \mathbf{y}).$$

Коммутаторы $J_{\alpha\beta}[\mathbf{S}_\mathbf{x}, \mathbf{N}](\mathbf{x}, \mathbf{y})$, $J_\alpha^l[\mathbf{S}_\mathbf{x}, \mathbf{N}](\mathbf{x}, \mathbf{y})$ и $J^{lq}[\mathbf{S}_\mathbf{x}, \mathbf{N}](\mathbf{x}, \mathbf{y})$ задаются при этом выражениями гидродинамического типа, аналогичными представленным в (4.2), здесь, однако, они зависят лишь от переменных $\mathbf{S}(\mathbf{x})$ и $\mathbf{N}(\mathbf{x})$. Нетрудно показать также, что величины $J^{lq}[\mathbf{S}_\mathbf{x}, \mathbf{N}](\mathbf{x}, \mathbf{y})$ определяют при этом скобку Пуассона на пространстве полей $\mathbf{N}(\mathbf{x})$ при любых фиксированных значениях $\mathbf{S}(\mathbf{x})$.

Как нетрудно видеть, переменные $Q_\alpha(\mathbf{x})$ и $N^l(\mathbf{x})$ определены с точностью до преобразований

$$Q_\alpha(\mathbf{x}) \rightarrow Q_\alpha(\mathbf{x}) + f_\alpha(\mathbf{S}_\mathbf{x}, \mathbf{N}(\mathbf{x})),$$

$$N^l(\mathbf{x}) \rightarrow N^l(\mathbf{S}_\mathbf{x}, \mathbf{N}(\mathbf{x})),$$

где

$$\det \left\| \frac{\partial N^l}{\partial N^k} \right\| \neq 0.$$

Довольно часто бывает интересна ситуация, когда переменные $N^l(\mathbf{x})$ не возникают ($N = 2m$), и скобка (4.2) приводится к виду

$$\{S^\alpha(\mathbf{x}), S^\beta(\mathbf{y})\} = 0,$$

$$\{S^\alpha(\mathbf{x}), Q_\beta(\mathbf{y})\} = \delta_\beta^\alpha \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (4.4)$$

$$\{Q_\alpha(\mathbf{x}), Q_\beta(\mathbf{y})\} = \Omega_{\alpha\beta}^i(\mathbf{S}_\mathbf{x}) \delta_{x^i}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \Gamma_{\alpha\beta\gamma}^{ij}(\mathbf{S}_\mathbf{x}) S_{x^i x^j}^\gamma \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$$

$$(\Gamma_{\alpha\beta\gamma}^{ij} \equiv \Gamma_{\alpha\beta\gamma}^{ji}).$$

Тождества Якоби

$$\{\{Q_\alpha(\mathbf{x}), Q_\beta(\mathbf{y})\}, Q_\gamma(\mathbf{z})\} + c.p. \equiv 0$$

дают теперь соотношения

$$\frac{\delta J_{\alpha\beta}[\mathbf{S}_\mathbf{x}](\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\delta S^\gamma(\mathbf{z})} + \frac{\delta J_{\beta\gamma}[\mathbf{S}_\mathbf{x}](\mathbf{y}, \mathbf{z})}{\delta S^\alpha(\mathbf{x})} + \frac{\delta J_{\gamma\alpha}[\mathbf{S}_\mathbf{x}](\mathbf{z}, \mathbf{x})}{\delta S^\beta(\mathbf{y})} \equiv 0$$

для функционалов $J_{\alpha\beta}[\mathbf{S}_\mathbf{x}](\mathbf{x}, \mathbf{y})$, означающих замкнутость 2-формы

$$\int J_{\alpha\beta}[\mathbf{S}_\mathbf{x}](\mathbf{x}, \mathbf{y}) \delta S^\alpha(\mathbf{x}) \wedge \delta S^\beta(\mathbf{y}) d^n x d^n y$$

на пространстве полей $(S^1(\mathbf{x}), \dots, S^m(\mathbf{x}))$.

Скобки (4.4) принадлежат к общему классу скобок, названных в [75] «вариационно допустимыми». Вариационно допустимая форма скобок Пуассона непосредственно связана с возможностью лагранжева описания соответствующих динамических систем и, как было показано в [75], такие скобки приводят в общем случае к нетривиальному лагранжеву представлению гамильтоновых систем, где функционал Лагранжа представляет собой 1-форму, обладающую нетривиальными топологическими свойствами.

В нашем случае надо помнить, что при приведении скобки (4.4) к каноническому виду мы ограничены лишь преобразованиями «гидродинамического типа», представленными выше. Как было показано в работе [74], любая скобка (4.4) может быть локально приведена к каноническому виду

$$\{S^\alpha(\mathbf{x}), S^\beta(\mathbf{y})\} = 0,$$

$$\{S^\alpha(\mathbf{x}), Q_\beta(\mathbf{y})\} = \delta_\beta^\alpha \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}),$$

$$\{Q_\alpha(\mathbf{x}), Q_\beta(\mathbf{y})\} = 0$$

с помощью преобразования

$$Q_\alpha(\mathbf{x}) \rightarrow Q_\alpha(\mathbf{x}) + f_\alpha(\mathbf{S}_\mathbf{x}).$$

Как следствие, в этом случае соответствующая гамильтонова система может быть записана также в лагранжевой форме с лагранжианом «гидродинамического типа»:

$$\delta \int [Q_\alpha(\mathbf{X}) S_t^\alpha - \langle P_H \rangle(\mathbf{S}_\mathbf{x}, \mathbf{Q}(\mathbf{X}))] d^n x dt = 0,$$

Что касается общих скобок (4.3), здесь также можно поставить вопрос о дальнейшем приведении их к канонической форме и, в частности, о разделении скобок для переменных $(\mathbf{S}(\mathbf{x}), \mathbf{U}(\mathbf{x}))$ и $\mathbf{N}(\mathbf{x})$. В действительности, такая возможность нередко возникает в конкретных примерах и, в частности, в теории медленных модуляций для многомерных систем. Можно показать, однако, что в самом общем случае приведение скобок (4.3) к такой канонической форме с помощью преобразования «гидродинамического типа» невозможно [74].

В завершение отметим, что скобки (4.2) часто имеют естественное продолжение и на расширенное фазовое пространство, в котором переменные $v_i^\alpha = S_{x^i}^\alpha$ могут считаться полностью независимыми. Продолжения такого типа до некоторой степени естественно называть «завихрениями» скобок (4.2). Такие продолжения естественно возникают не только, к примеру, в гидродинамике, при переходе от потенциальных течений к завихренным, но и, например, при описании движения сверхтекучих жидкостей, несущих квантовые вихревые структуры внутри своего объема, и др. Важные примеры таких «завихрений» скобок типа (4.2) приведены в работе [17].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлен краткий обзор скобок Пуассона гидродинамического типа и их специальных обобщений. Рассмотрены вопросы, связанные с различными формами таких скобок и, в частности, с представлениями, обобщающими канонические формы скобок Пуассона в рассматриваемой ситуации. Рассмотрена связь скобок гидродинамического типа с теорией алгебр Ли в случаях одной и нескольких пространственных переменных. Особенно подробно описана связь рассматриваемых структур с теорией интегрирования систем гидродинамического типа в одномерном случае.

Финансирование. Исследование С. П. Н. выполнено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-01-00157).

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, ЖЭТФ 11, 592 (1941).
2. Г. Ламб, *Гидродинамика*, ОГИЗ, Москва (1947).
3. P. J. Morrison and J. M. Greene, Phys. Rev. Lett. 45, 790 (1980).

4. Б. И. Давыдов, ДАН СССР **69**, 165 (1949).
5. И. М. Халатников, ЖЭТФ **23**, 169 (1952).
6. В. Л. Покровский, И. М. Халатников, Письма в ЖЭТФ **23**, 653 (1976).
7. В. В. Лебедев, И. М. Халатников, ЖЭТФ **73**, 1537 (1977).
8. I. M. Khalatnikov and V. V. Lebedev, Phys. Lett. A **61**, 319 (1977).
9. В. В. Лебедев, И. М. Халатников, ЖЭТФ **75**, 2312 (1978).
10. Г. Е. Воловик, В. С. Доценко (мл.), Письма в ЖЭТФ **29**, 630 (1979).
11. Г. Е. Воловик, В. С. Доценко (мл.), ЖЭТФ **78**, 132 (1980).
12. E. A. Kuznetsov and A. V. Mikhailov, Phys. Lett. A **77**, 37 (1980).
13. В. Е. Захаров, Е. А. Кузнецов, УФН **167**, 1137 (1997).
14. В. И. Арнольд, *Математические методы классической механики*, Наука, Москва (1974).
15. В. И. Арнольд, В. В. Козлов, А. И. Нейштадт, в сб. *Итоги науки и техники*, Сер. Современные проблемы математики, Т. 3, ВИНТИ, Москва (1985).
16. Б. А. Дубровин, С. П. Новиков, УМН **44**, 29 (1989).
17. I. E. Dzyaloshinskii and G. E. Volovik, Ann. Phys. **125**, 67 (1980).
18. Б. А. Дубровин, С. П. Новиков, ДАН СССР **270**, 781 (1983).
19. А. А. Балинский, С. П. Новиков, ДАН СССР **283**, 1036 (1985).
20. С. П. Царев, ДАН СССР **282**, 534 (1985).
21. С. П. Царев, Изв. АН СССР, Сер. матем. **54**, 1048 (1990).
22. О. И. Мохов, Е. В. Ферапонтов, УМН **45**, 191 (1990).
23. Е. В. Ферапонтов, Функциональный анализ и его приложения **25**, 37 (1991).
24. Е. В. Ферапонтов, Функциональный анализ и его приложения **26**, 83 (1992).
25. Е. В. Ферапонтов, ТМФ **91**, 452 (1992).
26. E. V. Ferapontov, Amer. Math. Soc. Transl. (2), **170**, 33 (1995).
27. М. В. Павлов, Докл. РАН **339**, 21 (1994).
28. A. Ya. Maltsev and S. P. Novikov, Physica D **156**, 53 (2001).
29. A. Ya. Maltsev, Int. J. Math. Math. Sci. **32**, 587 (2002).
30. Л. В. Богданов, Е. В. Ферапонтов, ТМФ **116**, 113 (1998).
31. V. Zakharov, In the book: Monographs AMS/MAA Series, The Legacy of the Inverse Scattering Transform in Applied Mathematics, Contemporary Mathematics, Vol. 301 (2002), DOI:<http://dx.doi.org/10.1090/conm/301>.
32. О. И. Мохов, Фундамент. и прикл. матем. **21**, 171 (2016).
33. V. E. Zakharov, Duke. Math. J. **94**, 103 (1998).
34. И. М. Кричевер, Функци. анализ и его прил. **31**, 32 (1997).
35. F. Magri, J. Math. Phys. **19**, 1156 (1978).
36. В. А. Dubrovin, Nucl. Phys. B **379**, 627 (1992).
37. В. А. Dubrovin, arXiv: math.AG/9807034.
38. В. А. Dubrovin and Y. Zhang, arXiv:math.DG/0108160.
39. В. Dubrovin, Si-Qi Liu, and Youjin Zhang, arXiv: math.DG/0410027.
40. Б. А. Дубровин, С. П. Новиков, ДАН СССР **279**, 294 (1984).
41. В. Е. Захаров, С. В. Манаков, С. П. Новиков, Л. П. Питаевский, *Теория солитонов: метод обратной задачи*, под ред. С. П. Новикова, Наука, Москва (1980).
42. О. И. Мохов, Е. В. Ферапонтов, Функци. анализ и его прил. **28**, 60 (1994).
43. В. Enriquez, A. Orlov, and V. Rubtsov, Письма в ЖЭТФ **58**, 677 (1993).
44. Дж. Уизем, *Линейные и нелинейные волны*, Мир, Москва (1977).
45. H. Flaschka, M. G. Forest, and D. W. McLaughlin, Comm. Pure Appl. Math. **33**, 739 (1980).
46. С. П. Новиков, Функциональный анализ и его приложения **8:3**, 54 (1974).
47. Б. А. Дубровин, С. П. Новиков, ЖЭТФ **67**, 2131 (1974).
48. Б. А. Дубровин, С. П. Новиков, ДАН СССР **219**, 531 (1974).

49. А. Р. Итс, В. Б. Матвеев, ТМФ **23**, 51 (1975).
50. А. Р. Итс, В. Б. Матвеев, Функц. анализ и его прил. **9**, 69 (1975).
51. Б. А. Дубровин, В. Б. Матвеев, С. П. Новиков, УМН **31**, 55 (187) (1976).
52. Б. А. Дубровин, И. М. Кричевер, С. П. Новиков, ДАН СССР **229**, 15 (1976).
53. А. Ya. Maltsev, SIGMA **8**, 103 (2012).
54. А. Ya. Maltsev, Int. J. Math. Math. Sci. **30**, 399 (2002).
55. Б. А. Дубровин, Функц. анализ и его прил. **24**, 25 (1990).
56. В. Л. Алексеев, УМН **50**, 165 (1995).
57. А. В. Гуревич, Л. П. Питаевский, ЖЭТФ **65**, 590 (1973).
58. А. В. Гуревич, Л. П. Питаевский, ЖЭТФ **93**, 871 (1987).
59. В. В. Авилов, И. М. Кричевер, С. П. Новиков, ДАН СССР **295**, 345 (1987).
60. И. М. Кричевер, Функц. анализ и его прил. **22**, 37 (1988).
61. Г. В. Потёмин, УМН **43**, 211 (1988).
62. А. В. Гуревич, А. Л. Крылов, Г. А. Эль, Письма в ЖЭТФ **54**, 104 (1991).
63. А. В. Гуревич, А. Л. Крылов, Г. А. Эль, ЖЭТФ **101**, 1797 (1992).
64. Fei Ran Tian, Comm. Pure Appl. Math. **46**, 1093 (1993).
65. Т. Грава, УМН **54**, 169 (1999).
66. Т. Грава, ТМФ **122**, 58 (2000).
67. Т. Grava, Math. Phys. Anal. Geom. **4**, 65 (2001).
68. Т. Grava and Fei-Ran Tian, Comm. Pure Appl. Math. **55**, 1569 (2002).
69. С. П. Новиков, А. Я. Мальцев, УМН **48**, 155 (1993).
70. А. Я. Мальцев, М. В. Павлов, Функц. анализ и его прил. **29**, 7 (1995).
71. А. Ya. Maltsev, J. Math. Phys. **56**, 023510 (2015).
72. О. И. Мохов, Функциональный анализ и его приложения **22**, 92 (1988).
73. О. И. Мохов, Функциональный анализ и его приложения **42**, 39 (2008).
74. А. Ya. Maltsev, J. Math. Phys. **57**, 053501 (2016).
75. С. П. Новиков, УМН **37**, 3 (1982).

КВАЗИКЛАССИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА МОДЕЛИ ДИКЕ В СВЕРХИЗЛУЧАТЕЛЬНОЙ ДИПОЛЬНОЙ ФАЗЕ В СОСТОЯНИИ «СВЯЗАННОГО СИЯНИЯ»

С. И. Мухин*, А. Мукерджи, С. С. Сеидов

Кафедра теоретической физики и квантовых технологий,
Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»
119049, Москва, Россия

Поступила в редакцию 20 ноября 2020 г.,
после переработки 6 декабря 2020 г.
Принята к публикации 6 декабря 2020 г.

Найдено аналитическое решение квазиклассических уравнений движения модели Дике в сверхизлучательном состоянии. Зависимости от времени колебаний амплитуд сверхизлучательного фотонного конденсата и когерентной заселенности массива двухуровневых атомов в микроволновой полости выражены через эллиптические функции Якоби и свидетельствуют о существовании адиабатического инварианта в системе с сильной связью. Периодические биения амплитуд фотонного и когерентного атомного состояний сдвинуты во времени, представляя собой эффект «связанного сияния», когда энергия, заключенная в двухуровневых системах, во время «темноты» внезапно переходит в энергию фотонного конденсата, «освещающего» полость на время полупериода колебаний перед тем, как она вновь погрузится в «темноту».

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040192

1. ВВЕДЕНИЕ

Предсказанный ранее сверхизлучательный фазовый переход в модели Дике [1] цепочки из $N \gg 1$ двухуровневых систем (ДУС), связанных с одной бозонной модой в резонансной полости [2, 3], был представлен как [4] самосогласованный поворот на конечный угол операторов псевдоспина в представлении Гольштейна – Примакова [5, 6], описывающих когерентные состояния ДУС. Мы рассматриваем гамильтониан модели Дике [1] в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{p}^2 + \omega^2 \hat{q}^2) + g \hat{p} \hat{S}^y - E_J \hat{S}^z, \quad (1)$$

где введены операторы $\hat{S}^\alpha = \sum_i \hat{s}_i^\alpha$ суммарных компонент псевдоспина, описывающих ДУС. Для определенности можно рассмотреть систему из N сверхпроводящих островков, каждый из которых разделен пополам джозефсоновским контактом, в пред-

ставлении куперовского ящика [7]. Цепочка помещена в резонансную полость с частотой ω — частотой единственной фотонной моды. Вторично квантованные операторы фотонной моды есть

$$\hat{p} = i \sqrt{\frac{\hbar \omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}), \quad \hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \quad (2)$$

где $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$. Полный квадрат псевдоспина \hat{S}^2 сохраняется, так как он коммутирует с (1): $[\hat{S}^2, H] = 0$. Туннелирование куперовских пар представлено членом $-E_J \hat{S}^z$. Член $g \hat{p} \hat{S}^y$ описывает дипольную связь между куперовскими парами и фотонным полем с константой связи g . В работе [2] показано, что квантовый фазовый переход переводит систему (1) в дважды вырожденное дипольно-упорядоченное состояние. В данной работе мы приводим аналитическое решение, описывающее динамику джозефсоновских контактов в микроволновой полости и демонстрирующее существование метастабильного состояния «связанного сияния» с когерентными периодическими биениями диполей, которое связано с дважды вырожденной дипольно-упорядоченной фазой, найденной ранее. Первые два члена в (1) соответству-

* E-mail: i.m.sergei.m@gmail.com

ют энергии гармонического осциллятора фотонной моды. Расщепление уровней ДУС представлено членом $-E_J \hat{S}^z$, а член $g\hat{p}\hat{S}^y$ описывает дипольную энергию связи фотонов с ДУС. В работе [4] было показано, что самосогласованный поворот представления Гольштейна – Примакова операторов $\hat{S}_{x,y,z}$ позволяет достаточно прозрачно описать квантовый фазовый переход второго рода в модели Дике (1). А именно, когда константа связи g становится больше критического значения g_c , суперспин $S = N/2$ постепенно поворачивается от оси z к оси y на угол $|\theta| \leq \pi/2$, где верхний предел соответствует максимуму дипольного момента $\langle \hat{S}_y \rangle \propto S \sin \theta$ ДУС. Одновременно с этим фотонный оператор \hat{p} приобретает внедиагональное среднее значение $\langle \hat{p} \rangle \propto -gS \sin \theta$, говорящее о возникновении макроскопического когерентного («сверхизлучательно») фотонного конденсата, связанного с дипольным моментом ДУС с энергией $\propto g \langle \hat{S}_y \rangle \langle \hat{p} \rangle$. Очевидно, что одновременная смена знаков: $\langle \hat{S}_y \rangle, \langle \hat{p} \rangle \rightarrow -\langle \hat{S}_y \rangle, -\langle \hat{p} \rangle$, приводит систему в новое состояние с той же самой энергией спин-фотонной связи, тем самым свидетельствуя о существовании дважды вырожденного основного состояния. Нами найдено аналитическое решение уравнений движения, описывающих «медленное» блуждание системы между двумя вырожденными основными состояниями: хранящаяся в ДУС энергия $\propto \langle S_z \rangle$ периодически закачивается в фотонный конденсат, в то время как амплитуда суммарного дипольного момента ДУС $\propto \langle S_y \rangle$ и амплитуда сверхизлучательного конденсата $\propto \langle p \rangle$ меняют знак на противоположный, как функции времени. Найдены два первых интеграла для медленного движения когерентных амплитуд в квазиклассическом пределе.

Квазиклассические уравнения движения средних значений импульса фотона и декартовых проекций суммарного псевдоспина в основном состоянии могут быть получены согласно [8], начиная с уравнений Гейзенберга, в виде

$$\ddot{\hat{A}} = -\frac{1}{\hbar^2} [\hat{H}, [\hat{H}, \hat{A}]], \quad (3)$$

где $\hat{A} = \hat{p}, \hat{S}_\alpha$ и $\alpha = x, y, z$. Далее, используем гамильтониан модели Дике (1), уравнение (3) и коммутационные отношения между компонентами спина, координатой и импульсом гармонического осциллятора. Получим следующую систему дифференциальных уравнений:

$$\ddot{\hat{S}}_z = -g^2 \hat{p}^2 \hat{S}_z - gE_J \hat{p} \hat{S}_y, \quad (4)$$

$$\ddot{\hat{S}}_y = -E_J^2 \hat{S}_y - gE_J \hat{p} \hat{S}_z, \quad (5)$$

$$\ddot{\hat{S}}_x = -E_J^2 \hat{S}_x - g^2 \hat{p}^2 \hat{S}_x, \quad (6)$$

$$\ddot{\hat{p}} = -\omega^2 \{ \hat{p} + g\hat{S}_y \}. \quad (7)$$

Для перехода от операторов к их средним значениям в основном состоянии необходимо сделать следующее. Сначала введем амплитуду сверхизлучательного фотонного конденсата λ_R [2] как сдвиг бозонных операторов в (2):

$$\hat{a}^\dagger = \hat{c}^\dagger - i\lambda_R, \quad \hat{a} = \hat{c} + i\lambda_R, \quad (8)$$

$$\hat{p} = \sqrt{2\hbar\omega}\lambda_R + i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} (\hat{c}^\dagger - \hat{c}), \quad (9)$$

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} (\hat{c}^\dagger + \hat{c}).$$

Как показано в [4], одновременно с появлением конденсата λ_R происходит поворот псевдоспина на угол θ вокруг оси x . Далее мы совершаем поворот полного спина на угол θ вокруг оси x и на угол $\phi - \pi/2$ вокруг оси z , где θ, ϕ зависят от времени:

$$\hat{S}^z = \hat{J}^z \cos \theta - \hat{J}^y \sin \theta,$$

$$\hat{S}^y = \hat{J}^z \sin \theta \sin \phi + \hat{J}^y \cos \theta \sin \phi - \hat{J}^x \cos \phi, \quad (10)$$

$$\hat{S}^x = \hat{J}^z \sin \theta \cos \phi + \hat{J}^y \cos \theta \cos \phi + \hat{J}^x \sin \phi,$$

операторы декартовых проекций суммарного спина $\hat{J}^{x,y,z}$ определены через представление Гольштейна – Примакова:

$$\hat{J}^z = S - \hat{b}^\dagger \hat{b},$$

$$\begin{aligned} \hat{J}^y &= i\sqrt{\frac{S}{2}} \left(\hat{b}^\dagger \sqrt{1 - \frac{\hat{b}^\dagger \hat{b}}{2S}} - \sqrt{1 - \frac{\hat{b}^\dagger \hat{b}}{2S}} \hat{b} \right) \simeq \\ &\simeq i\sqrt{\frac{S}{2}} (\hat{b}^\dagger - \hat{b}), \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \hat{J}^x &= \sqrt{\frac{S}{2}} \left(\hat{b}^\dagger \sqrt{1 - \frac{\hat{b}^\dagger \hat{b}}{2S}} + \sqrt{1 - \frac{\hat{b}^\dagger \hat{b}}{2S}} \hat{b} \right) \simeq \\ &\simeq \sqrt{\frac{S}{2}} (\hat{b}^\dagger + \hat{b}), \end{aligned}$$

и $[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1$.

Поворот объясняется просто: в основном состоянии с малой константой связи g угол поворота $\theta = 0$ и оператор $\hat{S}_z = \hat{J}^z$ в гамильтониане Дике (1) почти диагонален, следовательно, диагональные элементы $\langle \hat{S}^y \rangle = \langle \hat{J}^y \rangle$ стремятся к нулю. Поэтому «дипольный

момент», пропорциональный $\langle \hat{S}^y \rangle$, равен нулю и фотоны квазиклассически расщепляются со спинами. С другой стороны, когда угол поворота θ ненулевой, возникает конечный «дипольный момент» спиновой подсистемы, пропорциональный $\langle \hat{S}^y \rangle = \langle \hat{J}^z \rangle \sin \theta$, который связан с когерентным фотонным конденсатом $\langle \hat{p} \rangle = \lambda_R$. Последнее приводит к нестабильности основного состояния системы. Мы заменяем операторы в (4)–(7) их средними по основному состоянию в представлении Гейзенберга: $\hat{A} \rightarrow \langle \hat{A} \rangle$, используя соотношения (9)–(11). Далее рассматриваем резонансный случай: $\hbar\omega = E_J$.

В отличие от [2] сдвиг бозонных операторов в (11) не проводился, так как его роль на себя взял поворот на угол θ . Тогда из (4)–(6) очевидно, что система уравнений описывает нелинейную эволюцию полного спина \mathbf{S} в системе отсчета, вращающейся вокруг оси z в фазовом пространстве псевдоспина с частотой E_J . Поскольку мы рассматриваем резонансный случай $\omega = E_J$, угол ϕ в (10) меняется во времени как $\phi = \omega t$, следовательно, полный спин \mathbf{S} вращается с постоянной угловой скоростью ω вокруг оси z , а фотонная переменная p в (7) осциллирует с частотой ω и при этом линейно связана со спином через последний член в правой части (7). Удобно ввести следующие обозначения для средних значений как функций от времени ($\hbar = 1$):

$$p = \sqrt{2\omega} \lambda_R(t) \equiv -\sqrt{2\omega} g_0(t) \cos(\omega t), \quad (12)$$

$$S_z = S \cos \theta(t), \quad (13)$$

$$S_y = S \sin \theta(t) \sin(\omega t), \quad (14)$$

$$S_x = S \sin \theta(t) \cos(\omega t). \quad (15)$$

Поскольку в сверхизлучательном состоянии [2, 4] фотонный сдвиг в термодинамическом пределе $\lambda_R \propto S = N/2 \gg 1$, можно использовать квазиклассическое приближение для основного состояния: $\langle \hat{p}^2 \rangle \approx \langle \hat{p} \rangle^2$ в (4)–(7).

2. ДИПОЛЬНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В «ЗАМОРОЖЕННЫХ» СКРЕЩЕННЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ И МАГНИТНОМ ПОЛЯХ

Примечательно, что в статическом пределе, т. е. при $\lambda_R, \theta, \phi \equiv \text{const}$ в уравнениях (12)–(15), три уравнения (4), (5) и (7) становятся алгебраическими и остаются только два из них, так как уравнение (4) обращается в тождество. Это означает, что дважды вырожденное решение говорит о фазовом переходе в спонтанно упорядоченную дипольную фазу ДУС с замороженными электрическим и магнитным полями в резонансной полости. Очевидно, что подобное

основное состояние системы возможно, если скрещенные электрическое и магнитное поля подчиняются статическим граничным условиям на границе полости, т. е. поверхностный заряд должен быть статичен и (сверх)ток должен быть постоянен. Мы также подчеркиваем, что, как следует из правых частей уравнений (5) и (7), действительно существуют два решения, отличающиеся одновременной сменой знаков: $\theta \rightarrow -\theta$ и $\lambda_R \rightarrow -\lambda_R$ (ср. с [2]).

3. «СВЯЗАННОЕ СИЯНИЕ» СВЕРХИЗЛУЧАТЕЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ В МОДЕЛИ ДИКЕ В ПРЕДЕЛЕ АДИАБАТИЧЕСКИХ ДУС

В этом разделе получим аналитическое решение уравнений (4)–(7), используя подход с двумя временными масштабами [8] в пределе адиабатической эволюции ДУС. Мы опускаем уравнение (6), так как \hat{S}_x не входит в гамильтониан Дике (1) и в уравнения (4), (5), (7). Также мы разбиваем временную эволюцию на «быструю», пропорциональную $\exp(i\omega t)$, и «медленную», описываемую функциями $g_0(t)$ и $\theta(t)$, которые определены формулами (12)–(15). Тогда, подставляя (12)–(15) в (5) и (7) и усредняя левую и правую части по быстрым осцилляциям ω , получим следующую систему уравнений для изменяющихся адиабатически функций:

$$\dot{\theta}(t) = \frac{g\sqrt{2\omega}}{2} g_0(t), \quad (16)$$

$$\sin \theta = -\frac{2\sqrt{2}}{gS\sqrt{\omega}} \dot{g}_0(t). \quad (17)$$

Процедура усреднения по быстрым осцилляциям, приводящая к (16) и (17), проста. А именно, необходимо подставить (12)–(15) в (5) и умножить обе части уравнения на $\cos(\omega t)$. Затем надо вычислить среднее по «быстрым» осцилляциям за короткий период времени ($\sim \omega^{-1}$), считая переменные, содержащие «медленные» члены, константами (адиабатическая эволюция ДУС). Интегрируя по короткому временному периоду, получим (16). Аналогично, умножая обе части уравнения (7) на $\sin(\omega t)$ и повторяя ту же самую процедуру, получим (17). По той же причине уравнение (4) вновь обращается в тождество, как в «замороженном» случае, рассмотренном выше, после пренебрежения второй производной по времени от «медленной» функции $\cos \theta$ в левой части (4). Для упрощения обозначений далее будем пользоваться единицами $\hbar = 1$. Умножая левую часть (16) на $\sin \theta$ и используя (17), получим первый

адиабатический интеграл динамических уравнений, усредненных по быстрым осцилляциям:

$$\cos \theta(t) - \frac{g^2_0(t)}{S} = \text{const} \equiv C, \quad (18)$$

где C — полная энергия системы, усредненная по быстрым осцилляциям, $C \propto \langle \hat{H} \rangle$. Далее, дифференцируя (17) единожды по времени и выражая $\cos \theta(t)$ через $g_0(t)$ с использованием (18), получим нелинейное дифференциальное уравнение второго порядка для неизвестной функции $g_0(t)$:

$$\frac{2\dot{g}_0(t)}{gS\sqrt{\omega}} + \frac{g\sqrt{\omega}}{2}g_0(t) \left(C + \frac{g^2_0(t)}{S} \right) = 0. \quad (19)$$

Решение данного уравнения точно выражается через функции Якоби. Если выбрать $C = 1 - 2k^2$ с $0 \leq k \leq 1$ [9], то решение уравнения (19) имеет вид

$$g_0(t) = \sqrt{2Sk} \operatorname{cn} \left(\frac{g\sqrt{S\omega}}{2} t, k \right), \quad (20)$$

$$\lambda_R = \sqrt{2Sk} \operatorname{cn} \left(\frac{g\sqrt{S\omega}}{2} t, k \right) \cos(\omega t),$$

где k — модуль эллиптического интеграла. Используя решение (20), оставшиеся переменные можно выразить алгебраически из (16), (17) как (ср. с [8])

$$S_z = S \cos \theta = S \left\{ 1 - 2k^2 \operatorname{sn}^2 \left(\frac{g\sqrt{S\omega}}{2} t, k \right) \right\},$$

$$S_y = -S \sin \theta \sin(\omega t) = 2kS \times \quad (21)$$

$$\times \operatorname{sn} \left(\frac{g\sqrt{S\omega}}{2} t, k \right) \operatorname{dn} \left(\frac{g\sqrt{S\omega}}{2} t, k \right) \sin(\omega t).$$

Здесь sn , dn , cn — эллиптические функции Якоби. С другой стороны, при выборе $C = k^2 - 2$, решения имеют вид

$$g_0(t) = \sqrt{2S} \operatorname{dn} \left(\frac{g\sqrt{S\omega}}{2} t, k \right), \quad (22)$$

$$\lambda_R = \sqrt{2S} \operatorname{dn} \left(\frac{g\sqrt{S\omega}}{2} t, k \right) \cos(\omega t),$$

$$S_z = S \cos \theta =$$

$$= Sk^2 \left\{ 1 - 2 \operatorname{sn}^2 \left(\frac{g\sqrt{S\omega}}{2} t, k \right) \right\},$$

$$S_y = -S \sin \theta \sin(\omega t) = \quad (23)$$

$$= 2k^2 \operatorname{sn} \left(\frac{g\sqrt{S\omega}}{2} t, k \right) \times$$

$$\times \operatorname{cn} \left(\frac{g\sqrt{S\omega}}{2} t, k \right) \sin(\omega t).$$

Эффективная частота Ω , характеризующая биения эллиптических функций Якоби в (20)–(23), выражается через полный эллиптический интеграл первого рода $K(k)$ [9] (расходится при $k = 1$) следующим образом:

$$g_0 \left(t + \frac{2\pi}{\Omega} \right) = g_0(t), \quad \Omega \equiv \omega \frac{\pi}{K(k)} \frac{g}{2g_c}, \quad (24)$$

$$g_c \equiv \sqrt{\frac{E_J}{S}}.$$

Здесь g_c — критическая константа связи, при которой сверхизлучательное состояние стабильно [2]. Следовательно, в пределе $k \rightarrow 1$ предположение о «медленной» эволюции $\theta(t)$, т. е. $\Omega \ll \omega$, которое мы приняли в начале вычислений, выполняется, если

$$\Omega \equiv \omega \frac{\pi}{K(k)} \frac{g}{2g_c} \ll \omega, \quad \text{т. е. } K(k) \gg \frac{\pi}{2} \frac{g}{g_c}, \quad (25)$$

следовательно, $1 - 2 \exp \left\{ -\frac{\pi}{2} \frac{g}{g_c} \right\} \leq k \leq 1$.

Таким образом, физическое явление фазы «связанного сияния» описывается решениями (20)–(23). Выражения для электрического поля и суммарного дипольного момента, создаваемых в камере, которые колеблются между двумя вырожденными основными состояниями модели Дике, записываются как

$$\hat{\mathbf{E}} = i \sqrt{\frac{1}{V}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \boldsymbol{\epsilon}, \quad (26)$$

$$\hat{\mathbf{d}} = -2e l \epsilon \hat{S}_y, \quad (27)$$

где $\boldsymbol{\epsilon}, V, l$ — вектор поляризации, объем полости и эффективная толщина джозефсоновского контакта соответственно, $2e$ — элементарный заряд куперовской пары. Для двух возможных выборов адиабатического инварианта C , приведенных выше, представлены два следующих набора решений для электрического поля \mathbf{E} и суммарного дипольного момента ДУС \mathbf{d} .

1. Случай 1. $C = 1 - 2k^2$:

$$\mathbf{E}(t) = \frac{2\sqrt{\omega}}{\sqrt{V}} \boldsymbol{\epsilon} \sqrt{2Sk} \operatorname{cn} \left(\frac{g\sqrt{S\omega}}{2} t, k \right) \times$$

$$\times \cos(\omega t), \quad (28)$$

$$\mathbf{d}(t) = 2elS\varepsilon \cdot 2k \operatorname{sn} \left(\frac{g\sqrt{S\omega}}{2} t, k \right) \times \operatorname{dn} \left(\frac{g\sqrt{S\omega}}{2} t, k \right) \sin(\omega t), \quad (29)$$

$$E_J S_z(t) = E_J S \left[1 - 2k^2 \operatorname{sn}^2 \left(\frac{g\sqrt{S\omega}}{2} t, k \right) \right]. \quad (30)$$

2. Случай 2. $C = k^2 - 2$:

$$\mathbf{E}(t) = \frac{2\sqrt{\omega}}{\sqrt{V}} \varepsilon \sqrt{2S} \operatorname{dn} \left(\frac{g\sqrt{S\omega}}{2} t, k \right) \times \cos(\omega t), \quad (31)$$

$$\mathbf{d}(t) = 2elS\varepsilon \cdot 2k^2 \operatorname{sn} \left(\frac{g\sqrt{S\omega}}{2} t, k \right) \times \operatorname{cn} \left(\frac{g\sqrt{S\omega}}{2} t, k \right) \sin(\omega t), \quad (32)$$

$$E_J S_z(t) = E_J S k^2 \left[1 - 2 \operatorname{sn}^2 \left(\frac{g\sqrt{S\omega}}{2} t, k \right) \right]. \quad (33)$$

Следует отметить интересный факт. В обоих случаях выражение для дипольной энергии ДУС, т.е. $-\mathbf{E} \cdot \mathbf{d}$, одинаково. Различие в фотонной части $\hat{p}^2/2$ и зеемановской части $-E_J S_z$. Однако мы рассматривали «медленную эволюцию», что означает $k \rightarrow 1$. В данном пределе выражения для всех энергетических вкладов совпадают.

Используя уравнения, записанные выше для двух случаев, построим графики зависимости электрического поля фотонного конденсата от времени $E(t)$, а также распределение энергии системы. Энергия распределена между энергией связи двухуровневых систем электромагнитным полем в полости $-\mathbf{E} \cdot \mathbf{d}$ и «зеемановской» энергией $-E_J \hat{S}_z$, т.е. джозефсоновской энергией туннелирования куперовских пар в гамильтониане (1). Для $C = 1 - 2k^2$ на рис. 1 показаны зависящие от времени осцилляции когерентного электрического поля фотонного конденсата (сплошная линия) вместе с «медленной» огибающей кривой (штриховая линия), которая обозначает периодическое изменение фазы быстрых колебаний на π , т.е. двойное вырождение основного

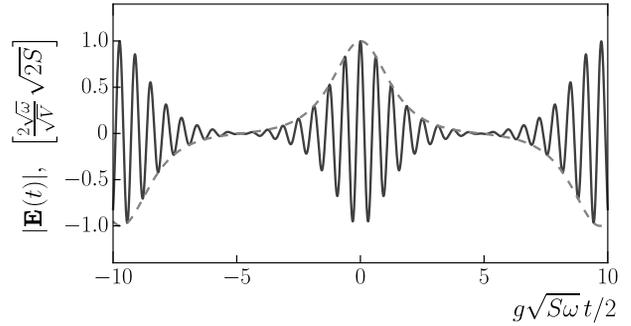


Рис. 1. Зависимость от времени осцилляций когерентного электрического поля фотонного конденсата (сплошная линия) с «медленной» огибающей (штриховая линия), которая свидетельствует о периодическом изменении фазы осцилляций на π

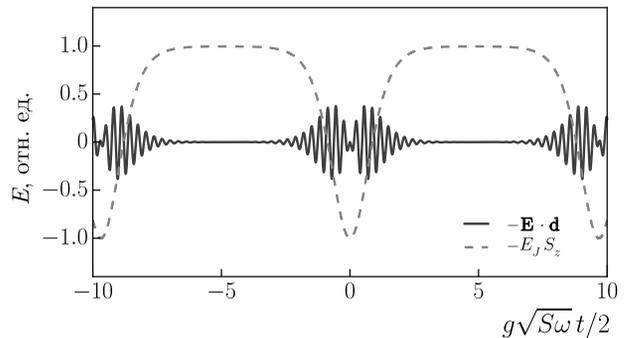


Рис. 2. Зависимости от времени дипольной энергии в поле фотонного конденсата, пропорциональной $-\mathbf{E} \cdot \mathbf{d}$ (сплошная линия), и «зеемановской» энергии, пропорциональной $-E_J S_z$ (штриховая линия)

состояния снимается динамическим образом. График на рис. 2 ясно демонстрирует, что энергия основного состояния проявляет периодическое внезапное превращение «энергии нулевых колебаний» куперовских пар (штриховая линия) в энергию «сияния» фотонного конденсата, связанного с диполями ДУС (сплошная линия), правда, модель не включает диссипацию.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрена модель Дике с N псевдоспинами $1/2$, взаимодействующими с единственной модой фотонного поля в резонаторе в квазиклассическом сверхизлучательном режиме. С использованием недавно предложенного теоретического метода [4] вращающегося представления Гольштейна – Примакова декартовых компонент полного спина была

рассмотрена квазиклассическая динамика системы операторных уравнений Гейзенберга. С помощью подхода двух временных масштабов («короткий» и «длинный») впервые получены аналитические выражения для электрического поля и дипольного момента (среднего значения компоненты псевдоспина $\langle S_y \rangle$) в резонансной полости. Решения выражаются через эллиптические функции Якоби, описывая внутреннее сверхизлучательное состояние «связанного сияния». Множество других задач, связанных с данной, таких как бифуркации и хаос в асимптотическом пределе, область интегрируемости и т. д., представляет интерес для дальнейшего исследования.

Благодарности. С. И. М. благодарит Карло Бейнаккера, Константина Ефетова, Бернарда ван Хека и Николая Гнездилова за полезные дискуссии во время работы над статьей, а также коллег из Института теоретической физики им. Лоренца за гостеприимство во время его пребывания в Лейдене.

Финансирование. Работа проведена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках программы повышения конкурентоспособности по

гранту НИТУ «МИСиС» К4-2018-061, выполненной по государственному постановлению от 16 марта 2013, № 211.

ЛИТЕРАТУРА

1. R. H. Dicke, Phys. Rev. **93**, 99 (1954).
2. C. Emary and T. Brandes, Phys. Rev. E **67**, 066203 (2003).
3. K. Hepp and E. H. Lieb, Ann. Phys. **76**, 360 (1973).
4. S. I. Mukhin and N. V. Gnezdilov, Phys. Rev. A **97**, 053809 (2018).
5. T. Holstein and H. Primakoff, Phys. Rev. **58**, 1098 (1940).
6. В. П. Карасев, ТМФ **95**(1), 3 (1993).
7. A. Shnirman, G. Schön, and Z. Hermon, Phys. Rev. Lett. **79**, 2371 (1997).
8. S. I. Mukhin and N. V. Gnezdilov, arXiv:1711.00348.
9. E. T. Whittaker and G. N. Watson, *A Course of Modern Analysis*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1996).

ОСЦИЛЛЯТОРЫ С ЗАТУХАНИЕМ В РАМКАХ ОБЩЕЙ ТЕОРИИ СИЛ КАЗИМИРА И ВАН ДЕР ВААЛЬСА

Ю. С. Бараш*

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

Поступила в редакцию 6 ноября 2020 г.,
после переработки 14 декабря 2020 г.
Принята к публикации 14 декабря 2020 г.

Показано, что общая теория сил Казимира и Ван дер Ваальса описывает обусловленные взаимодействием части термодинамических потенциалов квантового гармонического осциллятора с затуханием, билинейно связанного с термостатом. По аналогии с широкой областью применимости общей теории сил Казимира и Ван дер Ваальса проведено расширение модели затухающего осциллятора и получены соответствующие термодинамические величины. В то время как в исходной модели тепловой резервуар содержит большое число свободных осцилляторов с исчезающе малым демпфированием, в расширенной модели термостат состоит из диссипативных составляющих, которые могут иметь любые допустимые зависящие от частоты и температуры восприимчивости вследствие их взаимодействия в термостате с дополнительными диссипативными каналами, непосредственно не влияющими на центральный осциллятор. Таким образом, полученные результаты оказываются применимы к случаю зависящей от частоты и температуры диссипативной функции центрального осциллятора.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040209

1. ВВЕДЕНИЕ

Применяя флуктуационно-диссипационные соотношения к электромагнитному полю в конденсированной среде, Е. М. Лифшиц решил задачу об имеющем флуктуационное электромагнитное происхождение взаимодействии между разделенными пустой щелью толстыми пластинами [1]. Решение Лифшица показало, как можно получить единое описание сил Казимира и Ван дер Ваальса между макроскопическими телами с зависящими от частоты произвольными диэлектрическими проницаемостями.

С появлением квантово-полевых методов теории многих тел подход Лифшица был обобщен в работе Дзялошинского и Питавевского [2], в которой были получены имеющие широкую область применимости общие формулы, описывающие вклад длинноволнового флуктуационного электромагнитного поля, взаимодействующего с конденсированной сре-

дой, в термодинамические величины неоднородных диссипативных систем в условиях равновесия. Это позволило, в частности, распространить решение Лифшица для задачи о двух пластинах, разделенных пустой щелью, на случай взаимодействия через жидкую пленку [3]. С тех пор основные идеи и результаты общей теории сил Казимира и Ван дер Ваальса [1–4] составляют базис для современного описания термодинамических величин, обусловленных флуктуационным электромагнитным взаимодействием [5–11].

Позднее и вне зависимости от приведенных выше исследований значительное внимание было уделено термодинамике осциллятора, билинейно связанного с тепловым резервуаром [12–26]. Квантовая и классическая динамика осциллятора с затуханием, взаимодействующего с тепловым резервуаром и находящегося под его флуктуационным воздействием, изучались в течение многих лет [27–40]. Осциллятор с затуханием является характерным примером диссипативных квантовых систем [40, 41], представляющим интерес в связи с целым рядом задач и касающимся, в частности, квантового броуновского

* E-mail: barash@issp.ac.ru

движения [37, 39], влияния диссипации на процессы квантового туннелирования [33, 42] и некоторых общих аспектов статистической механики и термодинамики при наличии сильной связи с термостатом [26].

В предлагаемой статье сравниваются основные аспекты и результаты двух теорий, идентифицируются их общие черты и области существенного пересечения. По аналогии с широкой областью применимости общей теории сил Казимира и Ван дер Ваальса модель осциллятора с затуханием будет далее обобщена на случай термостатов с более сложной структурой.

На первый взгляд, две упомянутые выше области исследований существенно отличаются друг от друга. Модель Цванцига – Калдейры – Леггетта для осциллятора с затуханием [30, 33] представляет собой пример малой квантовой системы, которая демонстрирует диссипативное поведение, возникающее вследствие ее взаимодействия с термостатом. Такая модель позволяет изучить важные для квантовой динамики системы свойства, допуская точные решения в простых случаях. Ее также можно рассматривать как часть более сложных квантовомеханических задач. Простая структура термостата, состоящего из большого числа свободных осцилляторов, взаимодействующих только с центральным (системным) осциллятором, приводит к возможности описания диссипативного поведения при переходе к задаче с одной или двумя степенями свободы.

В противоположность модели осциллятора с затуханием, общая теория сил Казимира и Ван дер Ваальса рассматривает (в рамках микроскопического квантового подхода) взаимодействие длинноволновых компонент электромагнитного поля с реальной конденсированной системой, при котором не возникает необходимости ни в разделении двух подсистем на малую центральную систему и большой тепловой резервуар, ни в существенных упрощениях общей постановки задачи. Зависящие от частоты диссипативные диэлектрические проницаемости конденсированной среды фигурируют в теории в общем виде, в согласии с флуктуационно-диссипационными соотношениями, а их конкретная форма может быть задана исходя из независимых теоретических или экспериментальных данных. Результаты общей теории применимы к неоднородным конденсированным системам с произвольным пространственным профилем, в которых проявляются нелокальные корреляции микроскопического квантового электромагнитного поля в средах с зависящими от координат матричными диэлектрическими проницаемостями.

Свободная от модельных предположений общая теория обладает существенно более широкими возможностями в рамках области ее применимости.

С другой стороны, две сравниваемые теории имеют ряд важных общих характерных черт. Поскольку свойства и взаимодействия Казимира и Ван дер Ваальса и находящегося под влиянием термостата осциллятора формируются под воздействием равновесных флуктуаций, сходные черты между ними известны [43], хотя непосредственное сравнение основных результатов для термодинамических потенциалов не проводилось. Кроме того, длинноволновое электромагнитное флуктуационное поле в теории сил Казимира и Ван дер Ваальса оказывается затухающим, имеющим комплексные собственные частоты, вследствие его взаимодействия с конденсированной средой, и в этом контексте напоминает осциллятор, который становится диссипативным из-за взаимодействия с термостатом.

Следует также отметить общую билинейную операторную структуру основных членов в гамильтонианах, описывающих взаимодействие, с операторами микроскопической квантовой плотности тока и электромагнитного потенциала в одной из теорий и с операторами положений центрального осциллятора и каждого из осцилляторов термостата в другой. В обоих случаях усреднение членов взаимодействия можно провести, используя флуктуационно-диссипационные соотношения. Еще одна существенная общая черта двух теорий состоит в том, что взаимодействие с центральным осциллятором не приводит, в рамках модели, к изменению восприимчивостей осцилляторов термостата. Это аналогично тому, что в общей теории сил Казимира и Ван дер Ваальса вклад от взаимодействия с длинноволновым флуктуационным электромагнитным полем в диэлектрические проницаемости конденсированной среды предполагается пренебрежимо малым.

Существенное пересечение двух обсуждаемых теорий становится очевидным в случае электромагнитного взаимодействия центрального осциллятора с термостатом. Учитывая это обстоятельство и проводя анализ, в некотором смысле в обратном порядке, вклад сил Казимира и Ван дер Ваальса в свободную энергию диссипативных систем был идентифицирован исходя из рассмотрения длинноволновых электромагнитных флуктуаций в элементарном RCL-контуре, который, по существу, является примером осциллятора с затуханием [44]. Впрочем, в то время как общая теория применима к обычному RCL-контуре, контур удовлетворяет не всем усло-

виям модели, в которой осцилляторы термостата имеют бесконечно малые функции демпфирования и, следовательно, вещественные собственные частоты. Обычное сопротивление RCL-контура, напротив, определяется известными реальными процессами в металле, которые следует рассматривать как дополнительные внутренние каналы диссипации в термостате, не включенные в исходную модель. Это относится, конечно, к большей части систем, обычно изучаемых в общей теории сил Казимира и Ван дер Ваальса¹⁾.

Моделью электромагнитного происхождения, которая одновременно удовлетворяет как условиям модели осциллятора с затуханием, так и теории сил Казимира и Ван дер Ваальса, является заряженный осциллятор в равновесном поле излучения черного тела. В этой модели функция демпфирования у осциллятора возникает благодаря процессам реакции излучения [12, 13]. Связь этой конкретной задачи с теорией сил Казимира и Ван дер Ваальса, не замеченная в работах [12, 13], обсуждалась в [45], но только в предельном случае вещественных собственных частот, когда результат сводится к свободной энергии свободных осцилляторов с собственными частотами взаимодействующей системы, как это имеет место для взаимодействия Казимира и Ван дер Ваальса в системах с вещественными собственными частотами [46–50].

Как будет показано ниже, обусловленные взаимодействием части термодинамических потенциалов, полученные в рамках модели осциллятора с затуханием и в рамках свободной от модельных предположений общей теории сил Казимира и Ван дер Ваальса, совпадают, если их выразить через сходные величины. Это является следствием существенного пересечения двух подходов. Другими словами, термодинамика осциллятора с затуханием, билинейно связанного с термостатом, непосредственно описывается давно полученными результатами общей теории сил Казимира и Ван дер Ваальса [4, 50–54].

Предложенное в этой статье расширение исходной модели осциллятора с затуханием включает влияние дополнительных внутренних каналов диссипации в термостате. В результате, вместо имею-

щихся в исходной модели восприимчивостей свободных осцилляторов термостата, расширенная модель допускает наличие зависящих от частоты и температуры диссипативных восприимчивостей общего вида. Хотя центральный осциллятор, по предположению, непосредственно не связан с дополнительными каналами, его функция демпфирования приобретает зависимость от частоты и температуры через билинейное взаимодействие с диссипативными осцилляторами термостата или аналогичными им его составляющими. Расширенная модель допускает термодинамическое описание осциллятора с затуханием в равновесном состоянии и, вообще говоря, не предназначена для изучения динамики всей системы. Соответствующий результат для свободной энергии, полученный с зависящей от температуры функцией демпфирования центрального осциллятора, как будет показано, совпадает с выражением для свободной энергии в исходной модели, в то время как результат для внутренней энергии изменяется.

Статья организована следующим образом. В разд. 2 приведены основные результаты для осциллятора с затуханием, используемые в последующих разделах. В разд. 3 представлен альтернативный вывод обусловленных взаимодействием частей свободной и внутренней энергий осциллятора с затуханием, что служит основой для дальнейшего рассмотрения. Разделы 4–6 показывают связь результатов для осциллятора с затуханием с результатами общей теории сил Казимира и Ван дер Ваальса. Расширенная модель для осциллятора с затуханием развита в разд. 7. Раздел 8 завершает статью.

2. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ ОСЦИЛЛЯТОРА С ЗАТУХАНИЕМ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕГО С ТЕРМОСТАТОМ

Рассмотрим в качестве малой квантовой системы, взаимодействующей с термостатом, центральный осциллятор, взаимодействующий со свободными осцилляторами окружения. Введем соответствующие операторы положения \hat{Q} и \hat{q}_α ($\alpha = 1, 2, \dots, N$).

Если внешнее возмущение в гамильтониане имеет вид

$$\hat{V}_{ext} = -\hat{Q}f_{ext,Q}(t) - \sum_{\alpha=1}^N \hat{q}_\alpha f_{ext,\alpha}(t) \quad (1)$$

и линейный отклик на внешние силы $f_{ext,Q}$ и $f_{ext,\alpha}$ описывается следующими соотношениями для фурье-компонент усредненных величин:

¹⁾ Следуя выявленной в этой статье аналогии между результатами двух теорий, диссипативные свойства конденсированной среды мы сравниваем здесь с диссипативными свойствами одного только термостата, но не самого центрального осциллятора. Роль последнего в модели аналогична роли флуктуационного электромагнитного поля в теории сил Казимира и Ван дер Ваальса.

$$Q(\omega) = \chi_{QQ}(\omega) f_{ext,Q}(\omega) + \sum_{\alpha=1}^N \chi_{Q\alpha}(\omega) f_{ext,\alpha}(\omega), \quad (2)$$

$$q_{\alpha}(\omega) = \chi_{\alpha Q}(\omega) f_{ext,Q}(\omega) + \sum_{\delta=1}^N \chi_{\alpha\delta}(\omega) f_{ext,\delta}(\omega), \quad (3)$$

то содержащая входящие сюда восприимчивости флуктуационно-диссипационная теорема, как известно, может быть представлена в виде [55]

$$(Q^2)_{\omega} = \hbar \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar\omega}{2T} \right) \operatorname{Im} \left[\chi_{QQ}(\omega) \right], \quad (4)$$

$$(q_{\alpha}Q)_{\omega} = \frac{i\hbar}{2} \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar\omega}{2T} \right) \left[\chi_{Q\alpha}^*(\omega) - \chi_{\alpha Q}(\omega) \right], \quad (5)$$

$$(q_{\alpha}^2)_{\omega} = \hbar \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar\omega}{2T} \right) \operatorname{Im} \left[\chi_{\alpha\alpha}(\omega) \right], \quad (6)$$

$$(q_{\alpha}q_{\delta})_{\omega} = \frac{i\hbar}{2} \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar\omega}{2T} \right) \left[\chi_{\delta\alpha}^*(\omega) - \chi_{\alpha\delta}(\omega) \right]. \quad (7)$$

Здесь $(AB)_{\omega}$ обозначает спектральную плотность симметризованной корреляционной функции в равновесном состоянии,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \langle \hat{A}(t) \hat{B}(t') + \hat{B}(t') \hat{A}(t) \rangle = \\ = \int_{-\infty}^{\infty} (AB)_{\omega} \exp[-i\omega(t-t')] \frac{d\omega}{2\pi}. \end{aligned} \quad (8)$$

Для квантовых состояний, инвариантных по отношению к операции инверсии времени, должны выполняться соотношения $\chi_{Q\alpha}(\omega) = \chi_{\alpha Q}(\omega)$, $\chi_{\alpha\delta}(\omega) = \chi_{\delta\alpha}(\omega)$, и, например, равенство (5) сводится к соотношению

$$(q_{\alpha}Q)_{\omega} = \hbar \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar\omega}{2T} \right) \operatorname{Im} \left[\chi_{Q\alpha}(\omega) \right].$$

При наличии внешней силы и вызванных взаимодействием с термостатом диссипативных процессов линеаризованное динамическое уравнение для статистически усредненного оператора положения центрального осциллятора с массой M и частотой Ω имеет вид

$$\begin{aligned} M\ddot{Q}(t) + M \int_{-\infty}^t dt' \tilde{\gamma}(t-t') \dot{Q}(t') + M\Omega^2 Q(t) = \\ = f_{ext}(t), \end{aligned} \quad (9)$$

где $\tilde{\gamma}(t)$ — диссипативная функция памяти.

Соответствующая зависящая от частоты восприимчивость, следовательно, есть $\chi_{QQ}(\omega) \equiv \chi_Q(\omega)$,

$$\chi_Q(\omega) = \frac{1}{M [(\Omega^2 - \omega^2) - i\omega\gamma(\omega)]}, \quad (10)$$

где функция демпфирования $\gamma(\omega)$ является фурье-образом $\tilde{\gamma}(t)$.

Восприимчивость α -го свободного осциллятора с массой m_{α} и частотой ω_{α} имеет вид

$$\chi_{\alpha}(\omega) = \frac{1}{m_{\alpha}} \frac{1}{\omega_{\alpha}^2 - \omega^2 - i\omega\varepsilon}, \quad \varepsilon \rightarrow +0. \quad (11)$$

Для нахождения перекрестных компонент $\chi_{Q\alpha}(\omega)$, $\chi_{\alpha\gamma}(\omega)$ матричной функции отклика удобно ввести полный квантовый гамильтониан модели Цванцига – Калдейры – Леггетта для затухающего осциллятора [30, 33] с добавленными классическими внешними силами:

$$\begin{aligned} \hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{1}{2} M \Omega^2 \hat{Q}^2 - \hat{Q} f_{ext,Q} + \\ + \sum_{\alpha=1}^N \left[\frac{\hat{p}_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + \frac{1}{2} m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2 \left(\hat{q}_{\alpha} - \frac{C_{\alpha}}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2} \hat{Q} \right)^2 \right] - \\ - \sum_{\alpha=1}^N \hat{q}_{\alpha} f_{ext,\alpha}. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь \hat{Q} , \hat{P} и \hat{q}_{α} , \hat{p}_{α} — операторы положения и импульса соответственно центрального осциллятора и α -го осциллятора термостата. Центральный осциллятор взаимодействует с α -м осциллятором окружения с константой связи C_{α} . Форма входящих в гамильтониан (12) членов взаимодействия исключает обусловленную взаимодействием перенормировку частоты Ω .

Сравнительно простая модель (12), как известно, допускает детальное описание свойств находящегося под воздействием термостата осциллятора с затуханием [26, 30, 33, 37, 39, 40]. В частности, квантовые уравнения движения после исключения \hat{q}_{α} из уравнения для \hat{Q} , квантового статистического усреднения и преобразования Фурье сводятся к виду

$$\begin{aligned} M [(\Omega^2 - \omega^2) - i\omega\gamma(\omega)] Q(\omega) = \\ = f_{ext,Q}(\omega) + \sum_{\alpha=1}^N C_{\alpha} \chi_{\alpha}(\omega) f_{ext,\alpha}(\omega), \end{aligned} \quad (13)$$

$$m_{\alpha}(\omega_{\alpha}^2 - \omega^2) q_{\alpha}(\omega) - C_{\alpha} Q(\omega) = f_{ext,\alpha}(\omega). \quad (14)$$

Из уравнений (13), (14) вытекает

$$\chi_{QQ}(\omega) = \chi_Q(\omega), \quad (15)$$

$$\chi_{Q\alpha}(\omega) = \chi_{\alpha Q}(\omega) = C_{\alpha} \chi_Q(\omega) \chi_{\alpha}(\omega), \quad (16)$$

$$\chi_{\alpha\alpha}(\omega) = \chi_{\alpha}(\omega) \left(1 + C_{\alpha}^2 \chi_Q(\omega) \chi_{\alpha}(\omega) \right), \quad (17)$$

$$\chi_{\alpha\delta}(\omega) = C_{\alpha} C_{\delta} \chi_Q(\omega) \chi_{\alpha}(\omega) \chi_{\delta}(\omega), \quad \alpha \neq \delta, \quad (18)$$

где $\chi_Q(\omega)$ и $\chi_{\alpha}(\omega)$ определены в (10) и (11).

Как видно из выражений (4)–(7), (15)–(18) и (10), (11), рассматриваемые корреляционные функции содержат единственную величину $\gamma(\omega)$, конкретный вид которой определяется гамильтонианом (12):

$$i\omega M\gamma(\omega) = \sum_{\alpha=1}^N C_{\alpha}^2 [\chi_{\alpha}(\omega) - \chi_{\alpha}(0)], \quad (19)$$

и оказывается связан с так называемой спектральной плотностью взаимодействия

$$J(\omega) = \theta(\omega) \sum_{\alpha=1}^N C_{\alpha}^2 \chi_{\alpha}''(\omega), \quad (20)$$

где $\theta(\omega)$ — единичная ступенчатая функция, а двойной штрих у χ обозначает взятие мнимой части.

Связь между функцией демпфирования $\gamma(\omega)$ и спектральной плотностью взаимодействия имеет вид

$$\gamma(\omega) = -\frac{2i\omega}{\pi M} \int_0^{\infty} \frac{J(\xi)d\xi}{\xi(\xi^2 - \omega^2 - i\omega\varepsilon)}, \quad \varepsilon \rightarrow +0. \quad (21)$$

Определенные в (19), (20) величины удовлетворяют соотношению (21) не только в случае использования выражения (11), но также и для любых допустимых зависящих от частоты восприимчивостей $\chi_{\alpha}(\omega)$. Для установления справедливости формулы (21) в общем случае следует подставить (19) и (20) в (21) и применить к выражениям $[\chi_{\alpha}(\omega) - \chi_{\alpha}(0)]/\omega^2$ под знаком суммирования в левой части получившегося равенства следующее соотношение Крамера–Кронига:

$$\chi'(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\xi \chi''(\xi)d\xi}{\xi^2 - \omega^2}. \quad (22)$$

3. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ПОТЕНЦИАЛЫ ОСЦИЛЛЯТОРА С ЗАТУХАНИЕМ

Обусловленный взаимодействием центрального осциллятора с термостатом вклад в свободную энергию можно сравнительно просто найти, если приравнять, следуя общим соотношениям статистической физики [53–56], производную свободной энергии по параметру взаимодействия соответствующей усредненной производной от гамильтониана с последующим интегрированием полученного равенства по параметру взаимодействия. Умножая с этой целью все константы связи C_{α} ($\alpha = 1, 2, \dots, N$) в гамильтониане (12) на один и тот же параметр λ ,

приходим к усредненной производной гамильтониана по λ :

$$\left\langle \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle_{\lambda} = - \sum_{\alpha=1}^N C_{\alpha} \times \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left((q_{\alpha} Q)_{\omega, \lambda} - \lambda C_{\alpha} \chi_{\alpha}(0) (Q^2)_{\omega, \lambda} \right). \quad (23)$$

Здесь $\langle \dots \rangle_{\lambda}$ и $(\dots)_{\omega, \lambda}$ означают соответственно усреднение по равновесному состоянию системы с гамильтонианом $\hat{H}(\lambda)$ и симметризованную спектральную плотность.

Так как восприимчивости осцилляторов термостата $\chi_{\alpha}(\omega)$ (11) не содержат C_{α} , они не зависят от параметра взаимодействия λ , в то время как функция демпфирования $\gamma(\omega, \lambda)$, как это следует из (19), проявляет квадратичную зависимость: $\gamma(\omega, \lambda) = \lambda^2 \gamma(\omega)$. Следовательно, зависимость функции отклика $\chi_Q(\omega, \lambda)$ от этого параметра получается после подстановки в формулу (10) величины $\lambda^2 \gamma(\omega)$ вместо $\gamma(\omega)$.

Применяя теперь флуктуационно-диссипационные соотношения (4), (5) и учитывая (15), (16), выражаем квадратичные и билинейные по положениям операторов спектральные плотности в (23) через соответствующие функции отклика и получаем свободную энергию в виде

$$\begin{aligned} \Delta_{\lambda} F &= F(\lambda=1) - F(\lambda=0) = \int_0^1 d\lambda \left\langle \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle_{\lambda} = \\ &= - \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \hbar \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T} \int_0^1 \frac{i\omega \lambda d\lambda \gamma(\omega)}{(\Omega^2 - \omega^2) - i\omega \lambda^2 \gamma(\omega)} = \\ &= \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{4\pi} \hbar \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T} \times \\ &\times \ln \frac{\Omega^2 - \omega^2 - i\omega \gamma(\omega)}{\Omega^2 - \omega^2 - i\omega \varepsilon}, \quad \varepsilon \rightarrow +0. \quad (24) \end{aligned}$$

При учете аналитических свойств функций отклика в верхней полуплоскости комплексной частоты формула (24) преобразуется к следующему выражению для свободной энергии:

$$\Delta_{\lambda} F = F - F_0 = T \sum_{n=0}^{\infty} \ln \frac{\Omega^2 + \omega_n^2 + \omega_n \gamma(i\omega_n)}{\Omega^2 + \omega_n^2}. \quad (25)$$

Здесь $\omega_n = 2\pi nT/\hbar$ — мацубаровская частота, а штрих у знака суммирования означает, что член с $n = 0$ берется с половинным весом. При получении

выражения (25) учитывалось условие $\gamma(\omega) \rightarrow 0$ при $\omega \rightarrow \infty$, которое должно выполняться в реальных системах.

Хотя член с $n = 0$ в (25) обращается в нуль, его удобно оставить для сравнения с аналогичным выражением, которое используется в более общем случае. Равенство нулю обусловленных взаимодействием эффектов в классическом пределе является специфическим свойством моделей типа Цванцига–Калдейры–Леггетта, описывающих системы с одной степенью свободы. Это происходит, в частности, из-за отсутствия в модели вызванной взаимодействием перенормировки частоты осциллятора Ω .

Обусловленная взаимодействием часть $\Delta_\lambda F$ свободной энергии центрального осциллятора (25) представляет собой разность свободных энергий полной системы, взятых с учетом и без учета взаимодействия осциллятора с окружением. Свободная энергия F осциллятора с затуханием как открытой системы, взаимодействующей с термостатом, получается из выражения (25) добавлением к его правой части членов, которые не зависят от констант связи и при отсутствии взаимодействия обеспечивают совпадение величины F со свободной энергией свободного осциллятора

$$T \ln \left(2 \operatorname{sh} \frac{\hbar \Omega}{2T} \right) = T \ln \left[\frac{\hbar \Omega}{T} \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{\Omega^2}{\omega_n^2} \right) \right].$$

Таким образом, исходя из (25), приходим к следующей свободной энергии осциллятора с затуханием:

$$F = T \ln \left[\frac{\hbar \Omega}{T} \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{\Omega^2}{\omega_n^2} + \frac{\gamma(i\omega_n)}{\omega_n} \right) \right]. \quad (26)$$

Свободная энергия открытой системы может быть представлена в виде $F = -T \ln Z(T)$, где Z — приведенная статистическая сумма, т. е. отношение статистических сумм полной системы и невозмущенного резервуара. Исходя из этого соотношения, из (26) приходим к хорошо известному выражению для приведенной статистической суммы линейного квантового осциллятора с затуханием [26, 40]:

$$Z(T) = \frac{T}{\hbar \Omega} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{\omega_n^2}{\Omega^2 + \omega_n^2 + \omega_n \gamma(i\omega_n)}. \quad (27)$$

Выражение для внутренней энергии осциллятора с затуханием следует из (26) при учете стандартного соотношения $E = -T^2 \partial(F(T)/T) / \partial T$:

$$E = T \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2\Omega^2 + \omega_n \gamma(i\omega_n) - \omega_n^2 \frac{d\gamma(i\omega_n)}{d\omega_n}}{\Omega^2 + \omega_n^2 + \omega_n \gamma(i\omega_n)}. \quad (28)$$

Формула (26) для свободной энергии не содержит производной по частоте от функции демпфирования, поскольку параметр взаимодействия в (23), (24) считался изменяющимся при фиксированной температуре и, следовательно, при фиксированных мацубаровских частотах. С другой стороны, выражения для таких термодинамических потенциалов, которым отвечают процессы с изменяющейся температурой, с неизбежностью должны содержать производные по частоте от функции демпфирования, взятые при мацубаровских частотах, примером чему служит выражение (28).

Внутренняя энергия (28) совпадает с результатом, полученным ранее на основе предварительно найденной приведенной статистической суммы [16, 40]. Наличие производной по частоте от функции демпфирования в (28), как известно, отвечает наличию температурной зависимости у гамильтониана средней силы [26].

4. СВЯЗЬ С РЕЗУЛЬТАТАМИ ДЗЯЛОШИНСКОГО И ПИТАЕВСКОГО

В цели этого и следующего разделов входит сравнение основных формул для термодинамических потенциалов, полученных в двух рассматриваемых теориях, и установление идентичности этих формул, возникающей при использовании сходных величин. В этом разделе рассматривается один из основных, свободных от модельных предположений, результатов, полученных Дзялошинским и Питаевским [2] в рамках развитой ими общей теории сил Казимира и Ван дер Ваальса. Речь идет о вариации обусловленной взаимодействием свободной энергии длинноволнового электромагнитного флуктуационного поля в неоднородной конденсированной среде.

Линейный электромагнитный отклик конденсированной среды, фигурирующий в общих выражениях теории, описывается поляризационным оператором \mathcal{P} , зависящим от мацубаровских частот и связанным с диэлектрической функцией соотношением

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{ik}(\omega_n, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \\ &= \frac{\omega_n^2}{\hbar c^2} [\epsilon_{ik}(i\omega_n, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \delta_{ik} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)]. \quad (29) \end{aligned}$$

Соответствующая вариация свободной энергии при малом изменении поляризационного оператора $\delta \mathcal{P}$, как было найдено, имеет вид [2]

$$\delta F = -\frac{T}{4\pi} \times \sum_{n=0}^{\infty} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \mathcal{D}_{ik}(\omega_n, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \delta \mathcal{P}_{ki}(\omega_n, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \quad (30)$$

Здесь $\mathcal{D}_{ik}(\omega_n, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — температурная гриновская функция длинноволнового электромагнитного поля в среде. Соответствующая запаздывающая гриновская функция связана с равновесными корреляциями квантовых микроскопических потенциалов в среде при калибровочном условии равенства нулю скалярного потенциала.

Рассмотрим теперь вариацию обусловленной взаимодействием свободной энергии (25) (или (26)) при малом изменении функции демпфирования:

$$\delta F = -T \sum_{n=0}^{\infty} \chi_Q(i\omega_n) [-M\omega_n \delta\gamma(i\omega_n)]. \quad (31)$$

Здесь было использовано выражение (10) для функции отклика осциллятора с затуханием. Уравнение (31) справедливо при любой возможной частотной зависимости функции демпфирования.

Близкая аналогия между формулами (30) и (31) допускает детальное описание. В то время как функция Грина в (30) связана с корреляциями флуктуирующих микроскопических электромагнитных потенциалов в среде, функция отклика χ_Q описывает корреляции флуктуаций положения центрального осциллятора Q (см. соотношения (4) и (15)). Спектральная плотность электромагнитных сил Ланжевена в среде связана, как известно, с поляризационным оператором, в то время как величина $i\omega M\gamma(\omega)$ связана со спектральной плотностью сил Ланжевена в случае осциллятора с затуханием.

Далее, для осциллятора с затуханием, как видно из выражений (13) и (10), функция $\chi_Q(\omega)$ описывает линейный отклик координаты Q на внешнюю силу $f_{ext,Q}(\omega)$, в то время как соотношение между силой трения и координатой Q есть

$$f_{friction}(\omega) = i\omega M\gamma(\omega)Q(\omega).$$

Аналогично, в теории сил Казимира и Ван дер Ваальса величина $-(1/\hbar c)\mathcal{D}$, как известно, играет роль обобщенной нелокальной матричной функции отклика для электромагнитных потенциалов под воздействием внешних токов, в то время как $-(c\hbar/4\pi)\mathcal{P}$ входит в соотношение между плотностью тока и электромагнитными потенциалами в средах. Группируя рассматриваемые величины вместе с указанными коэффициентами, в обоих выражениях (30) и

(31) получаем одинаковые множители перед знаками суммирования.

Наконец, взаимодействие с длинноволновым электромагнитным полем рассматривается в общей теории как взаимодействие со сравнительно слабым полем в том смысле, что вклад от такого поля в диэлектрическую проницаемость конденсированной среды пренебрежимо мал. Поэтому поляризационный оператор (29) входит в выражения теории умноженным только на квадрат соответствующей константы связи. Аналогично, восприимчивости отдельных осцилляторов в термостате предполагаются не зависящими от соответствующих констант связи, что приводит к квадратичной зависимости функции демпфирования $\gamma(\omega)$ от параметра взаимодействия.

5. СВЯЗЬ С ВКЛАДОМ СИЛ КАЗИМИРА И ВАН ДЕР ВААЛЬСА В ПОЛНУЮ СВОБОДНУЮ ЭНЕРГИЮ

Возвращаясь к выражению (25) для свободной энергии, рассмотрим две функции,

$$D(\omega) = \Omega^2 - \omega^2 - i\omega\gamma(\omega),$$

$$D_0(\omega) = \Omega^2 - \omega^2 - i\omega\varepsilon \quad (\varepsilon \rightarrow +0),$$

взятые в (25) при мнимых мацубаровских частотах $\omega \rightarrow i\omega_n$. Корни дисперсионной функции $D(\omega)$, т. е. решения дисперсионного уравнения

$$D(\omega) = \Omega^2 - \omega^2 - i\omega\gamma(\omega) = 0, \quad (32)$$

представляют собой комплексные собственные частоты осциллятора с затуханием. В то же время уравнение $D_0(\omega) = 0$ определяет собственные частоты свободного осциллятора, т. е. при отсутствии его взаимодействия с термостатом.

Таким образом, формула (25) принимает вид

$$\Delta_\lambda F = F - F_0 = T \sum_{n=0}^{\infty} \ln \frac{D(i\omega_n)}{D_0(i\omega_n)}. \quad (33)$$

Следует отметить, что выражение (33) представляет собой основную формулу для свободной энергии в общей теории сил Казимира и Ван дер Ваальса [50]. Эту формулу можно получить в рамках общей теории, используя, в частности, метод интегрирования по параметру взаимодействия [53, 54] аналогично тому, как это было сделано в разд. 3 для задачи об осцилляторе с затуханием.

Поскольку соотношения (30) и (31) тесно связаны друг с другом, а выражение (25) совпадает с (33), приходим к заключению, что общая теория сил Казимира и Ван дер Ваальса описывает обусловленную взаимодействием часть свободной энергии осциллятора с затуханием.

Ввиду того что на бесконечно далеких расстояниях взаимодействие обращается в нуль, при изучении взаимодействия Казимира и Ван дер Ваальса между телами параметр взаимодействия λ можно в конечном счете связать с расстоянием между ними. В этом случае свободные энергии F и F_0 и дисперсионные функции $D(\omega)$ и $D_0(\omega)$ в (33) отвечают соответственно расстоянию l между телами и случаю, когда тела находятся очень далеко друг от друга. Следовательно, в пределе $l \rightarrow \infty$ имеем $D(\omega)/D_0(\omega) \rightarrow 1$. Если функция $D(\omega)$ есть произведение нескольких дисперсионных функций, то не зависящие от l множители сокращаются и не вносят вклада в (33). Остающееся отношение двух функций обычно рассматривают как нормированную дисперсионную функцию, которая задает зависящий от расстояния спектр собственных мод в системе.

Далее, собственные моды в системе макроскопических тел различной геометрии могут зависеть от переменных, имеющих непрерывный или квазинепрерывный спектр значений, таких как компоненты волнового вектора. Выделяя эти непрерывные переменные и обозначая их буквой β , приходим с помощью соотношения (33) к следующей форме записи для обусловленной взаимодействием Казимира и Ван дер Ваальса части свободной энергии:

$$\Delta_\lambda F = F - F_0 = T \sum_{n=0}^{\infty} \int \rho(\beta) d\beta \ln D(\beta, i\omega_n), \quad (34)$$

где $\rho(\beta)$ — плотность состояний.

Формулы (25) или (26) для свободной энергии осциллятора с затуханием не обсуждались в литературе, несмотря на их очевидную связь с хорошо известной приведенной статистической суммой (27). Вместо этого обычно используется модифицированная форма этого результата, которая получается из формулы (25) ее преобразованием к интегрированию вдоль вещественной оси частот (ср. (24)) с использованием равенства $D(\beta, -\omega) = D^*(\beta, \omega)$ и последующим интегрированием по частям. Это приводит к следующему эквивалентному формуле (25) (и (33)) выражению:

$$\Delta_\lambda F = \int_0^\infty T \ln \left(2 \operatorname{sh} \frac{\hbar\omega}{2T} \right) \Delta_\lambda \rho(\omega) d\omega, \quad (35)$$

$$\Delta_\lambda \rho(\omega) = \rho - \rho_0 = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{\partial}{\partial \omega} \ln \frac{D(\omega)}{D_0(\omega)}. \quad (36)$$

Появление здесь частной производной по частоте вместо полной производной связано с возможным появлением дополнительных переменных, от которых может зависеть дисперсионная функция. Такая возможность обсуждается в конце данного раздела, а также в разд. 7.

В отличие от теории взаимодействия Казимира и Ван дер Ваальса, в рамках которой рассматривается, как правило, только обусловленная взаимодействием часть свободной энергии, простая модель осциллятора с затуханием позволяет описать свободную энергию (26) взаимодействующего с окружением осциллятора с затуханием. Переписывая (26) в форме, аналогичной (35), (36), и используя определение (32) для функции $D(\omega)$, получаем

$$F = \int_0^\infty T \ln \left(2 \operatorname{sh} \frac{\hbar\omega}{2T} \right) \rho(\omega) d\omega, \quad (37)$$

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{\partial}{\partial \omega} \ln (MD(\omega)). \quad (38)$$

Вследствие вытекающего из (10) и (32) равенства $MD(\omega) = \chi_Q^{-1}(\omega)$, из соотношений (37), (38) в рамках исходной модели осциллятора с затуханием находим

$$F = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty T \ln \left(2 \operatorname{sh} \frac{\hbar\omega}{2T} \right) \operatorname{Im} \frac{d \ln \chi_Q(\omega)}{d\omega} d\omega, \quad (39)$$

что в точности совпадает с результатом для свободной энергии, используемым в теории осциллятора, билинейно взаимодействующего с термостатом [12–15, 17, 26].

Аналогично выражениям (35), (36), обусловленную взаимодействием свободную энергию (34) в общей теории сил Казимира и Ван дер Ваальса также можно представить в виде

$$\Delta_\lambda F = \int_0^\infty T \ln \left(2 \operatorname{sh} \frac{\hbar\omega}{2T} \right) \Delta_\lambda \rho(\omega) d\omega, \quad (40)$$

$$\Delta_\lambda \rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{\partial}{\partial \omega} \int \rho(\beta) d\beta \ln D(\beta, \omega). \quad (41)$$

Вообще говоря, любая из формул (26), (39) может использоваться для описания свободной энергии осциллятора с затуханием. Поскольку выражение (26) имеет более простой вид и не содержит

производной по частоте от восприимчивости осциллятора, форма записи свободной энергии (26) или (33) кажется более предпочтительной по сравнению с (39) или (37), (38). Это тем более верно в отношении анализа более сложных задач, включая типичные задачи теории сил Казимира и Ван дер Ваальса, где запись свободной энергии в виде (34) имеет ряд значительных преимуществ по сравнению с (40), (41).

Вдоль вещественной оси частот проницаемости принимают, как известно, комплексные значения и могут проявлять сложное поведение. Напротив, они принимают вещественные значения и показывают сравнительно простое монотонное поведение на верхней мнимой полуоси частот. В этом состояла аргументация Лифшица [1] при преобразовании его основного результата, на начальном этапе включающего интегрирование по вещественным частотам, к форме, включающей суммирование по мацубаровским частотам вдоль верхней мнимой полуоси частот²⁾.

К тому же производные проницаемостей по частоте, возникающие после применения (41) к неоднородным конденсированным системам, могут драматически усложнить вид результата по сравнению с его формой в (34). Взяв в качестве примера хорошо известные дисперсионные функции для собственных мод в задаче Лифшица, нетрудно получить конкретные громоздкие выражения, содержащие производные от проницаемостей по частоте под знаком интегрирования вдоль полуоси вещественных частот. Из всего сказанного видно, что представление свободной энергии в виде (34) намного более предпочтительно по сравнению с (40), (41).

Заметим, что величина $\rho(\omega)$ фигурирует в (37) как эффективная спектральная плотность возбуждений. Для сводящейся в пределе пренебрежимо малой диссипации к дельта-функции величины $\rho(\omega)$ из формулы (37) получается свободная энергия свободного осциллятора. В то же время величина $\Delta_\lambda \rho(\omega)$ в (36) и (41) есть в лучшем случае разность между эффективными спектральными плотностями системы при наличии и отсутствии взаимодействия.

Далее, выражения для различных термодинамических потенциалов будут содержать одну и ту же величину $\Delta_\lambda \rho(\omega)$ только при отсутствии ее температурной зависимости. Согласно общей теории сил Казимира и Ван дер Ваальса, формулы (34) и (40), (41) для свободной энергии сохраняют свой вид в случае зависящих от температуры проницаемостей,

что приводит к температурной зависимости величины $\Delta_\lambda \rho(\omega, T)$. При этом выражение для внутренней энергии, аналогичное по форме свободной энергии (40), (41), будет содержать другую величину $\Delta_\lambda \rho_E(\omega, T) \neq \Delta_\lambda \rho(\omega, T)$:

$$\Delta_\lambda E = \int_0^\infty \frac{\hbar\omega}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T} \Delta_\lambda \rho_E(\omega, T) d\omega, \quad (42)$$

$$\Delta_\lambda \rho_E(\omega, T) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{\partial}{\partial \omega} + \frac{T}{\omega} \frac{\partial}{\partial T} \right) \times \int \rho(\beta) d\beta \ln D(\beta, \omega, T). \quad (43)$$

Для билинейной связи центрального осциллятора с термостатом функция демпфирования осциллятора в модели Цванцига – Калдейры – Леггетта, как известно, не зависит от температуры. Расширение этой модели, приводящее к тем же формулам (25), (26), (33) и (35)–(39), но при наличии температурной зависимости функции демпфирования $\gamma(\omega, T)$, индуцированной билинейной связью с окружением, будет рассмотрено в разд. 7.

6. ПАРНЫЕ И МНОГОЧАСТИЧНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ ЧАСТЯМИ ТЕРМОСТАТА

Выявление близкой аналогии между двумя теориями позволяет рассмотреть вопрос о существовании в модели осциллятора с затуханием аналога, который бы соответствовал, по крайней мере с формальной точки зрения, взаимодействию Казимира и Ван дер Ваальса между макроскопическими телами. В этом разделе будет показано, что таким аналогом является взаимодействие между разными частями термостата.

Хотя составляющие части термостата непосредственно друг на друга не воздействуют, между ними имеется эффективное не прямое взаимодействие через их связь с центральным осциллятором. Вследствие многочастичного происхождения взаимодействия, свободная энергия (25) и другие термодинамические потенциалы неаддитивны по отношению к вкладам отдельных составляющих термостата, в то время как функция демпфирования (19) и спектральная плотность взаимодействия (20) представляют собой аддитивные величины.

Парные и трехчастичные вклады в свободную энергию вытекают из соотношения (25) в пределе слабой связи. Рассмотрим термостат, подразделен-

²⁾ Это было сделано Лифшицем до появления статьи Мацубара.

ный на некоторое число различных частей, чему отвечает функция демпфирования $\gamma = \sum_{n=1}^p \gamma_n$. Если приближение слабой связи применимо к взаимодействию центрального осциллятора с термостатом в целом, то можно разложить (25) по степеням γ и представить свободную энергию в виде

$$F = \sum_n F_n + \sum_{n < m} F_{nm} + \sum_{n < m < l} F_{n,m,l} + \dots$$

Здесь величина F_n описывает индивидуальный вклад n -й части термостата в свободную энергию, содержащий только параметр γ_n и его степени.

Парное взаимодействие приводит к парному члену в свободной энергии, и основной вклад от каждой пары отвечает притяжению между частями:

$$F_{12} = -T \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\omega_n^2 \gamma_1(i\omega_n) \gamma_2(i\omega_n)}{(\Omega^2 + \omega_n^2)^2}. \quad (44)$$

Аналогично, основной трехчастичный вклад в свободную энергию от комбинации трех различных частей есть

$$F_{123} = 2T \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\omega_n^3 \gamma_1(i\omega_n) \gamma_2(i\omega_n) \gamma_3(i\omega_n)}{(\Omega^2 + \omega_n^2)^3}. \quad (45)$$

Суммы по мацубаровским частотам в (44) и (45) сходятся даже в простейшем случае омического режима, когда они могут быть выражены соответственно через элементарные и специальные функции. Так, предполагая $\gamma_{1,2}$ не зависящими от частоты, для парного вклада находим

$$F_{12} = -\frac{2\hbar\gamma_1\gamma_2}{\Omega} \left[\operatorname{cth} \frac{\hbar\Omega}{2T} - \frac{\hbar\Omega}{2T} \operatorname{sh}^{-2} \frac{\hbar\Omega}{2T} \right]. \quad (46)$$

Обращение взаимодействия в нуль в пределе высоких температур, не имеющее места в общем случае, связано здесь с уже упоминавшимся в разд. 3 специфическим свойством модели Цванцига–Калдейры–Леггетта.

7. ОСЦИЛЛЯТОР С ЗАТУХАНИЕМ, ЛИНЕЙНО ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИЙ С ДИССИПАТИВНЫМ ТЕРМОСТАТОМ

Большое число свободных осцилляторов с бесконечно малыми функциями демпфирования, формирующих спектральную структуру термостата в

модели осциллятора с затуханием, можно рассматривать как собственные моды термостата. Соответствующие собственные частоты вещественны, поскольку предполагается, что при отсутствии влияния центрального осциллятора термостат является замкнутой системой.

Связь центрального осциллятора с отдельной модой термостата считается слабой, что объясняет очень слабое возмущение состояния составляющих термостат мод и согласуется с билинейной формой гамильтониана взаимодействия. В то же время центральный осциллятор может испытывать значительное диссипативное влияние, коллективно создаваемое большим количеством мод термостата. При этом функция демпфирования $\gamma(\omega)$ центрального осциллятора не обязательно мала, а ее частотная зависимость может изменяться в широких пределах в соответствии с формулами (19)–(21), где спектральная плотность взаимодействия изменяется вместе со спектральным распределением вещественных собственных частот термостата [22, 23, 33, 37, 40].

Такой подход широко и эффективно используется для изучения задач, касающихся, в основном, возникновения диссипации и связанных с ней эффектов в квантовых динамических системах. С другой стороны, нельзя исключить возможность того, что взаимодействующие с центральным осциллятором моды не исчерпывают все степени свободы термостата. Дополнительные внутренние каналы термостата, находящиеся в контакте с его основными модами, но непосредственно не связанные с центральным осциллятором, могут приводить к формированию зависящих от частоты и температуры диссипативных восприимчивостей $\chi_\alpha(\omega, T)$, заменяющих в этом случае рассматривавшиеся в исходной модели величины с бесконечно малыми функциями демпфирования. Влияние центрального осциллятора на восприимчивости составляющих элементов термостата, предполагаемое по-прежнему пренебрежимо малым, следует в этом случае сравнивать с соответствующими вкладами от дополнительных каналов, которые могут доминировать.

Без конкретизации части полного гамильтониана, связанной с дополнительными каналами, рассматриваемая расширенная модель, вообще говоря, не предназначена для изучения квантовой динамики полной системы. Однако, как показано в этом разделе, обусловленные взаимодействием термодинамические величины осциллятора с затуханием могут быть описаны в расширенных рамках аналогично рассмотренному в разд. 3 случаю. Ключевым здесь является то обстоятельство, что гамильтониан

взаимодействия центрального осциллятора с термостатом, необходимый для нахождения соответствующих термодинамических величин, в расширенной модели остается неизменным и может быть выделен из полного расширенного гамильтониана взятием производной по выбранному параметру взаимодействия.

Таким образом, представим полный гамильтониан в виде

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\Omega^2\hat{Q}^2 - \hat{Q}f_{ext,Q} - \sum_{\alpha=1}^N \hat{q}_\alpha f_{ext,\alpha} + \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{2\chi_\alpha(0,T)} \left(\hat{q}_\alpha - C_\alpha \chi_\alpha(0,T)\hat{Q} \right)^2 + \hat{H}, \quad (47)$$

где вид слагаемого \hat{H} не фиксирован, за исключением того, что он не содержит ни относящихся к центральному осциллятору операторов \hat{Q} , \hat{P} , ни констант связи C_α .

В соответствии с билинейной формой взаимодействия и определением линейных восприимчивостей, динамическое уравнение для $\hat{q}_\alpha(t)$, вытекающее из гамильтониана (47) после использования преобразования Фурье, статистического усреднения и исключения дополнительных степеней свободы, имеет вид

$$\chi_\alpha^{-1}(\omega, T)q_\alpha(\omega) = C_\alpha Q(\omega) + f_{ext,\alpha}(\omega). \quad (48)$$

Уравнение (48) отличается от (14) только вследствие различия между (11) и диссипативной восприимчивостью α -й составляющей термостата $\chi_\alpha(\omega, T)$.

Используя выражения (47), (48) вместо (12), (14), а в остальном следуя разд. 2, приходим к тем же равенствам (1)–(3) и флуктуационно-диссипационным соотношениям (4)–(7), а также к (9), (10) для

центрального осциллятора с затуханием. Также заключаем, что равенства (13), (15), (16) и (19)–(21) будут в рассматриваемом случае выполняться после подстановки в них модифицированных восприимчивостей термостата $\chi_\alpha(\omega, T)$ вместо исходных (11).

Переходя далее к выводу разд. 3, умножаем константы связи C_α в гамильтониане (47) на один и тот же параметр взаимодействия λ . Это не приводит к изменениям восприимчивостей термостата $\chi_\alpha(\omega, T)$, не подверженных заметному влиянию центрального осциллятора и, следовательно, не зависящих от λ . Ввиду выполнения равенства (19), функция демпфирования центрального осциллятора по-прежнему является квадратичной функцией λ : $\gamma(\omega, T, \lambda) = \lambda^2 \gamma(\omega, T)$. Таким образом, после получения такого же выражения (23) для производной модифицированного гамильтониана (47) по параметру λ и использования соотношений (4), (5) и (15), (16) можно провести интегрирование по параметру взаимодействия и получить те же самые выражения (24)–(26), (33) для обусловленной взаимодействием части свободной энергии осциллятора с затуханием, а также и формулу (27) для приведенной статистической суммы.

Свободная энергия в любой из форм записи (25), (26), (33), (37)–(39) становится в рамках расширенного подхода применимой к случаю, в котором функция демпфирования $\gamma(\omega, T)$ осциллятора с затуханием зависит, в любой допустимой форме, не только от частоты, но также и от температуры, несмотря на билинейную форму взаимодействия центрального осциллятора с термостатом. В этих условиях выражение (28) для внутренней энергии должно быть модифицировано:

$$E = T \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2\Omega^2 + \omega_n \gamma(i\omega_n) - \omega_n^2 \left(\frac{\partial}{\partial \omega_n} + \frac{T}{\omega_n} \frac{\partial}{\partial T} \right) \gamma(i\omega_n, T)}{\Omega^2 + \omega_n^2 + \omega_n \gamma(i\omega_n, T)}. \quad (49)$$

Выражение (49) можно также представить в виде

$$E = \int_0^{\infty} \frac{\hbar\omega}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T} \rho_E(\omega, T) d\omega, \quad (50)$$

$$\rho_E(\omega, T) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{\partial}{\partial \omega} + \frac{T}{\omega} \frac{\partial}{\partial T} \right) \times \ln(MD(\omega, T)), \quad (51)$$

который согласуется с (42), (43).

Представленная в этом разделе расширенная модель показывает, что термодинамику квантового осциллятора с затуханием, билинейно взаимодействующего с термостатом, можно теоретически описать без использования модельных предположений, упрощающих реальную структуру термостата. Это позволяет, в частности, рассматривать в рамках такой модели RCL-контур, металлическое сопротивление которого обусловлено электрон-фононным взаимодействием, рассеянием электронов на примесях и другими физическими процессами в металле. Вклю-

чение свободных от модельных представлений внутренних процессов в термостате в модель осциллятора с затуханием было здесь проведено по аналогии с общей теорией сил Казимира и Ван дер Ваальса, применимой к реальным конденсированным системам с диэлектрическими проницаемостями общего вида.

Приведенное выше рассмотрение также показывает внутреннюю несогласованность недавней критики общей теории сил Казимира и Ван дер Ваальса, которая основывается на отсутствии в теории явного выражения для полного гамильтониана системы квантового электромагнитного поля в конденсированных средах [57–61]. Заключение, сделанное в работах [57–61], состоит в том, что такая теория не может привести к последовательному микроскопическому квантовому описанию термодинамических величин квантовых систем с взаимодействием.

Рассмотренная здесь расширенная модель представляет собой сравнительно простой пример, показывающий ошибочность этой критики. Уже из этого примера видно, что для нахождения обусловленной взаимодействием части термодинамических величин билинейно связанной с термостатом квантовой системы нет необходимости в знании части полного гамильтониана, описывающей термостат и не содержащей соответствующих параметров взаимодействия. Так как флуктуационно-диссипационные соотношения идентифицируют функции отклика исходя из их микроскопических выражений, данный подход обоснован с микроскопической точки зрения. При этом линейные функции отклика термостата можно далее рассматривать как известные из других теоретических или экспериментальных исследований. Это позволяет отделить рассматриваемую задачу от полного динамического описания квантовой системы в целом.

Следует также упомянуть о ряде моделей поглощающих конденсированных сред, взаимодействующих с квантовым электромагнитным полем, которые используются, в частности, для изучения взаимодействия Казимира и Ван дер Ваальса [57, 58, 60–74]. Эти модели включают в рассмотрение линейно поляризуемые осцилляторы (или состоящую из микроскопических гармонических полей среду), которые взаимодействуют с электромагнитным полем, как в ранних работах [75, 76], и, в дополнение к этому, с осцилляторами термостата [62, 77]. Последнее приводит к диссипативным эффектам в системе, аналогичным рассматриваемым в этой статье в рамках модели осциллятора с затуханием. Каноническое квантование электромагнитного по-

ля, проведенное Хаттнером и Барнеттом [77], после диагонализации полного гамильтониана рассматриваемой модели методом Фано [78] привело к квантовым флуктуациям тока, полностью совместимым со всеми флуктуационно-диссипационными соотношениями. Кроме того, выбор функциональных параметров гамильтониана взаимодействия позволил имитировать произвольную зависящую от частоты диссипативную диэлектрическую функцию, удовлетворяющую соотношениям Крамерса – Кронига. Получившаяся в результате макроскопическая квантовая электродинамика поглощающих диспергирующих сред используется для изучения квантовых эффектов взаимодействия электромагнитного поля в конденсированных телах и их окрестностях [59, 65, 77, 79–94].

Поскольку полученные в рамках модели работы [77] результаты в итоге выражаются через имеющую произвольную частотную зависимость диэлектрическую функцию системы, можно было бы ожидать, что эти результаты имеют более общий характер, чем лежащий в основе модели гамильтониан. Это означало бы, однако, что конечные результаты выражаются через диэлектрические проницаемости сред в общем случае при наличии диссипации. Хотя данное предположение справедливо в отношении теории взаимодействия Казимира и Ван дер Ваальса [2], в общем случае оно не было подтверждено [95] (см. также [96]). Кроме того, в отличие от частотной зависимости, зависимость диэлектрических проницаемостей от температуры не воспроизводится в рамках обсуждаемого микроскопического модельного гамильтониана, содержащего только квадратичные и билинейные операторные члены при отсутствии зависящих от температуры параметров.

Таким образом, результаты для дисперсионных взаимодействий, полученные в рамках модели поглощающих сред, могут быть выражены через диэлектрические проницаемости материалов и должны находиться в согласии с общей теорией сил Казимира и Ван дер Ваальса [2, 4] в рамках области ее применимости. Сказанное, однако, не имеет отношения к результатам этой статьи, в которой модель осциллятора с затуханием представляет открытую малую квантовую систему, а не составную часть модели диссипативных диэлектрических проницаемостей конденсированных сред. В статье была выявлена аналогия между моделью осциллятора с затуханием в ее исходной форме, в которой центральный осциллятор билинейно взаимодействует с осцилляторами термостата, и общей теорией взаимодействия Казимира и Ван дер Ваальса, свободной от

модельных предположений в ее рассмотрении длинноволнового флуктуационного квантового электромагнитного поля, взаимодействующего с конденсированными телами.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе показано, что равновесная термодинамика осциллятора с затуханием, билинейно взаимодействующего с термостатом, изученная ранее в рамках модели Цванцига – Калдейры – Леггетта, может быть описана результатами общей теории сил Казимира и Ван дер Ваальса. Найденное значительное перекрытие между двумя теориями детально изучено. Представлена модифицированная модель, допускающая частотную и температурную зависимости функции демпфирования центрального осциллятора, и получены соответствующие модифицированные термодинамические потенциалы.

Финансирование. Работа выполнена в рамках Государственного задания ИФТТ РАН Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013–2020 гг.

ЛИТЕРАТУРА

1. Е. М. Лифшиц, ЖЭТФ **29**, 94 (1955) [E. M. Lifshitz, Sov. Phys. JETP **2**, 73 (1956)].
2. И. Е. Дзялошинский, Л. П. Питаевский, ЖЭТФ **36**, 1797 (1959) [I. E. Dzyaloshinskii and L. P. Pitaevskii, Sov. Phys. JETP **9**, 1282 (1959)].
3. И. Е. Дзялошинский, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, ЖЭТФ **37**, 229 (1959) [I. E. Dzyaloshinskii, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii, Sov. Phys. JETP **10**, 161 (1959)].
4. I. E. Dzyaloshinskii, E. M. Lifshitz, and L. P. Pitaevskii, Adv. Phys. **10**, 165 (1961).
5. S. K. Lamoreaux, Rep. Progr. Phys. **68**, 201 (2004).
6. V. A. Parsegian, *Van der Waals Forces: A Handbook for Biologists, Chemists, Engineers, and Physicists*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK (2006).
7. G. L. Klimchitskaya, U. Mohideen, and V. M. Mostepanenko, Rev. Mod. Phys. **81**, 1827 (2009).
8. M. Bordag, G. L. Klimchitskaya, U. Mohideen, and V. M. Mostepanenko, *Advances in the Casimir Effect*, Oxford Univ. Press, Oxford, UK (2009).
9. R. H. French, V. A. Parsegian, R. Podgornik, R. F. Rajter, A. Jagota, J. Luo, D. Asthagiri, M. K. Chaudhury, Y.-m. Chiang, S. Granick, S. Kalinin, M. Kardar, R. Kjellander, D. C. Langreth, J. Lewis, S. Lustig, D. Wesolowski, J. S. Wettlaufer, W.-Y. Ching, M. Finnis, F. Houlihan, O. A. von Lilienfeld, C. J. van Oss, and T. Zemb, Rev. Mod. Phys. **82**, 1887 (2010).
10. *Casimir Physics*, Lecture Notes in Physics, Vol. 834, ed. by D. Dalvit, P. Milonni, D. Roberts, and F. Rosa, Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg (2011).
11. L. M. Woods, D. A. R. Dalvit, A. Tkatchenko, P. Rodriguez-Lopez, A. W. Rodriguez, and R. Podgornik, Rev. Mod. Phys. **88**, 045003 (2016).
12. G. W. Ford, J. T. Lewis, and R. F. O'Connell, Phys. Rev. Lett. **55**, 2273 (1985).
13. G. Ford, J. Lewis, and R. O'Connell, Ann. of Phys. **185**, 270 (1988).
14. G. W. Ford, J. T. Lewis, and R. F. O'Connell, J. Stat. Phys. **53**, 439 (1988).
15. G. W. Ford and R. F. O'Connell, Physica E **29**, 82 (2005).
16. P. Hänggi and G.-L. Ingold, Acta Phys. Pol. B **37**, 1537 (2006).
17. G. W. Ford and R. F. O'Connell, Phys. Rev. B **75**, 134301 (2007).
18. C. Hörhammer and H. Büttner, J. Stat. Phys. **133**, 1161 (2008).
19. P. Hänggi, G.-L. Ingold, and P. Talkner, New J. Phys. **10**, 115008 (2008).
20. G.-L. Ingold, P. Hänggi, and P. Talkner, Phys. Rev. E **79**, 061105 (2009).
21. T. G. Philbin, New J. Phys. **14**, 083043 (2012).
22. B. Spreng, G.-L. Ingold, and U. Weiss, Europhys. Lett. **103**, 60007 (2013).
23. R. Adamietz, G.-L. Ingold, and U. Weiss, Eur. Phys. J. B **87**, 90 (2014).
24. T. G. Philbin and J. Anders, J. Phys. A **49**, 215303 (2016).
25. M. Kolář, A. Ryabov, and R. Filip, Sci. Rep. **9**, 10855 (2019).
26. P. Talkner and P. Hänggi, Rev. Mod. Phys. **92**, 041002 (2020).
27. В. Б. Магалинский, ЖЭТФ **36**, 1942 (1959) [V. B. Magalinskii, Sov. Phys. JETP **9**, 1381 (1959)].

28. G. W. Ford, M. Kac, and P. Mazur, *J. Math. Phys.* **6**, 504 (1965).
29. P. Ullersma, *Physica* **32**, 27, 56, 74, 90 (1966).
30. R. Zwanzig, *J. Stat. Phys.* **9**, 215 (1973).
31. A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 211 (1981).
32. A. Schmid, *J. Low Temp. Phys.* **49**, 609 (1982).
33. A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Ann. of Phys.* **149**, 374 (1983).
34. H. Grabert, U. Weiss, and P. Talkner, *Z. Phys. B* **55**, 87 (1984).
35. P. S. Riseborough, P. Hanggi, and U. Weiss, *Phys. Rev. A* **31**, 471 (1985).
36. G. W. Ford and M. Kac, *J. Stat. Phys.* **46**, 803 (1987).
37. H. Grabert, P. Schramm, and G.-L. Ingold, *Phys. Rep.* **168**, 115 (1988).
38. G. W. Ford, J. T. Lewis, and R. F. O'Connell, *Phys. Rev. A* **37**, 4419 (1988).
39. P. Hänggi and G.-L. Ingold, *Chaos* **15**, 026105 (2005).
40. U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems*, World Sci., Singapore (2012).
41. A. O. Caldeira, *An Introduction to Macroscopic Quantum Phenomena and Quantum Dissipation*, Cambridge Univ. Press, New York (2014).
42. A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, A. Garg, and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **59**, 1 (1987).
43. G.-L. Ingold, A. Lambrecht, and S. Reynaud, *Phys. Rev. E* **80**, 041113 (2009).
44. Ю. С. Бараш, В. Л. Гинзбург, *Письма ЖЭТФ* **15**, 567 (1972) [Yu. S. Barash and V. L. Ginzburg, *JETP Lett.* **15**, 403 (1972)].
45. C. H. Obcemea, *Int. J. Quant. Chem.* **31**, 113 (1987).
46. F. London, *Trans. Faraday Soc.* **33**, 8b (1937).
47. H. B. G. Casimir, *Proc. Kon. Nederland. Akad. Wetensch.* **51**, 793 (1948).
48. N. Van Kampen, B. Nijboer, and K. Schram, *Phys. Lett. A* **26**, 307 (1968).
49. B. W. Ninham, V. A. Parsegian, and G. H. Weiss, *J. Stat. Phys.* **2**, 323 (1970).
50. Ю. С. Бараш, В. Л. Гинзбург, *УФН* **116**, 5 (1975) [Y. S. Barash and V. L. Ginzburg, *Sov. Phys. Uspekhi* **18**, 305 (1975)].
51. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, Москва (1962).
52. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика. Часть 2. Теория конденсированного состояния*, Физматлит, Москва (2004).
53. Ю. С. Бараш, *Силы Ван дер Ваальса*, Наука, Москва (1988).
54. Y. S. Barash and V. L. Ginzburg, in *The Dielectric Function of Condensed Systems*, ed. by L. V. Keldysh, D. A. Kirzhnits, and A. A. Maradudin, Elsevier (1989), Ch. 6, p. 389.
55. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1976) [L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics*, Butterworth-Heinemann, Oxford (1980)].
56. А. А. Абрикосов, *Основы теории металлов*, Наука, Москва (1987).
57. F. S. S. Rosa, D. A. R. Dalvit, and P. W. Milonni, *Phys. Rev. A* **81**, 033812 (2010).
58. G. Barton, *New J. Phys.* **12**, 113045 (2010).
59. T. G. Philbin, *New J. Phys.* **12**, 123008 (2010).
60. F. S. S. Rosa, D. A. R. Dalvit, and P. W. Milonni, *Phys. Rev. A* **84**, 053813 (2011).
61. T. G. Philbin, *New J. Phys.* **13**, 063026 (2011).
62. D. Kupiszewska, *Phys. Rev. A* **46**, 2286 (1992).
63. G. Barton, *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **453**, 2461 (1997).
64. S. Y. Buhmann and D.-G. Welsch, *Progr. Quant. Electr.* **31**, 51 (2007).
65. S. Scheel and S. Y. Buhmann, *Acta Phys. Slovaca* **58**, 675 (2008).
66. F. S. S. Rosa, D. A. R. Dalvit, and P. W. Milonni, in *Doing Physics: A Festschrift for Thomas Erber*, Lect. Notes in Physics, ed. by P. W. Johnson, Illinois Institute of Technology Press, Chicago (2010), Ch. 18, p. 187; arXiv:0912.0279.
67. G. Barton, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 355004 (2011).
68. C. Eberlein and R. Zietal, *Phys. Rev. A* **86**, 062507 (2012).
69. R. Bennett, *Phys. Rev. A* **89**, 062512 (2014).

70. M. Bordag, Phys. Rev. A **96**, 062504 (2017).
71. М. А. Браун, ТМФ **190**, 277 (2017) [M. A. Braun, Theor. and Math. Phys. **190**, 237 (2017)].
72. J. Klatt, M. B. Fariás, D. A. R. Dalvit, and S. Y. Buhmann, Phys. Rev. A **95**, 052510 (2017).
73. М. Бордаг, ТМФ **195**, 391 (2018) [M. Bordag, Theor. and Math. Phys. **195**, 834 (2018)].
74. H. Safari, P. Barcellona, S. Y. Buhmann, and A. Salam, New J. Phys. **22**, 053049 (2020).
75. U. Fano, Phys. Rev. **103**, 1202 (1956).
76. J. J. Hopfield, Phys. Rev. **112**, 1555 (1958).
77. B. Huttner and S. M. Barnett, Phys. Rev. A **46**, 4306 (1992).
78. U. Fano, Phys. Rev. **124**, 1866 (1961).
79. S. M. Barnett, B. Huttner, and R. Loudon, Phys. Rev. Lett. **68**, 3698 (1992).
80. T. Gruner and D.-G. Welsch, Phys. Rev. A **51**, 3246 (1995).
81. R. Matloob, R. Loudon, S. M. Barnett, and J. Jeffers, Phys. Rev. A **52**, 4823 (1995).
82. R. Matloob and R. Loudon, Phys. Rev. A **53**, 4567 (1996).
83. T. Gruner and D.-G. Welsch, Phys. Rev. A **53**, 1818 (1996).
84. H. T. Dung, L. Knöll, and D.-G. Welsch, Phys. Rev. A **57**, 3931 (1998).
85. A. Tip, L. Knöll, S. Scheel, and D.-G. Welsch, Phys. Rev. A **63**, 043806 (2001).
86. L. G. Sutorp and M. Wubs, Phys. Rev. A **70**, 013816 (2004).
87. N. A. R. Bhat and J. E. Sipe, Phys. Rev. A **73**, 063808 (2006).
88. C. Eberlein and R. Zietal, Phys. Rev. A **86**, 022111 (2012).
89. R. Bennett and C. Eberlein, Phys. Rev. A **88**, 012107 (2013).
90. S. Y. Buhmann, *Dispersion Forces I: Macroscopic Quantum Electrodynamics and Ground-State Casimir, Casimir-Polder and Van der Waals Forces*, Springer, Berlin/Heidelberg (2013).
91. A. Drezet, Phys. Rev. A **96**, 033849 (2017).
92. M. Kosik, O. Burlayenko, C. Rockstuhl, I. Fernandez-Corbaton, and K. Słowik, Sci. Rep. **10**, 10855 (2020).
93. C. Forestiere, G. Miano, M. Pascale, and R. Tricarico, Phys. Rev. A **102**, 043704 (2020).
94. C. You, A. C. Nellikka, I. D. Leon, and O. S. Magaña-Loaiza, Nanophotonics **9**, 1243 (01 Jun. 2020).
95. В. И. Перель, Я. М. Пинский, ЖЭТФ **54**, 1889 (1968) [V. I. Perel' and Y. M. Pinskiy, Sov. Phys. JETP **27**, 1014 (1968)].
96. L. P. Pitaevskii, in *Casimir Physics*, Lecture Notes in Physics, Vol. 834, ed. by D. Dalvit, P. Milonni, D. Roberts, and F. Rosa, Springer (2011), Ch. 2, p. 23.

KINETIC PROCESSES IN FERMION–LUTTINGER LIQUIDS

A. Levchenko^{a*}, T. Micklitz^b^a Department of Physics, University of Wisconsin–Madison
53706, Madison, Wisconsin, USA^b Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas
22290-180, Rio de Janeiro, BrazilReceived January 9, 2021,
revised version January 25, 2021.
Accepted for publication January 25, 2021*Contribution for the JETP special issue in honor of I. E. Dzyaloshinskii's 90th birthday*

DOI: 10.31857/S0044451021040210

Abstract. The present work discusses extensions of the pioneering analysis by Dzyaloshinskii and Larkin [Sov. Phys. JETP **38**, 202 (1974)] of correlation functions for one-dimensional Fermi systems, focusing on the effects of quasiparticle relaxation enabled by non-linear dispersion. Throughout the work we employ both, the weakly interacting Fermi gas picture and non-linear Luttinger liquid model to describe attenuation of excitations and explore the fermion-boson duality between both approaches. A special attention is devoted to the role of spin-exchange processes, effects of interaction screening, and integrability. Thermalization rates for electron- and hole-like quasiparticles, as well as the decay rate of collective plasmon excitations and the momentum space mobility of spin excitations are calculated for various temperature regimes. The phenomenon of spin-charge drag is considered and the corresponding momentum transfer rate is determined. In the context of transport properties, momentum relaxation due to several competing mechanism, viz. triple electron collisions, electron-phonon scattering, and long-range inhomogeneities is addressed. Energy transfer facilitated by plasmons is highlighted from the perspective of inhomogeneous Luttinger liquid. The full matrix of thermoelectric coefficients is found at the quantum critical point of the first conductance plateau transition.

1. Introduction. The concept of quasiparticles plays a central role in the condensed matter physics

of strongly interacting many-body quantum systems [1, 2]. For instance, in the context of electrons in conductors, one typically views the quasiparticle states as those evolving from the free electron gas to a Fermi liquid when adiabatically turning on the interaction. In accordance with Landau theory [3], quasiparticles inherit some of the basic quantum numbers of bare electrons such as spin, charge, and momentum. Their respective dispersion relations as well as thermodynamical and kinetic properties may, however, differ significantly due to interaction-induced renormalizations. A crucial advantage of the quasiparticle picture is that residual interactions are assumed to be weak, and can be systematically and controllably addressed by means of perturbation theory. The central question related to the validity of the quasiparticle description concerns their lifetime τ_{qp} . Indeed, in the process of scattering quasiparticles decay and their mere notion is meaningful only if attenuation is weak enough and they can be considered as sufficiently long-lived collective excitations. In Fermi systems, the Pauli principle severely limits the phase space available for quasiparticle collisions. The low temperature decay rate can then be estimated from the Golden rule as

$$\tau_{qp}^{-1}(\varepsilon, T) \propto (\nu V_0)^2 \frac{\varepsilon^2 + \pi^2 T^2}{\varepsilon_F}. \quad (1)$$

In this expression, the excitation energy $\varepsilon = v_F(p - p_F)$ of a quasiparticle with momentum p is counted from the Fermi energy ε_F , ν is the density of states and V_0 is the characteristic strength of the short-range re-

* E-mail: levchenko@physics.wisc.edu

pulsive interaction¹⁾. The dominant microscopic scattering channel leading to Eq. (1) involves quasiparticle decaying into three: another quasiparticle and a particle-hole excitation. The amplitude for this process is proportional to V_0 , hence, the dimensionless factor of $(\nu V_0)^2$ in the scattering probability entering Eq. (1). The factor ε^2 is the phase space volume for scattering of a quasiparticle with energy ε compatible with the conservation of total energy and momentum. At finite temperatures the smearing of states in the energy strip of order $\sim T$ per particle leads to the corresponding T^2 dependence of τ_{qp}^{-1} . Higher-order processes involving $2n + 1$ quasiparticles, namely $n > 1$ electron-hole pairs, are usually neglected as their respective rate scales with higher powers of energy. In particular, at zero-temperature the rate for relaxation processes of a quasiparticle with energy ε involving n particle-hole pairs vanishes as $\tau_{qp}^{-1} \propto \varepsilon^{2n}$. One notable property of Eq. (1) is that it predicts the same relaxation time for particle-like and hole-like excitations. Another property is that the crossover from zero-temperature to finite-temperature relaxation is governed only by one scale, viz. when the excitation energy compares to the temperature itself $\varepsilon \sim T$.

In addition to the quasiparticle relaxation, which is often viewed as an out-scattering rate from a particular quantum state, one may address a more general question of relaxation of a nonequilibrium quasiparticle distribution function. In kinetic theory such problem is typically analyzed in the framework of the linearized Boltzmann equation. The eigenvalues of the corresponding collision operator define relaxation times of different distribution function modes. In three dimensional Fermi liquids this problem is exactly solvable [4, 5] and one finds that all these rates are parametrically the same, scaling respectively as $\propto T^2$. In contrast, in two-dimensional Fermi liquids, kinematics of head-on collisions leads to a parametrically distinct relaxation of odd and even momentum harmonics of the distribution function, in particular $\tau_{even}^{-1} \propto T^2/\varepsilon_F$ while $\tau_{odd}^{-1} \propto T^4/\varepsilon_F^3$ [6, 7].

The role of dimensionality in quasiparticle relaxation becomes the most dramatic in one-dimension (1D). This special case of electron liquids can be experimentally realized in quantum wires of GaAs/AlGaAs heterostructure [8] or carbon nanotubes [9] when particle density is such that only the lowest sub-band of transversal modes is occupied. It further requires that temperature is sufficiently low and sample purity is suf-

ficiently high, so that thermally- and disorder-induced transitions to higher sub-bands are suppressed. In addition, edge modes formed at the boundaries of a 2D electron gas when placed in a strong magnetic field in the integer or fractional quantum Hall regime [10, 11], or edge states of 2D quantum spin Hall topological-insulators [12], provide other distinct examples of, respectively, chiral and helical quantum 1D electron liquids.

In principle, all these systems can be successfully described within the framework of Luttinger liquid theory [13–15], which builds out of the Tomonaga–Luttinger (TL) model [16, 17]. As is known from pioneering works [18–20], in the asymptotic low-energy limit $\varepsilon/\varepsilon_F \ll 1$, the key properties of the TL model are manifestly non-Fermi liquid like. A power-law anomaly manifests in the suppression of the single particle density of states

$$\nu(\varepsilon) = \nu_0 \left(\frac{|\varepsilon|}{v_F p_\Lambda} \right)^{2g} \frac{\sin(\pi g)}{\pi g} \Gamma(1 - 2g), \quad (2)$$

and collapse of the quasiparticle residue in the distribution function. At $T \rightarrow 0$ that is

$$n(\varepsilon) = \frac{\Gamma(1/2 + g)}{2\sqrt{\pi}\Gamma(1 + g)} \times \left[1 - \frac{\Gamma(1/2 - g)}{\Gamma(1/2 + g)} \left(\frac{|\varepsilon|}{v_F p_\Lambda} \right)^{2g} \text{sgn}(\varepsilon) \right], \quad (3)$$

where $\nu_0 = 1/(2\pi v_F)$, $\Gamma(z)$ is the Euler’s gamma function, and p_Λ is the momentum cutoff of the model (parametrically $p_\Lambda \sim p_F$). In the simplest spinless version of the TL-model with short-ranged interaction, a single dimensionless coupling constant,

$$g = \frac{1}{2} \left[\frac{1 + \nu_0 V_0}{\sqrt{1 + 2\nu_0 V_0}} - 1 \right], \quad (4)$$

can be related to the zero-momentum Fourier component of the bare interaction potential V_0 . The limit of weak interaction corresponds to $g \ll 1$ and Eqs. (2), (3) are valid for $g < 1/2$ ²⁾. However, a direct attempt to apply Luttinger liquid theory to the question of quasiparticle lifetime meets formidable challenges. In a fermionic representation of the TL-model, elaborated explicitly by Dzyaloshinskii and Larkin [19], the electron self-energy vanishes on the mass shell in all orders of perturbation theory and, consequently, correlation functions assume power-law tails. These results,

²⁾ In Ref. [19] the limit of strong interactions, $g > 1/2$, was also considered, including the scenario when coupling between fermions of the same chirality is different from coupling between fermions of different chirality. For additional details on the derivation of Eq. (3) see also Ref. [21].

¹⁾ Throughout the paper we use units with Planck and Boltzmann constants set to unity $\hbar = k_B = 1$.

and the absence of relaxation, can be alternatively understood from the Mattis and Lieb [18], and Luther and Peschel [20] bosonization construction, which maps interacting 1D fermions to a collection of decoupled harmonic modes of charge-density and spin-density oscillations. Notably, in both approaches the exact solution relies heavily on the linearization of the fermionic dispersion relation.

One is then left with the natural puzzle whether incorporating curvature of the dispersion relation into the TL-model would cure the issue and yield a finite lifetime of excitations, thus possibly restoring Fermi liquid like properties of the system. This line of reasoning can be also corroborated within the fermionic picture, noting that spectrum nonlinearity softens phase space restrictions for quasiparticle scattering, thus making their relaxation possible.

Similarly, at the level of the bosonic description, nonlinear terms of the dispersion relation couple charge and spin modes thus enabling their decay. However, it was quickly recognized that curvature cannot be included perturbatively, and a naive expansion leads to spurious divergences. These and other related questions to 1D kinetics, including the connection between the two pictures of the fermion-boson duality, attracted significant recent interest. This has led to the development of the nonlinear Luttinger liquid theory, also referred to as Fermi–Luttinger liquid (FLL) theory (see Refs. [22, 23] for comprehensive reviews and references herein). Specifically for the problem of quasiparticle relaxation in quantum wires, various scattering rates were calculated within different interaction models for both, spinless [24–33] and spin-1/2 fermions [34–40]. In parts of the present work we review and extend these results.

On the experimental forefront the hallmark signatures of Luttinger liquid behavior have been observed by means of various spectroscopic techniques. Namely, power-law anomalies in the density of states, tunneling conductance, and current-voltage characteristics [9, 10, 41, 42], spin-charge separation [43, 44], and charge fractionalization [45, 46]. Besides GaAs quantum wires, carbon nanotubes, and edge modes, clear features of Luttinger liquid physics have been identified in many other systems such as bundles of NbSe₃ [47] and MoSe [48] nanowires, polymer nanofibers [49] and conjugated polymers at high carrier densities [50], as well as atomically controlled chains of gold atoms on Ge surfaces [51], just to name a few distinct examples. In the most recent report [52], relaxation processes in quantum wires were captured and bounds on the corresponding timescales were determined, thus providing

measurements of quasiparticle properties beyond the parading of linear Luttinger liquid theory. In a parallel line of developments [53–56], cooling of nonequilibrium quasiparticles in quantum Hall edge fluids was measured and corresponding length scales of thermalization processes were quantified.

The focus of this communication is on the description of elementary kinetic processes inducing relaxation in nonlinear Luttinger liquids and their emergent transport properties. Keeping forward scattering electron-electron interactions and accounting for nonlinear contributions to the electron dispersion, this theory is beyond the Dzyaloshinskii–Larkin theorem. The latter relax kinematic constraints and open phase space for multi-loop corrections to the electron self-energy, thereby providing a variety of inelastic processes which affect equilibrium as well as nonequilibrium properties of the 1D quantum electron liquids. The rest of this work is structured as follows (see the full text). Section 2 focuses on the hierarchy of relaxation times in Fermi–Luttinger liquids. We present results beyond parametric estimates, including detailed computations of a number of experimentally relevant interaction models³⁾. The complimentary kinetic equation approach, applied to the quasiparticle picture of a weakly interacting Fermi gas, and spin- and charge-excitations of a Luttinger liquid, are explored concurrently. We present numerical estimates for experimentally measured relaxation rates and provide detailed comparison to previous results. In Sec. 3, the temperature dependence of kinetic coefficients is calculated, accounting for extrinsic mechanisms of momentum relaxation due to phonons or long-range inhomogeneities. The contribution to heat transport mediated by plasmons in the inhomogeneous Luttinger liquid is elucidated. Finally, we devote parts of the discussion to the thermoelectric properties at the first plateau transition of the quantum conductance. In Sec. 4, we provide a summary of main findings and open questions, sketching a broader picture and commenting on related topics relevant for chiral, helical, and spiral versions of 1D quantum fluids. Several Appendices accompany our presentation in the main text, providing additional technical details of the presented analysis and formalism.

2. Hierarchy of relaxation processes. The physics of quasiparticle relaxation in 1D quantum electron liquids is perhaps a surprisingly rich and complicated problem. In part this has to do with the fact that, in contrast to their higher dimensional counter-

³⁾ In part this material was summarized in Sec. IV of the extensive review in Ref. [23].

parts, two-particle collisions, namely scattering processes with the emission of a single particle-hole excitation, do not result in finite relaxation rates. This statement pertains to generic dispersion relations, i. e. including curvature, and not only applies to models with linear dispersion. Indeed, kinematics of two-particle scattering in 1D is such that particles either keep or swap their momenta, but neither of these options causes relaxation. To allow for the redistribution of momenta and, at the same time, to comply with restrictions of conservations laws one necessarily needs to consider triple electron collisions, or alternatively, assume some extrinsic mechanism.

The analysis of 1D kinematics of multi-particle collisions resolving energy and momentum conservations reveals a plethora of possible scattering events. They ultimately lead to a hierarchy of relaxation stages in the system and an emergent asymmetry between the relaxation of particle-like and hole-like excitations. All processes can be broken down into several distinct classes. First are the forward scattering processes with soft momentum transfer that involve either (i) all particles from the same branch, or (ii) particles from both branches such that all initial and final states are near the Fermi energy. Second are processes involving states deeper in the band. These latter are relevant for (iii) the drift of quasiholes and (iv) backscattering processes that change the number of right and left moving excitations before and after the collision. We will refer to thermalization when discussing relaxation processes that proceed without backscattering. These processes determine the lifetime of quasiparticles associated to the redistribution of excess energy, and affect thermal transport properties of the system. In contrast, the notion of equilibration will be used to refer to relaxation processes involving the backscattering of quasiparticles, which ultimately govern electrical transport properties.

2.1. Quasiparticle interaction model. In the picture of a weakly nonideal Fermi gas, the probabilities of particle collisions can be calculated perturbatively in the interaction, employing the usual \hat{T} -matrix formalism [57]. Within the Golden Rule, the scattering rate

$$W = 2\pi|A|^2\delta(E - E')\delta_{P,P'} \quad (5)$$

is expressed in terms of the scattering amplitude A of the corresponding process. Here $E(E')$ and $P(P')$ label total energy and momentum of initial (final) states, and the delta function $\delta(E - E')$ along with the Kronecker delta $\delta_{P,P'}$ enforce energy and momentum conservations. In the semiclassical limit, the three-particle amplitude A was considered in Ref. [58]. The general-

ization to the degenerate quantum limit was presented in the work of Ref. [59], and exchange terms were carefully examined in Refs. [35, 60]. The resulting amplitude takes the form

$$A = \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbb{P}\mathbb{P}'} \text{sgn}(\mathbb{P}) \text{sgn}(\mathbb{P}') \times \frac{V_{p'_a-p_a} V_{p'_c-p_c}}{\varepsilon_{p_b} + \varepsilon_{p_c} - \varepsilon_{p_b+p_c-p'_c}} \Xi_{\sigma\sigma'}. \quad (6)$$

Here L is the system size and sums are over all possible permutations \mathbb{P} of momenta p_i with $i = 1, 2, 3$ starting from the direct scattering process $(p_1, p_2, p_3) \rightarrow (p'_1, p'_2, p'_3)$ to all its exchange processes, with $\text{sgn}(\mathbb{P})$ accounting for the sign of the particular permutation (using the convention that $\text{sgn}(123) = +1$). Each permutation comes with a spin-dependent factor $\Xi_{\sigma\sigma'} = \delta_{\sigma_a\sigma'_a} \delta_{\sigma_b\sigma'_b} \delta_{\sigma_c\sigma'_c}$ reflecting particle exchange. In the spinless case, the amplitude has an identical structure to Eq. (6) with $\Xi_{\sigma\sigma'} \equiv 1$. The amplitude consists of 36 distinct terms that can be split into groups of 6, each representing one direct and five exchange scattering processes, respectively. Technically speaking Eq. (6) appears from the iteration of the \hat{T} -matrix, $\hat{T} = V + V\hat{G}_0\hat{T}$, to second order in the bare two-particle interaction potential V . Here \hat{G}_0 is the resolvent operator (viz. the free particle Green's function) and ε_p denotes the energy-momentum dispersion relation.

For practical applications to quasiparticle scattering in quantum wires, it is sufficient to assume the simple dispersion of a parabolic band $\varepsilon_p = p^2/2m^*$ with effective mass m^* , and use a Coulomb interaction potential. Effects of screening due to nearby gates can be modeled by a conducting plate placed at a distance d away from the wire. In this case the interaction potential is of the form

$$V(x) = \frac{e^2}{\varkappa} \left[\frac{1}{|x|} - \frac{1}{\sqrt{x^2 + 4d^2}} \right], \quad (7)$$

where \varkappa is the dielectric constant of the host material. The diverging short-range behavior of this potential needs to be regularized in order to evaluate the small-momentum Fourier components V_p entering the amplitude in Eq. (6). To this end, we introduce the small width w of the quantum wire, $w \ll d$, and replace $1/|x| \rightarrow 1/\sqrt{x^2 + 4w^2}$. Upon 1D Fourier transform we then find

$$V_p = \frac{2e^2}{\varkappa} [K_0(2w|p|) - K_0(2d|p|)], \quad (8)$$

where $K_0(z)$ is the modified Bessel function of the second kind. Using the asymptotic expression of the Bessel function at $z \ll 1$,

$$K_0(z) \approx \ln\left(\frac{2}{ze^{\gamma_E}}\right) + \frac{z^2}{4} \ln\left(\frac{2}{ze^{\gamma_E-1}}\right),$$

with γ_E the Euler constant, one then finds the simplified form of the interaction potential

$$V_p \approx \frac{2e^2}{\varkappa} \left[\ln\left(\frac{d}{w}\right) - (pd)^2 \ln\left(\frac{e^{1-\gamma_E}}{|p|d}\right) \right], \quad (9)$$

applicable to the screened limit of Coulomb interaction and valid for $p \ll 1/d$. In the opposite regime, $d^{-1} \ll p \ll w^{-1}$, the second term in Eq. (8) can be neglected since $K_0(z) \propto e^{-z}/\sqrt{z}$ at $z \gg 1$. One then arrives at the simplified form of the unscreened potential

$$V_p \approx \frac{2e^2}{\varkappa} \times \left[\ln\left(\frac{e^{-\gamma_E}}{|p|w}\right) + (pw)^2 \ln\left(\frac{e^{1-\gamma_E}}{|p|w}\right) \right]. \quad (10)$$

A few comments are in order in relation to the interaction model presented in this section. (i) It should be noted that retaining numerical pre-factors of the order of unity under the logarithm in above expressions for V_p would exceed the accuracy of further calculations, so they will be dropped and simply set to unity. (ii) However, retaining the sub-leading corrections containing p^2 in the main log-series expansion of both Eqs. (9) and (10) is actually crucial. Indeed, in the spinless case, the model with contact interaction as well as the Calogero–Sutherland model, are known to be completely integrable [61]. This implies that all irreducible multi-particle scattering amplitudes must vanish identically for a constant V_p and $V_p \propto |p|$. Furthermore, the extended model of short-ranged interaction, $V_p \propto p^2$, corresponding to the real space potential $V(x) \propto \delta''(x)$, is also integrable. This is known as Cheon–Shigehara model [62]. It is only due to the additional logarithm $\propto p^2 \ln|p|$ in Eq. (9), that there is partial non-cancellation between different terms in Eq. (6) and the amplitude remains finite. (iii) In the model of long-ranged Coulomb interaction the situation is more subtle. A priori this model is not known to be integrable. Nevertheless, the amplitude in Eq. (6) vanishes for pure logarithmic interaction $V_p \propto \ln|p|$, so that retaining an additional $p^2 \ln|p|$ term in Eq. (10) is important to get a finite result.

The triple electron scattering rate from Eq. (5) generates the collision integral (Stosszahlansatz) of the corresponding Boltzmann equation

$$\text{St}\{n\} = \sum_{\{p\},\{\sigma\}} W[n_{p'_1}(1-n_{p_1})n_{p'_2}(1-n_{p_2})n_{p'_3} \times (1-n_{p_3})-n_{p_1}(1-n_{p'_1})n_{p_2}(1-n_{p'_2})n_{p_3}(1-n_{p'_3})]. \quad (11)$$

Here each pair of Fermi functions, $n_p(1-n_{p'})$, captures statistical occupation probabilities, whereas the two terms of the collision integral correspond to incoming and outgoing processes. At thermal equilibrium these terms nullify each other by virtue of the detailed balance condition. At weak disequilibrium, one can linearize $n_p = f_p + \delta n_p$ in the external perturbation δn_p around the equilibrium Fermi–Dirac distribution function f_p . The collision term can then be considered as a linear integral operator, acting on $\delta n_p = f_p(1-f_p)\psi$, and one can formulate the eigenvalue problem for this operator, $\text{St}\{\psi_n\} = \omega_n \psi_n$. The spectrum of eigenvalues ω_n may be discrete or continuous, and captures all the information about the decay of different distribution function modes. As solving this problem exactly for triple collisions presents a daunting task [29, 40], we here follow a simpler more pragmatic approach. Setting, for instance, $\delta n_{p_1} = \delta_{p_1,p_F+\varepsilon/v_F}$ describes a quasiparticle with excess energy ε . Neglecting then secondary collisions, the Boltzmann equation reduces to the simple relaxation time approximation, $(\partial_t + \tau_{qp}^{-1})\delta n_p = 0$, with solution $\delta n_p \propto \exp(-t/\tau_{qp})$. It is natural to identify the corresponding timescale for decay with the quasiparticle life-time

$$\tau_{qp}^{-1} = -\frac{\partial \text{St}\{n\}}{\partial n_p}, \quad (12)$$

which follows from Eq. (11) by only retaining the out-scattering contribution. Alternatively, one may project the collision operator (11) onto either momentum or energy modes and thus infer the relaxation time of interest. This approach is parametrically correct, however, may miss numerical factors of order unity when compared to the exact solution of the eigenvalue problem. We will employ both approaches in the forthcoming sections.

2.2. Quasiparticle decay rates. Owing to one-dimensionality of the problem, it is convenient to think of particles of different chirality, namely right-movers (R) and left-movers (L). It can be readily checked that strictly at zero-temperature quasiparticle relaxation is only possible if collisions involve both, right- and left-moving particles since otherwise conservation

laws cannot be satisfied. For this reason, consider first a process of relaxation that involves two right-moving particles, with initial momenta p_1, p_2 , and a left-moving particle labeled by momentum p_3 . The outgoing momenta after the collision, $p'_i = p_i + q_i$, will be labeled by momenta transfer q_i for each of the particle $i = 1, 2, 3$. In these notations, the momentum conservation becomes $q_1 + q_2 + q_3 = 0$, and the energy conservation, for a simple parabolic band, can be cast in the form

$$2(p_1q_1 + p_2q_2 + p_3q_3) + q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 = 0.$$

These conditions set the phase-space constraints for collisions.

For an initial state with $p_1 = p_F + \varepsilon/v_F$, the quasi-particle life-time corresponding to an RRL-process is then

$$\tau_{qp}^{-1} = \sum_{\substack{p_2 p_3 \\ p_1 p_2 p_3}} W(1 - f_{p'_1})f_{p_2}(1 - f_{p'_2})f_{p_3}(1 - f_{p'_3}), \quad (13)$$

where we begin analysis from the spinless case. At this point it is convenient to shift momenta of left- and right-movers from the respective Fermi points, $p_{1,2} = p_F + k_{1,2}$ and $p_3 = -p_F + k_3$. In addition, it is sufficient to linearize the spectrum in the distribution functions, approximating

$$f_{\pm p_F+k} \rightarrow f_{\pm k} = \left[\exp\left(\pm \frac{v_F k}{T}\right) + 1 \right]^{-1},$$

but not in the scattering probability W . Indeed, an analysis of the kinematic constraints suggests that $q_1 \approx -q_2$ and $q_3 \approx (q_1/p_F)(k_1 - k_2 + q_1)$, implying that $|q_3| \ll |q_{1,2}|$. In other words, relaxation occurs in incremental steps of momentum transfer $q_3 \sim \varepsilon^2/v_F^2 p_F$ from right-movers to left-movers. With these observations at hand, we next need the corresponding three-particle scattering amplitude. For the case of long-ranged Coulomb interaction Eq. (10), one finds from Eq. (6) after a laborious expansion

$$A \approx \frac{2(p_F w)^2}{L^2 \varepsilon_F} \left(\frac{2e^2}{\varkappa}\right)^2 \times \left[1 - \frac{3}{4} \ln\left(\frac{1}{p_F w}\right) \right] \ln\left(\frac{q_1^2}{p_F |q_3|}\right). \quad (14)$$

This result is obtained to leading logarithmic accuracy using two small parameters $|q_1|/p_F \sim |q_3|/|q_1| \ll 1$ in the expansion. With the same level of accuracy the

momentum and energy conservations in Eq. (5) can be simplified to

$$\delta_{P,P'} \delta(E - E') \approx \frac{1}{v_F} \delta\left(q_3 - \frac{q_1(k_1 - k_2) + q_1^2}{p_F}\right) \delta_{q_1, -q_2}. \quad (15)$$

These approximations enable one to complete all five momentum integrations. Two integrations are removed by delta functions which fix values of q_2 and q_3 in terms of $k_{1,2}$ and q_1 . Furthermore, in the zero temperature limit, $T \rightarrow 0$, Fermi occupations become step-functions, $f_k \rightarrow \theta(-k)$. The integral over k_3 then becomes elementary, contributing by a pure phase space factor

$$\sum_{k_3} f_{-k_3}(1 - f_{-k_2 - q_3}) = \frac{L}{2\pi} |q_3| \theta(-q_3).$$

The product of Fermi factors, $f_{k_2}(1 - f_{k_2 - q_1})$, simply limits the domain of k_2 to the range $k_2 \in [-|q_1|, 0]$, while the remaining $1 - f_{k_1 + q_1}$ dictates that $q_1 < k_1$. Finally, we recall that in this setting $k_1 = \varepsilon/v_F$. Putting everything together the RRL-process gives the life-time

$$\tau_{qp}^{-1} = c_1 \varepsilon_F g^4 \lambda_1^2(p_F w) \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}\right)^4, \quad (16)$$

where $g = e^2/\varkappa v_F$ is the dimensionless interaction strength of the model and we introduced $\lambda_1(z) = z^2 \ln(1/z)$. The numerical coefficient $c_1 = (15 - \pi^2)/32\pi^3$ is obtained with help of the following integral

$$\int_0^1 \int_0^1 x^2 g(x, y) \ln^2\left(\frac{x}{g(x, y)}\right) dx dy = \frac{15 - \pi^2}{72}, \quad (17)$$

where $g(x, y) = 1 - x(1 - y)$. Notice that the numerical factor in Eq. (16) differs from the one calculated in Refs. [26, 28] as different properties of the interaction potential were assumed⁴⁾.

We see that finite decay rate emerges in forth order of the interaction strength. We also notice that the attenuation is inversely proportional to the cube of mass, $\tau_{qp}^{-1} \propto (m^*)^{-3}$, and vanishes as the limit $m^* \rightarrow \infty$ is taken at fixed band velocity. This limit corresponds to the situation considered by Dzyaloshinskii and Larkin. The energy scaling of the decay rate, $\propto \varepsilon^4$, is consistent with expectations based on the Fermi liquid picture for

⁴⁾ In Appendix (see full text) we sketch derivation of Eq. (16) from the bosonization framework of an impurity scattering in Luttinger liquids.

a process involving two particle-hole excitations. However, this result is not universal. This becomes evident from repeating the above calculation for the model of screened short-range interaction, i.e. using the potential given by Eq. (9). Expanding the amplitude in Eq. (6) under the same conditions as above, one then finds instead of Eq. (14) the amplitude

$$A \approx -\frac{5(p_F d)^4}{3L^2 \varepsilon_F} \left(\frac{2e^2}{\varkappa}\right)^2 \ln\left(\frac{1}{p_F d}\right) \times \\ \times \left[\frac{q_1^2}{4p_F^2} \left[1 + 6 \ln\left(\frac{|q_1|}{p_F}\right) \right] - \frac{q_3^2}{q_1^2} \left[1 + 6 \ln\left(\frac{|q_3|}{|q_1|}\right) \right] \right]. \quad (18)$$

The crucial difference here compared to Eq. (14) is the appearance of the additional small parameter $|q_1|/p_F \sim |q_3|/|q_1| \sim \varepsilon/\varepsilon_F \ll 1$, which can be related to the fact that this particular model is nearly integrable. A close inspection of the amplitude in Eq. (6) reveals that each term individually diverges as $1/q$ at small characteristic momentum transfer. However, all exchange terms combined together remove the singularity and partially cancel out all the way to $\sim q^2 \ln q$ order. The rest of the calculation carries through in exactly the same way as in the previous example, and one finds the decay rate

$$\tau_{qp}^{-1} = c_2 \varepsilon_F g^4 \lambda_2^2(p_F d) \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}\right)^8 \ln^2\left(\frac{\varepsilon_F}{\varepsilon}\right) \quad (19)$$

with $c_2 = 2445/3584\pi^3$ and $\lambda_2(z) = z^4 \ln(1/z)$. The four extra powers in the energy dependence, can be traced back to the different asymptotic form of the amplitude in Eq. (18). This demonstrates the high sensitivity of decay rates in 1D to details of the interaction. The result captured by Eq. (19) is of course perturbative. For a generic nonintegrable models with short-ranged interaction, it can be generalized to arbitrary interaction strength. It can further be shown that $\tau_{qp}^{-1} \propto \varepsilon^8$ remains valid, and the pre-factor can be expressed in terms of the exact spectrum [31].

As should be anticipated from the discussion above, electron spin plays a crucial role in the transition matrix element for the three-particle process, and should thus significantly affect the quasiparticle decay rate. Indeed, in the spinless case antisymmetry of the electron wave function dictates that its orbital component should be odd and therefore relevant exchange amplitudes are suppressed by Pauli exclusion. Mathematically, one sees this in a cancellation of various terms that lead to Eq. (18). In contrast, for spinful electrons singular parts of the amplitude do not cancel.

They are dominated by $2p_F$ exchange-processes between branches, in which left-movers are scattered into right-movers [35]. Even though the strength of $2p_F$ exchange interaction is weaker than small momentum scattering, $V_{2p_F} \ll V_0$, for Coulomb interaction the relative reduction is only logarithmic. The gain in the amplitude, on the other hand, is more substantial and controlled by the large factor $\sim \varepsilon_F/v_F q \gg 1$. This statement can be verified explicitly from Eq. (6) where after spin summation one finds for the square of the amplitude for the RRL-process

$$\sum_{\substack{\sigma_2 \sigma_3 \\ \sigma'_1 \sigma'_2 \sigma'_3}} |A|^2 = \frac{3V_{2p_F}^2 (V_0 - V_{2p_F})^2}{32L^4 \varepsilon_F^2} \left[\frac{q_1^2}{q_3^2} + \frac{4p_F^2}{q_1^2} \right]. \quad (20)$$

To obtain this result we approximated $V_{p_1-p_2 \pm q_i} \approx V_0$ and $V_{p_{1,2}-p_3 \pm q_i} \approx V_{2p_F}$ in all the relevant terms since $p_{1,2} - p_3 \approx 2p_F$ and $q_i \ll |p_i|$. Again, by repeating momentum integrations, the decay rate is found to be of the form

$$\tau_{qp}^{-1} = c_3 \varepsilon_F g^4 \lambda_3^2(p_F w) \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}\right)^2 \ln^2\left(\frac{\varepsilon_F}{\varepsilon}\right), \quad (21)$$

with $c_3 = 45/32\pi^3$ and $\lambda_3(z) = \ln(1/z)$. To be consistent with the approximations that lead to Eq. (20), the difference $V_0 - V_{2p_F}$ should be understood as a weak logarithmic factor $\simeq (2e^2/\varkappa) \ln(\varepsilon_F/\varepsilon)$ for the Coulomb interaction potential. This was incorporated into Eq. (21). The singularity of the amplitude was compensated by phase space factors, and perhaps surprisingly this restores essentially the Fermi liquid form of the decay rate at $T = 0$. We note that up to model dependent pre-factors, the quadratic dependence of the relaxation rate on energy of spin-1/2 particles given by Eq. (21) is consistent with predictions of previous studies [35, 39].

We proceed with discussion of the effects of thermal broadening on relaxation processes. In the Fermi liquid picture one expects a simple crossover at excitation energies of the order of temperature $\varepsilon \sim T$. For 1D liquids this is not the case, as even at $T < \varepsilon$ there are intermediate regimes and relaxation shows nontrivial temperature dependence. Indeed, at finite temperatures each collision results in a typical momentum transfer $q_i \sim T/v_F$ allowed by thermal smearing of states near the Fermi energy. As RRL relaxation is controlled by the momentum transfer between the branches, one needs to compare phase spaces available to left movers. Since at zero temperature $q_3 \sim \varepsilon^2/v_F^2 p_F$, one deduces from comparison to $q_3 \sim T/v_F$ the crossover scale $\varepsilon_T \sim$

$\sim \sqrt{\varepsilon_F T}$. Technically, this argument can be also made clear by observing that

$$\sum_{k_3} f_{-k_3} (1 - f_{-k_3 - q_3}) = \frac{L}{2\pi} q_3 \left[\exp\left(\frac{v_F q_3}{T}\right) - 1 \right]^{-1},$$

and reducing to $LT/2\pi v_F$ as $q_3 \rightarrow 0$. These considerations suggest that Eqs. (16), (19), and (21) are valid for $T \ll \varepsilon^2/\varepsilon_F$. Above this threshold one finds

$$\tau_{qp}^{-1} = c_4 \varepsilon_F g^4 \lambda_1^2 (p_F w) \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}\right)^2 \frac{T}{\varepsilon_F}, \quad (22)$$

instead of Eq. (16) for the spinless Coulomb case. Similarly,

$$\tau_{qp}^{-1} = c_5 \varepsilon_F g^4 \lambda_2^2 (p_F d) \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}\right)^6 \frac{T}{\varepsilon_F} \ln^2\left(\frac{\varepsilon_F}{\varepsilon}\right), \quad (23)$$

instead of Eq. (19) for the spinless screened case, and finally

$$\tau_{qp}^{-1} = c_6 \varepsilon_F g^4 \lambda_3^2 (p_F w) \frac{T}{\varepsilon_F} \ln^2\left(\frac{\varepsilon_F}{\varepsilon}\right) \quad (24)$$

instead of Eq. (21) for the spin-1/2 Coulomb case. The set of coefficients $c_{4,5,6}$ can be determined from numerical integrations, however, their specific values are of no particular significance here.

At elevated temperatures the above mechanism of relaxation competes with another process involving only particles of the same chirality. As indicated earlier, this RRR- (or equivalently LLL-) process is kinematically possible only at finite energies. It follows from the same amplitude Eq. (6), but admits different conditions on the involved momenta. In this process, a high-energy particle with excess energy ε can relax on two other comoving particles, which during the collision are scattered in opposite directions in energy. Namely, one is drifting slightly upwards in energy, whereas the other float downwards, closer to the Fermi energy. A detailed calculation in the spinless Coulomb model shows that the corresponding relaxation rate is given by

$$\tau_{qp}^{-1} = c_7 g^4 (p_F w)^4 \frac{T^3}{\varepsilon \varepsilon_F} \ln^2\left(\frac{\varepsilon w}{\varepsilon}\right), \quad (25)$$

where $\varepsilon_w = v_F/w$. This rate exceeds that given in Eq. (22), provided that temperature is higher than $\sim \varepsilon \sqrt{\varepsilon/\varepsilon_F}$. In the case of screened Coulomb interaction, the same mechanism is more strongly suppressed

$$\tau_{qp}^{-1} = c_8 g^4 (p_F d)^8 \frac{T^7}{\varepsilon \varepsilon_F^5} \ln^2\left(\frac{\varepsilon d}{\varepsilon}\right) \ln^2\left(\frac{\varepsilon}{T}\right), \quad (26)$$

where $\varepsilon_d = v_F/d$. In fact, $\propto T^7$ is a generic property for any non-integrable finite-range interaction model with a sufficient degree of analyticity at small momenta [32, 33]. Lastly, in the case of spin-1/2 chiral electrons one estimates the decay rate to be of the form

$$\tau_{qp}^{-1} = c_9 g^4 \frac{T \varepsilon_T^6}{\varepsilon^2 \varepsilon_d^4} \ln^4\left(\frac{d}{w}\right). \quad (27)$$

In addition to relaxation of particles with the same chirality, thermal broadening allows for the relaxation of hot quasiholes, a process kinematically forbidden at zero temperature. The derivation of the corresponding decay rate τ_{qh}^{-1} proceeds in close analogy to that for the RRL-process. Crucial modifications are (i) the sign of q_3 , (ii) a smaller phase space volume, now suppressed by an additional factor $\sim T/(\varepsilon^2/\varepsilon_F)$, and (iii) that it takes $\sim (\varepsilon/\varepsilon_T)^2$ steps to relax the excess energy. As a result, the quasihole relaxation rate e.g. for the spin-1/2 model,

$$\tau_{qh}^{-1} = c_{10} \varepsilon_F g^4 \lambda_3^2 (p_F w) \left(\frac{T}{\varepsilon}\right)^2 \ln^2\left(\frac{\varepsilon_F}{\varepsilon}\right), \quad (28)$$

is by a factor $(\varepsilon_T/\varepsilon)^4$ smaller than τ_{qh}^{-1} defined in Eq. (21) when taken at the same energy. This pronounced asymmetry in the relaxation rates of electron-like and hole-like excitations is a direct consequence of the 1D kinematics of three-particle scattering with nonlinear spectrum. This feature marks a sharp distinction between the quantum 1D Fermi–Luttinger liquids and higher dimensional Fermi liquids.

We summarize in Table the discussed quasiparticle relaxation rates in the different regimes.

2.3. Distribution imbalance rates. Another common technique in kinetic theory applied to the determination of relaxation rates is to project the collision integral onto specific modes of interest, to infer their corresponding decay times. For instance, in the context of the present problem, one can look at the thermal imbalance relaxation between left- and right-movers. This amounts to projecting the collision term onto the energy mode of the distribution function n_p , which is even in momentum.

To see the practical implementation of this method, consider a situation in which right-movers are hotter than left-movers. The goal is then to derive an equation which describes the relaxation of the difference in temperatures $\Delta T = T^R - T^L$ of left- and right-moving electrons. It should be noted that the physical setting with imbalanced temperature is justified in 1D: while three-particle collisions generate both right- and

Table. Energy and temperature dependencies of quasi-particle relaxation rates (only the leading parametric behavior is indicated and logarithmic terms are omitted for brevity). First two rows summarize results for spinless electrons interacting via Coulomb and screened short-range interaction models, respectively, and the last row gives the result for the spin-1/2 model. The first two columns describe processes involving particles of both chiralities (e.g. the RRL-process), and the last column describes the relaxation of comoving particles with only same chirality (e.g. the RRR-process). In all cases $T_1 \sim \varepsilon^2/\varepsilon_F$, while $T_2 \sim \varepsilon\sqrt{\varepsilon/\varepsilon_F}$ in the Coulomb model, $T_2 \sim \varepsilon\sqrt[6]{\varepsilon/\varepsilon_F}$ in the screened model, and $T_2 \sim \varepsilon(\varepsilon_d/\varepsilon_F)\sqrt[3]{\varepsilon_d/\varepsilon}$ in the spinful model

τ_{qp}^{-1}	$T < T_1$	$T_1 < T < T_2$	$T_2 < T < \varepsilon$
Coulomb	$\varepsilon^4/\varepsilon_F^3$	$T\varepsilon^2/\varepsilon_F^2$	$T^3/\varepsilon\varepsilon_F$
Screened	$\varepsilon^8/\varepsilon_F^7$	$T\varepsilon^6/\varepsilon_F^6$	$T^7/\varepsilon\varepsilon_F^5$
Spin-1/2	$\varepsilon^2/\varepsilon_F$	T	$T\varepsilon_T^6/\varepsilon^2\varepsilon_d^4$

left-moving particle-hole pairs the intrabranh relaxation induced by these processes is faster, while interbranch is a slow.

We start from the Boltzmann equation, multiply both sides by $\varepsilon_{p_1} - \varepsilon_F$, and sum over $p_1 > 0$

$$\sum_{p_1 > 0} (\varepsilon_{p_1} - \varepsilon_F) \partial_t n_{p_1} = \sum_{p_1 > 0} (\varepsilon_{p_1} - \varepsilon_F) \text{St}\{n\}, \quad (29)$$

where, as above, momentum p_1 is that of a right-moving particle. We then assume n_{p_1} to be of Fermi-Dirac form with nonequilibrium temperature $T^R = T + \Delta T$ of right-moving excitations, and linearize in the left-hand-side with respect to ΔT ,

$$\partial_t n_{p_1} = \partial_T n_{p_1} \partial_t \Delta T = \frac{(\varepsilon_{p_1} - \varepsilon_F) \partial_t \Delta T}{4T^2 \text{ch}^2\left(\frac{\varepsilon_{p_1} - \varepsilon_F}{2T}\right)}. \quad (30)$$

When computing integral over p_1 it is convenient to shift momentum to the respective Fermi point, $p_1 = p_F + k_1$. Linearizing further the dispersion relation in k_1 , $\varepsilon_{p_1} - \varepsilon_F \approx v_F k_1$, one may use that the integral is peaked at p_F and rapidly converging. Noting that

$$\int_{-\infty}^{+\infty} z^2 dz / \text{ch}^2(z) = \pi^2/6,$$

one readily finds

$$\sum_{p_1 > 0} (\varepsilon_{p_1} - \varepsilon_F) \partial_t n_{p_1} = \frac{\pi LT}{6v_F} \partial_t \Delta T. \quad (31)$$

The next step is to also linearize the right-hand-side of Eq. (29) in ΔT . To accomplish this task we parametrize $n_p = f_p + f_p(1 - f_p)\psi_p$, which allows to conveniently take advantage of the detailed balance condition in the collision integral $\text{St}\{n\}$. For the thermal imbalance $\psi_p = (\varepsilon_p - \varepsilon_F)\Delta T/T^2$, and one finds upon expansion in ΔT

$$\begin{aligned} \sum_{p_1 > 0} (\varepsilon_{p_1} - \varepsilon_F) \text{St}\{n\} &= \\ &= -\frac{\Delta T}{T^2} \sum_{\{k, q, \sigma\}} (v_F k_1)(v_F q_3) \mathcal{W}. \end{aligned} \quad (32)$$

Here

$$\begin{aligned} \mathcal{W} &= W f_{k_1}(1 - f_{k_1+q_1}) f_{k_2}(1 - f_{k_2+q_2}) \times \\ &\quad \times f_{-k_3}(1 - f_{-k_3-q_3}), \end{aligned} \quad (33)$$

and at intermediate steps we made use of the energy conservation implicit in W , and approximated $\varepsilon_{p_1} - \varepsilon_F \approx v_F k_1$ and $\varepsilon_{p_3} - \varepsilon_{p_3} \approx -v_F q_3$. It is now evident that Eq. (29) can be cast in form of the usual relaxation time approximation,

$$\partial_t \Delta T = -\Delta T / \tau_{th}, \quad (34)$$

where we introduced the corresponding thermalization time. For the kinematics of the RRL-process, the latter evaluates to

$$\tau_{th}^{-1} = c_{11} \varepsilon_F g^4 \lambda_3^2 (p_F w) \left(\frac{T}{\varepsilon_F}\right)^2 \ln^2\left(\frac{\varepsilon_F}{T}\right). \quad (35)$$

In a similar fashion one can find the relaxation rate for the odd part of the imbalanced distribution. For this purposes one may consider a boosted frame of reference, $\varepsilon_p - pu$, and derive the relaxation equation for u by projecting the collision integral onto the momentum mode. Kinematics of the respective collision is different though, and will be considered in the next section.

To get an idea of the order of magnitude of the different timescales, it is instructive to consider the following estimates for GaAs quantum wires using experimental parameters of Ref. [52]. For $v_F \sim 2 \cdot 10^5$ m/s and $\varkappa \sim 10$, the interaction parameter is just within the applicability criterion of the perturbative expressions $g \sim 1$. For the typical electron density we use $p_F \sim 10^8$ m⁻¹, $w \sim 10$ nm, and $\varepsilon_F \sim 1$ meV. Then for $\varepsilon \sim \varepsilon_F/4$, which is a typical excess energy of injected particles in tunneling experiments, and $T \sim 0.25$ K one is securely in the regime $T \ll \varepsilon^2/\varepsilon_F$. For this set of parameters $\tau_{qp}^{-1} \sim 10^{11}$ s⁻¹, $\tau_{qh}^{-1} \sim 10^9$ s⁻¹, and $\tau_{th}^{-1} \sim 10^6$ s⁻¹.

2.4. Backscattering hole mobility rates. Relaxation processes of low-energy excitations leading to the decay of quasiparticles near the Fermi energy do not change the numbers of right- and left-moving particles. Thus they are chirality conserving. It turns out that it is also possible to have backscattering processes. The kinematics of these collisions involves states deep in the Fermi sea, and for this reason it is useful to consider the mobility of holes at the bottom of the band. These processes are commonly considered from the perspective of mobile impurities in a Luttinger liquid [63–69]. Here we will continue using the kinetic equation approach for their description. The idea is then to single out hole states at the bottom of the band with small momenta, and to derive an effective kinetic equation capturing their dynamics and allowing the calculation of corresponding backscattering rates [70, 71].

For this purpose, let p_1 and p'_1 be momenta near the band bottom, p_2 and p'_2 lie near the right Fermi point ($+p_F$), and p_3 and p'_3 be taken near the left Fermi point ($-p_F$). As before, the unprimed momenta correspond to incoming states whereas primed ones are associated with outgoing states. With these conventions, we introduce the hole distribution function, $h_{p_1} = 1 - n_{p_1}$, and the collision integral for holes, $\text{St}\{h_{p_1}\} = -\text{St}\{n_{p_1}\}$. Starting from Eq. (11), the latter can be cast in the form

$$\text{St}\{h_{p_1}\} = \sum_{p'_1} [\mathcal{P}(p_1, p'_1)h_{p'_1} - \mathcal{P}(p'_1, p_1)h_{p_1}], \quad (36)$$

where

$$\mathcal{P}(p_1, p'_1) = 12 \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\substack{p_2 p_3 \\ p_2 p_3}} W f_{p_2}(1 - f_{p'_2}) f_{p_3}(1 - f_{p'_3}) \quad (37)$$

is the rate for a transition in which a hole scatters from some state p'_1 into p_1 , while $\mathcal{P}(p'_1, p_1)$ denotes the rate for the inverse process. In the above sums, all momenta have been restricted to the discussed ranges, which explains the combinatorial overall factor of 12. Since both p_1 and p'_1 lie near the bottom of the band, the distribution functions h_{p_1} and $h_{p'_1}$ are exponentially small $\propto e^{-\varepsilon_F/T}$ due to Pauli exclusion, and so is the collision integral of holes $\text{St}\{h_p\}$. It is therefore unnecessary to account for additional exponentially small contributions in the transition rates $\mathcal{P}(p_1, p'_1)$ and $\mathcal{P}(p'_1, p_1)$, and this is why we replaced $f_{p_1} \simeq 1$ and $f_{p'_1} \simeq 1$ in both. As in the case of the forward scattering process, the typical scale for momentum change of all three particles in a hole backscattering is set by temperature, $q_i = p'_i - p_i \sim T/v_F$. At the same time, the typical momentum of a hole is $p_1 \sim \sqrt{m^*T}$ so that $q_1/p_1 \sim \sqrt{T/\varepsilon_F} \ll 1$. This means that the net momentum

change in each scattering event is small, and holes effectively drift through the bottom of the band. Thus relaxation occurs in multiple steps and the underlying dynamics is momentum space diffusion. Under these conditions, the mobile impurity falls into the universal class of problems described by a Fokker–Planck equation [72]. The collision integral Eq. (36) can then be simplified by expanding in the small momentum step $q_1 \ll p_1$, and maps to the differential operator

$$\text{St}\{h_{p_1}\} \approx -\partial_{p_1} [\mathcal{A}(p_1)h_{p_1}] + \frac{1}{2}\partial_{p_1}^2 [\mathcal{B}(p_1)h_{p_1}]. \quad (38)$$

Here we introduced

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(p_1) &= -\sum_{q_1} q_1 \mathcal{P}_{q_1}(p_1), \\ \mathcal{B}(p_1) &= \sum_{q_1} q_1^2 \mathcal{P}_{q_1}(p_1), \end{aligned} \quad (39)$$

and used the short-hand notation $\mathcal{P}_{q_1}(p_1) = \mathcal{P}(p'_1, p_1)$. The diffusion coefficient in momentum space $\mathcal{B}(p_1)$ is a function of the hole-momentum p_1 varying on a scale set by p_F . For holes at the bottom of the band, one may thus approximate $\mathcal{B}(p_1)$ by its value at $p_1 = 0$, in the following simply denoted by \mathcal{B} without argument. Furthermore, the drift coefficient $\mathcal{A}(p_1)$ is readily obtained from noting that the collision integral (38) has to vanish for hole distributions of an equilibrium Boltzmann form. This condition leads to the relation $\mathcal{A}(p) = p\mathcal{B}/2m^*T$.

The rest of the calculation depends on the structure of the amplitude for the given kinematics of the three-particle process. In calculating A from Eq. (6) for the momentum configuration under consideration, and up to small corrections in $T/\varepsilon_F \ll 1$, it is sufficient to approximate $p_1 \approx 0$, $p_2 \approx +p_F$ and $p_3 \approx -p_F$. Momentum and energy conservations provide additional restrictions on the transferred momenta, enforcing that $q_2 \approx q_3 \approx -q_1/2$, again up to small corrections in $T/\varepsilon_F \ll 1$. As a result, the amplitude A can be parametrized only by a single momentum q_1 . Expanding Eq. (6) and summing over spins one then finds

$$\sum_{\{\sigma\}} |A|^2 = \frac{6}{\varepsilon_F^2 L^4} V_{p_F}^2 (V_{p_F} - V_{2p_F})^2 \frac{p_F^2}{q_1^2}. \quad (40)$$

The singularity of A at small momenta is cancelled in the spinless case. Specifically, for the long-range interaction model with Eq. (10) one finds

$$A \approx \frac{9}{16\varepsilon_F^2 L^4} \left(\frac{2e^2}{\varkappa}\right)^4 \lambda_1^2(p_F w) \ln^2\left(\frac{p_F}{|q_1|}\right), \quad (41)$$

whereas for the screened model

$$A \approx \frac{9(\ln 4 - 1)^2}{\varepsilon_F^2 L^4} \left(\frac{2e^2}{\varkappa} \right)^4 \lambda_2^2(p_F d). \quad (42)$$

In order to perform remaining momentum integrations implicit in the definition of \mathcal{B} , one can approximate delta functions in the scattering probability by

$$\delta_{P,P'} \delta(E - E') \approx \frac{1}{v_F} \delta(q_2 - q_3) \delta_{q_2, -q_1/2}.$$

This removes two integrations out of five, and gives

$$\mathcal{B} = \frac{12L}{v_F} \sum_{q_1 k_2 k_3} q_1^2 \sum_{\{\sigma\}} |A|^2 f_{k_2 - q_1/2} (1 - f_{k_2}) \times \\ \times f_{k_3 + q_1/2} (1 - f_{k_3}), \quad (43)$$

where we shifted momenta $p_{2,3}$ to the respective Fermi points, $\pm p_F + k_{2,3}$, and linearized the dispersion relation in all Fermi occupation functions. Finally, using the tabulated integral

$$\sum_k f_{k+q} (1 - f_k) = \frac{L}{2\pi} q b_q, \quad b_q = \frac{1}{e^{v_F q/T} - 1}, \quad (44)$$

where b_q is the equilibrium Bose distribution, we arrive at the general expression

$$\mathcal{B} = \frac{6\pi}{v_F} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \sum_{q_1} q_1^4 \sum_{\{\sigma\}} |A|^2 b_{q_1/2} (1 + b_{q_1/2}). \quad (45)$$

A notable feature of this expression is that it is entirely expressed in terms of bosonic modes. In essence, this is a manifestation of bosonization at the level of fermionic kinetic theory, as the occupation of an electron-hole pair near one of the Fermi points integrated over the center of mass momentum is equivalent to a collective boson emitted/absorbed in a course of hole diffusion. It will be shown in the subsequent section that structurally the same expression for \mathcal{B} can be obtained from a purely bosonic formulation of the problem. Finally, inserting Eq. (40) into Eq. (45) one finds the momentum space diffusion coefficient of spin-1/2 holes

$$\mathcal{B} = \frac{768 \ln^2(2)}{\pi} g^4 \lambda_3^2(p_F w) \left(\frac{T}{\varepsilon_F} \right)^3 p_F^2 \varepsilon_F. \quad (46)$$

The corresponding backscattering relaxation rate can be found from Einstein relation adopted to diffusion in momentum space, $\Delta p^2 = \mathcal{B} \tau_{dh}$. The notation τ_{dh} is meant to emphasize kinetics of a deep hole as opposed to earlier notation τ_{qh} describing quasiholes near Fermi

energy. Thus for $\Delta p^2 \simeq m^* T$ the result is (omitting numerical factor for brevity)

$$\tau_{dh}^{-1} \simeq g^4 \lambda_3^2(p_F w) \left(\frac{T}{\varepsilon_F} \right)^2. \quad (47)$$

Finally we recall that the mobility of particles μ is related to the diffusion constant by the simple kinetic formula $\mu = T/\mathcal{B}$, and therefore $\mu \propto 1/T^2$.

The result is different in the spinless case. From Eqs. (41), (42) and (45) one finds $\mathcal{B} \propto T^5$ in both cases, modulo a logarithmic factor $\ln^2 T$ in the Coulomb case, and thus $\tau_{dh}^{-1} \propto T^4$ and $\mu \propto 1/T^4$. The results discussed in this section are again perturbative in the interaction. The power laws in the temperature dependence of relaxation rates are, however, generic and also apply to the strongly interacting regime, as we further elaborate below, see also Refs. [67, 68].

2.5. Electron-phonon relaxation rates. Apart from the purely electronic mechanisms of relaxation electrons may scatter on phonons, disorder, and sample imperfections thus relaxing their energy and momentum. At extremely low temperatures phonons are not expected to be efficient at cooling the electronic sub-system. On the other hand, electron-phonon scattering has no such severe phase space restrictions like the three-particle collisions considered above. It is thus instructive to estimate the temperature dependence for the corresponding relaxation rate. Unlike the previous studies of electron-phonon relaxation in multichannel quantum wires [73, 74], and phonon-induced backscattering relaxation [75, 76], we focus on the complementary effect of soft collisions in a single-channel geometry of strictly 1D electrons and 3D phonons.

The coupling of electrons and phonons is described by the collision integral [77]

$$\text{St}\{n_p, N_q\} = \\ = \sum_{p'q} W_- [n_{p'}(1 - n_p)N_q - n_p(1 - n_{p'})(1 + N_q)] + \\ + \sum_{p'q} W_+ [n_{p'}(1 - n_p)(1 + N_q) - n_p(1 - n_{p'})N_q], \quad (48)$$

where the scattering rate

$$W_{\pm}(p, p', q) = (2\pi) |A(q)|^2 \delta(\varepsilon_p - \varepsilon_{p'} \pm \omega_q) \delta_{p=p' \pm q_x} \quad (49)$$

describes phonon emission and absorption processes with an amplitude

$$A(q) = \sqrt{\frac{1}{2\varrho \mathcal{V} \omega_q}} (D|q| + i\Lambda).$$

Here we took into account that at the level of the leading Born approximation, the probabilities of scattering for direct and reverse processes are the same. In the amplitude we include both deformation (D) and piezoelectric (Λ) couplings, ϱ is the mass density, q_x the phonon wave-vector along the wire, and \mathcal{V} is the system volume. For simplicity we assume only a single acoustic branch $\omega_q = s|q|$, with sound velocity s .

For equilibrium Fermi and Bose distribution functions of electrons and phonons respectively, $n_p \rightarrow f_p$ and $N_q \rightarrow b_q$, the collision integral in Eq. (48) vanishes due to detailed balance condition. As in the above example of the distribution imbalance relaxation, we then assume that electrons are hot, that is, at an excess temperature $T + \Delta T$ with respect to the temperature T of lattice phonons. Electron-phonon collisions tend to relax ΔT , and the corresponding rate for relaxation can be found by projecting the collision integral onto the energy mode,

$$\sum_p \epsilon_p \dot{n}_p = - \sum_p \epsilon_p \text{St}\{n_p, N_q\},$$

with $\epsilon_p = \varepsilon_p - \varepsilon_F$. To linear order in ΔT one finds from the phonon emission processes of hot electrons, $\partial_t \Delta T = -\Delta T / \tau_{ep}$, where

$$\tau_{ep}^{-1} = -\frac{6v_F}{\pi T^3 L} \times \sum_{pp'q} W \epsilon_p \omega_q f_{\varepsilon_p} (1 - f_{\varepsilon_p}) (f_{\varepsilon_p + \omega_q} + b_{\omega_q}). \quad (50)$$

Upon completion of the remaining momentum integrations, we then find to leading order in T

$$\tau_{ep}^{-1} = \frac{9\zeta(3)}{8\pi^3} T (\Lambda^2 / s^2 v_F \varrho). \quad (51)$$

The scattering rate due to the deformation potential is parametrically weaker, scaling as $\tau_{ep}^{-1} \propto T^3$. The backscattering mechanism results in an activated temperature dependence $\propto e^{-T_A/T}$ with $T_A = 2sp_F$. It is straightforward to generalize Eq. (51) to the case when electronic relaxation occurs via several acoustic branches. Notice also that the piezoelectric potential may have complicated angular dependence in case of wires oriented arbitrarily with respect to the crystallographical axis of the sample. A proper angular averaging would change then numerical factors in Eq. (51) where we took the simplest geometry. Luttinger liquid effects lead to renormalization of the linear- T behavior and transform it into a power-law with interaction dependent exponent $\propto T^K$, where $K = v_F/u$ is the ratio

of Fermi and plasmon velocities. In the TL model $u = v_F \sqrt{1 + V_0/\pi v_F}$.

2.6. Spin-charge scattering rates. The applicability of the Born approximation, used to construct the quantum amplitude for triple particle processes captured by Eq. (6), requires that incoming spin-1/2 quasiparticles have sufficiently high energy compared to the typical scale of interparticle interaction $\varepsilon \gg m^* v_F V_0$.

In the generic interacting environment of a 1D quantum fluid, quasiparticle excitations break down into spin and charge modes. At the level of linear Luttinger liquid theory, spin-charge separation is an exact property of the model [14]. At weak coupling, the splitting between velocities of collective spin (v_σ) and charge (v_ρ) density waves is related to the forward scattering component of the interaction $v_\rho - v_\sigma \sim V_0$ (recall that for repulsive interactions $v_\rho > v_\sigma$). Assuming then thermal excitations with $\varepsilon \sim T$, the Born condition can be equivalently formulated as $T/(m^* v_F) \gg v_\rho - v_\sigma$. In other words, for fermionic quasiparticles to preserve their integrity the excitation energy (or temperature) should be bigger than the energy scale of spin-charge separation.

The interplay of spectrum nonlinearities and interactions leads to spin-charge coupling [78, 79]. Although irrelevant in the renormalization group sense, the newly emerging higher order operators capture the attenuation of quasiparticles. The kinetic properties of 1D quantum liquids with spin-charge coupling are not fully understood. There are basically two possible approaches one may pursue. The first is to refermionize the nonlinear bosonic theory to obtain an effective description in terms of dressed quasiparticles: holons and spinons. Holon relaxation was considered in Refs. [36, 37] based on non-Abelian bosonization [80]. The advantage of this complex theory is that, in principle, it allows to go beyond the weakly interacting limit for spinful fermions. Alternatively, one may choose to continue working in bosonic language. In the limit of weak backscattering one can then account for spin-charge interaction perturbatively in the basis of well-defined spin and charge modes. This second procedure is limited to weak interactions $V_{2pF} \ll V_0 \ll v_F$. To complement previous studies, we follow in this section the second path. In part this will enable us to explore the fermion-boson duality. We delegate technical details of bosonization to the Appendix (see full text) and elucidate here the impact of spin-charge scattering on various decay rates.

The lowest order nonlinearity, compatible with SU(2) symmetry of the problem is cubic. It contains

one charge and two spin operators. Treating this term in a perturbative expansion generates a collision kernel that describes the decay of a plasmon into two spin modes $\rho \rightarrow \sigma\sigma$. It reads

$$\text{St}\{N^\rho, N^\sigma\} = - \sum_{q_1 q_2} W [N_q^\rho(1+N_{q_1}^\sigma)(1+N_{q_2}^\sigma) - (1+N_q^\rho)N_{q_1}^\sigma N_{q_2}^\sigma], \quad (52)$$

where $N^{\rho/\sigma}$ are the bosonic occupations of charge (ρ) and spin (σ) excitations. The scattering probability

$$W = 2\pi|A|^2 \delta_{q=q_1+q_2} \delta(\omega_q^\rho - \omega_{q_1}^\sigma - \omega_{q_2}^\sigma) \quad (53)$$

contains an amplitude scaling cubically with momenta of the bosons $|A|^2 = (\pi^3/8L)|q||q_1||q_2|\Gamma_{\rho\sigma\sigma}^2$. The perturbative result for the coupling constant is $\Gamma_{\rho\sigma\sigma} = V'_{2p_F}/\sqrt{2}\pi^2$, where the prime denotes the derivative with respect to p_F . Note that it thus vanishes for the integrable case of constant interaction. At smallest momenta the dispersion relations are linear $\omega^{\rho/\sigma} = v_{\rho/\sigma}|q|$. The kinematics of this process uniquely fixes momenta in the final state. Indeed, for concreteness let $q > 0$, then $q_1 = q(v_\rho + v_\sigma)/2v_\sigma$ and $q_2 = -q(v_\rho - v_\sigma)/2v_\sigma$, which means that spin waves are counterpropagating. From dimensional analysis it becomes apparent that $\text{St}\{N^\rho, N^\sigma\}$ defines the decay rate of a plasmon, and one can introduce the characteristic rate

$$\tau_\rho^{-1} = \sum_{q_1 q_2} W \simeq q^3 (V'_{2p_F})^2 \frac{v_\rho^2 - v_\sigma^2}{v_\sigma^3}.$$

For the sake of an estimate, one may now take $V'_{2p_F} \sim V_{2p_F}/p_F$ and replace $v_{\rho/\sigma} \sim v_F$, except in their difference where $v_\rho - v_\sigma \sim V_0$, and finds the life-time

$$\tau_\rho^{-1} \sim \varepsilon_F \frac{V_0}{v_F} \left(\frac{V_{2p_F}}{v_F}\right)^2 \left(\frac{q}{p_F}\right)^3. \quad (54)$$

Notice the nonanalytic dependence of interaction $\propto V^3$. For thermal plasmons the relaxation rate can be calculated from Eq. (52) by a projection onto an energy mode. We observe that as $|q_2| \ll q$ the relaxation occurs by small energy transfer from right-movers to left-movers (or vice versa) so that interbranch processes are slow. Assuming that right-moving excitations are hotter by ΔT , and in complete analogy to the fermionic case, we find

$$\sum_{q>0} \omega_q^\rho \partial_t N_q^\rho = \sum_{q>0} \omega_q^\rho \text{St}\{N^\rho, N^\sigma\}. \quad (55)$$

The left-hand-side is straightforward to evaluate further, noting that

$$\partial_t N_q^\rho = \partial_T N_q^\rho \partial_t \Delta T = \frac{\omega_q^\rho \partial_t \Delta T}{4T^2 \text{sh}^2(\omega_q^\rho/2T)}, \quad (56)$$

which after momentum integration gives a factor of $(\pi LT/6v_\rho)\partial_t \Delta T$. The right-hand-side can be linearized with the usual substitution $N_q = b_q + b_q(1+b_q)\phi_q$, where $\phi_q = \omega_q \Delta T/T^2$ for the case of a thermal imbalance. After some algebra one finds

$$\begin{aligned} \sum_{q>0} \omega_q^\rho \text{St}\{N^\rho, N^\sigma\} &= \\ &= -\Delta T \sum_{qq_1 q_2} (\omega_q^\rho/T)^2 W (1+b_q^\rho) b_{q_1}^\sigma b_{q_2}^\sigma, \end{aligned} \quad (57)$$

where we repeatedly used energy conservation and the detailed balance condition. Performing the final integrations, we then arrive at

$$\tau_\rho^{-1} = \frac{3\pi}{16} \Gamma_{\rho\sigma\sigma}^2 (T^3/v_\sigma^4) F(v_\sigma/v_\rho), \quad (58)$$

where the dimensionless function reads

$$F(\kappa) = \kappa(1-\kappa^2) \int_0^\infty dz z^5 (1+b_z) b_{z+} b_{z-} \quad (59)$$

with $b_z = (e^z - 1)^{-1}$ and $z_\pm = z(1 \pm \kappa)/2$. One can readily check that $F \rightarrow 32\pi^4/15$ in the limit $\kappa \rightarrow 1$.

The same scattering process can be alternatively viewed as a mutual spin-charge friction. Physically, this is analogous to the electron-phonon drag effect, typically studied in the context of thermoelectricity, or Coulomb drag in double-layers [81] and spin Coulomb drag [82]. In each of these examples momentum transfer between interactively coupled systems leads to dragging of one sub-system by the flow of the other. For instance, in the context of spin physics in Luttinger liquids, generation of spin current is possible by Coulomb drag [83]. To estimate the spin-charge drag rate, one can consider a boosted frame of reference for spin and charge excitations with mismatched boost velocities $u_{\rho/\sigma}$. The scattering leads to momentum exchange between spins and charge and, as a result, to relaxation $\partial_t u_\rho = -(u_\rho - u_\sigma)/\tau_{\rho\sigma}$. To capture this effect, we linearize the collision integral for $N(\omega_q - uq)$ with respect to u , for both spin and charge occupations, and then project onto the momentum mode to calculate the rate of momentum loss by (e.g.) charge modes

$$\begin{aligned} \partial_t P_\rho &= \sum_q q \text{St}\{N^\rho, N^\sigma\} = \\ &= -\frac{\Delta u}{T} \sum_{qq_1 q_2} q^2 W (1+b_q^\rho) b_{q_1}^\sigma b_{q_2}^\sigma. \end{aligned} \quad (60)$$

When we compare this to $\partial_t P_\rho = (\pi L T^2 / 3 v_\rho^3) \partial_t u_\rho$, we find that thus defined drag relaxation rate $\tau_{\rho\sigma}^{-1}$ coincides with Eq. (58) up to a constant factor. It is perhaps useful to note that $\tau_{\rho\sigma}^{-1} \propto T^3$ is consistent with the expectation that Coulomb drag transresistivity between double quantum wires due to interwire momentum transfer from spin-charge coupling at zero magnetic field scales as $\rho_D \propto T^5$ [37]. Indeed, this rate is accompanied by two thermal phase space factors $\sim T$ per wire, thus leading to T^5 . In the drag problem, the factor q^3 results from the width of the dynamic charge structure factor and the underlying scattering that gives rise to q^3 is precisely the decay of a charge boson into two spin bosons.

The next in complexity is a quartic nonlinearity in spin-charge coupling which leads to two-boson scattering $\rho\sigma \rightarrow \rho\sigma$. In particular, we consider backscattering of spin excitations on plasmons. Such scattering processes correspond to the diffusion of spin excitations near the spectral edge, and the goal is to calculate the corresponding diffusion constant. As alluded to earlier, the discussion parallels the previous calculation of the backscattering of a deep hole in the fermionic language. The corresponding collision integral reads

$$\begin{aligned} \text{St}\{N^\rho, N^\sigma\} = & \\ = - \sum_{q_2 q'_1 q'_2} W & \left[N_{q_1}^\sigma (1 + N_{q'_1}^\sigma) N_{q_2}^\rho (1 + N_{q'_2}^\rho) - \right. \\ & \left. - N_{q'_1}^\sigma (1 + N_{q_1}^\sigma) N_{q_2}^\rho (1 + N_{q'_2}^\rho) \right]. \end{aligned} \quad (61)$$

The scattering rate for this process is given by

$$W = 2\pi |A|^2 \delta_{Q, Q'} \delta(E - E') \quad (62)$$

with the amplitude $|A|^2 = (\Gamma_{\rho\sigma} / 8L)^2 |q_1 q'_1 q_2 q'_2|$, where the coupling constant at the perturbative level reads $\Gamma_{\rho\sigma} = V_{2p_F}''$. The notations for momentum and energy conservation here are $Q = q_1 + q_2$ and $E = \omega_{q_1}^\sigma + \omega_{q_2}^\rho$. Let momenta q_1 and q'_1 correspond to the initial and final states of the spin excitation near the spectral edge. Kinematically each momentum is of the order of the Fermi momentum, $q_1 \sim q'_1 \sim p_F$, while their difference, $q'_1 - q_1 \sim T/v_F$, is small. This corresponds to a small momentum change in each collision, which is accompanied by the excitation of plasmons at low momenta $q_2 \sim q'_2 \sim T/v_F$. For this reason the low-energy description based on Eq. (61) is sufficient to capture this physics. Under the specified conditions and n complete analogy with the fermionic case, we can convert the collision integral into a Fokker–Planck differential operator, thus describing the diffusion of spins. Indeed,

for momenta $q \sim p_F$ the occupation is small, $N_q^\sigma \propto e^{-\varepsilon_\sigma/T} \ll 1$, and correspondingly $1 + N^\sigma \approx 1$, where ε_σ is the band width of spin excitations. The latter is parametrically of the order of the spin exchange coupling. Viewing Eq. (61) as the collision integral for spins, we thus write

$$\text{St}\{N_{q_1}^\sigma\} = \sum_{q'_1} [\mathcal{P}(q_1, q'_1) N_{q'_1}^\sigma - \mathcal{P}(q'_1, q_1) N_{q_1}^\sigma], \quad (63)$$

where

$$\mathcal{P}(q'_1, q_1) = \sum_{q_2 q'_2} W N_{q_2}^\rho (1 + N_{q'_2}^\rho) \quad (64)$$

is the transition rate for spin scattering processes. More specifically, it describes a collision with momentum transfer δq , in which a spin is scattered out of the initial state q_1 . It can thus be rewritten as $\mathcal{P}(q'_1, q_1) = \mathcal{P}_{\delta q}(q_1)$, and following the same prescription, the transition rate for the inverse process reads $\mathcal{P}(q_1, q'_1) = \mathcal{P}_{-\delta q}(q_1 + \delta q)$. Performing then a small-momentum expansion,

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(q_1, q'_1) N_{q'_1}^\sigma & \approx \mathcal{P}_{-\delta q}(q_1) N_{q_1}^\sigma + \\ & + \delta q \partial_{q_1} [\mathcal{P}_{-\delta q}(q_1) N_{q_1}^\sigma] + \frac{\delta q^2}{2} \partial_{q_1}^2 [\mathcal{P}_{-\delta q}(q_1) N_{q_1}^\sigma], \end{aligned} \quad (65)$$

the collision integral of spin excitations takes the simplified form

$$\begin{aligned} \text{St}\{N_{q_1}^\sigma\} = -\partial_{q_1} [\mathcal{A}_{\rho\sigma}(q_1) N_{q_1}^\sigma] + \\ + \frac{1}{2} \partial_{q_1}^2 [\mathcal{B}_{\rho\sigma}(q_1) N_{q_1}^\sigma], \end{aligned} \quad (66)$$

where

$$\mathcal{A}_{\rho\sigma} = - \sum_{\delta q} \delta q \mathcal{P}_{\delta q}(q_1), \quad \mathcal{B}_{\rho\sigma} = \sum_{\delta q} \delta q^2 \mathcal{P}_{\delta q}(q_1). \quad (67)$$

At this stage we focus on the derivation of $\mathcal{P}_{\delta q}(q_1)$. The momentum conservation implicit in W removes the q'_2 integration. We then notice that distribution functions limit the typical momentum transfer and momenta of plasmons to $q_2 \sim \delta q \sim T/v_F$. At the same time, the typical momentum of spins at the spectral edge is $q_1 \sim p_F$ and it is sufficient to calculate $\mathcal{P}_{\delta q}(p_F)$. With these observations at hand, we can now approximate energy conservation by

$$\delta(E - E') \approx \frac{1}{v_\rho} \delta(q_2 - \delta q/2).$$

This removes the q_2 integral, and we thus arrive at

$$\mathcal{P}_{\delta q} = \frac{V_{\rho\sigma}^2}{1024 L v_\rho} \frac{(\delta q/p_F)^2}{\text{sh}^2(v_\rho \delta q/4T)}, \quad (68)$$

with the notation $V_{\rho\sigma} = p_F^2 \Gamma_{\rho\sigma}$. Finally, this defines the diffusion coefficient of spins in momentum space associated to $\rho\sigma \rightarrow \rho\sigma$ scattering channel

$$\mathcal{B}_{\rho\sigma} = \frac{\pi^3}{30} \left(\frac{V_{\rho\sigma}}{v_\rho} \right)^2 \left(\frac{T}{p_F v_\rho} \right)^5 p_F^3 v_\rho. \quad (69)$$

In addition to spin-charge scattering, nonlinearities also allow for spin-spin scattering. Importantly for the momentum space diffusion, scattering processes with spin-flips are enhanced. They are thus described by a different scaling of the probability with momentum as compared to Eq. (68). That is,

$$\mathcal{P}_{\delta q} = \frac{V_{\sigma\sigma}^2}{8\pi^2 L v_\sigma} \frac{1}{\text{sh}^2(v_\sigma \delta q / 4T)}, \quad (70)$$

and this crucial detail is technically speaking traced back to the non-commutativity of spin operators when calculating the corresponding amplitude. The importance of spin flips is also apparent at the level of fermions. Indeed, the ratio of scattering rates between spinless and spinful cases has exactly the same parameter $(q/p_F)^2 \ll 1$ as the ratio between probabilities in Eqs. (68) and (70). The resulting diffusion constant in the spin-spin channel is then

$$\mathcal{B}_{\sigma\sigma} = \frac{4\pi}{15} \left(\frac{V_{\sigma\sigma}}{v_\sigma} \right)^2 \left(\frac{T}{p_F v_\sigma} \right)^3 p_F^3 v_\sigma. \quad (71)$$

A microscopic calculation of the respective coupling constants for the different scattering channels is a challenging task. Known approaches include weak coupling results obtained via mobile impurity model [69], results for Kondo polarons [66], and calculations in the strong interaction limit within the non-Abelian bosonization framework [37], as well as a model departing from the Wigner crystal limit [84].

Two-boson processes also contribute to the thermalization rates [33, 85, 86]. For charge excitations this results in a subleading correction to Eq. (58). In the spin sector the situation is, however, different since at the cubic level of nonlinearities spins are kinematically forbidden to scatter. In both cases nonlinearity of the bosonic spectrum plays an important role to open phase space for such collisions. In order to generalize the present model, consider first the charge sector and assume a weakly anharmonic dispersion of plasmons, $\omega_q^\rho \approx v_\rho |q| (1 - (\xi q)^2)$. Assume now that a right-moving boson with momentum $q_1 \gtrsim T/v_\rho$ is injected into the Luttinger liquid. For this setting the collision term from Eq. (61), with replacement $N^\sigma \rightarrow N^\rho$, dictates that the dominant process limiting the lifetime

of the injected boson is due to scattering with inter-branch momentum transfer. Indeed, for $q_1, q_2, q'_1 > 0$ momentum conservation implies that q'_2 is order q^3 , since energy conservation fixes $q'_2 \approx -(3\xi^2/2)q_1 q_2 q'_1$. Curiously, even though a finite ξ is crucial to resolve the kinematic constraints it drops out from the corresponding rate provided that $q_1 \ll \sqrt[3]{T/v_\rho \xi^2}$. In this regime $v_\rho |q'_2| \ll T$, implying that $N_{q'_2}^\rho \approx T/\omega_{q'_2}^\rho$ and q'_2 cancels out from W . The decay rate then scales parametrically as $\tau_\rho^{-1} \propto T q^4$. This estimate is applicable as long as $T/v_\rho \lesssim q \ll \sqrt[3]{T/v_\rho \xi^2}$.

For thermal plasmons, this rate can be estimated more accurately by projecting the collision integral onto the energy mode. Assuming that the boson with momentum q_1 is ‘‘hotter’’ by a temperature difference ΔT , one finds upon repeating the steps from the previous similar calculations

$$\tau_\rho^{-1} = \frac{6v_\rho}{\pi L T} \sum_{\substack{q_1, q_2 \\ q'_1, q'_2}} \frac{\omega_{q_1} \omega_{q_2}}{T^2} \times \\ \times W N_{q_1}^\rho N_{q_2}^\rho (1 + N_{q'_1}^\rho) (1 + N_{q'_2}^\rho). \quad (72)$$

For the kinematics of the process specified above, one sum is removed by momentum conservation setting $q'_1 = q_1 + q_2$. Energy conservation removes another integral, setting $q'_2 = -(3\xi^2/2)q_1 q_2 (q_1 + q_2)$. The remaining integrals can, after rescaling of momentum variables in units of temperature, be brought to a dimensionless double-integral. This results in

$$\tau_\rho^{-1} = \frac{3c_{12}}{(4\pi)^4} \left(\frac{V_{\rho\rho}}{v_\rho} \right)^2 T \left(\frac{T}{p_F v_\rho} \right)^4, \quad (73)$$

where the coefficient

$$c_{12} = \int_0^\infty \frac{x^2 y^2 (x+y) e^{x+y} dx dy}{(e^x - 1)(e^y - 1)(e^{x+y} - 1)}$$

and $V_{\rho\rho} = p_F^2 \Gamma_{\rho\rho}$.

The two-spin scattering can be analyzed in the same way, starting out from Eq. (61) by changing $N^\rho \rightarrow N^\sigma$. The crucial difference is in the momentum dependence of the scattering rate, which is enhanced by spin-flip processes. The resulting spin wave thermalization rate due to two-boson scattering processes reads

$$\tau_\sigma^{-1} \sim \left(\frac{V_{\sigma\sigma}}{v_\sigma} \right)^2 T \left(\frac{T}{p_F v_\sigma} \right)^2. \quad (74)$$

This final estimate exhausts all possible scattering processes emerging from the quartic corrections to the linear Luttinger liquid model.

Funding. This work was supported by the U. S. Department of Energy (DOE), Office of Science, Basic Energy Sciences (BES) Program for Materials and Chemistry Research in Quantum Information Science under Award No. DE-SC0020313. T. M. acknowledges financial support by Brazilian agencies CNPq and FAPERJ.

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

REFERENCES

1. A. A. Abrikosov, L. P. Gor'kov, and I. E. Dzyaloshinskii, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*, ed. by R. S. Silverman, Dover Publ. (1975).
2. D. Pines, *Elementary Excitations in Solids: Lectures on Phonons, Electrons, and Plasmons*, CRC Press (1999).
3. L. D. Landau, *Sov. Phys. JETP* **3**, 920 (1957); **5**, 101 (1957); **35**, 70 (1959).
4. A. A. Abrikosov and I. M. Khalatnikov, *Rep. Prog. Phys.* **22**, 329 (1959).
5. G. A. Brooker and J. Sykes, *Phys. Rev. Lett.* **21**, 279 (1968).
6. R. N. Gurzhi, A. I. Kopeliovich, and S. B. Rutkevich, *Adv. Phys.* **36**, 221 (1987).
7. P. J. Ledwith, H. Guo, and L. Levitov, *Ann. Phys.* **411**, 167913 (2019).
8. O. M. Auslaender, A. Yacoby, R. de Picciotto, K. W. Baldwin, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Science* **295**, 825 (2002).
9. M. Bockrath, D. H. Cobden, J. Lu, A. G. Rinzler, R. E. Smalley, L. Balents, and P. L. McEuen, *Nature* **397**, 598 (1999).
10. A. M. Chang, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2538 (1996).
11. A. M. Chang, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 1449 (2003).
12. T. Li, P. Wang, H. Fu, L. Du, K. A. Schreiber, X. Mu, X. Liu, G. Sullivan, G. A. Csáthy, X. Lin, and R.-R. Du, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 136804 (2015).
13. F. D. M. Haldane, *J. Phys. C: Sol. St. Phys.* **14**, 2585 (1981); *Phys. Rev. Lett.* **47**, 1840 (1981).
14. T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension*, Clarendon Press (2004).
15. D. L. Maslov, Lecture Notes for the LXXXI Les Houches Summer School “Nanoscopic Quantum Transport” (2004).
16. S. Tomonaga, *Prog. Theor. Phys. (Kyoto)* **5**, 544 (1950).
17. J. M. Luttinger, *J. Math. Phys. N. Y.* **4**, 1154 (1963).
18. D. C. Mattis and E. H. Lieb, *J. Math. Phys.* **6**, 304 (1965); see also *Mathematical Physics in One Dimension*, Acad. Press, New York (1966).
19. I. E. Dzyaloshinskii and A. I. Larkin, *Sov. Phys. JETP* **38**, 202 (1974).
20. A. Luther and I. Peschel, *Phys. Rev. B* **9**, 2911 (1974).
21. H. Gutfreund and M. Schick, *Phys. Rev.* **168**, 418 (1968).
22. V. V. Deshpande, M. Bockrath, L. I. Glazman, and A. Yacoby, *Nature* **464**, 209 (2010).
23. A. Imambekov, T. L. Schmidt, and L. I. Glazman, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1253 (2012).
24. K. Samokhin, *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, 533 (1998).
25. A. V. Rozhkov, *Eur. Phys. J.* **47**, 193 (2005); *Phys. Rev. B* **74**, 245123 (2006); *Phys. Rev. Lett.* **112**, 106403 (2014).
26. M. Khodas, M. Pustilnik, A. Kamenev, and L. Glazman, *Phys. Rev.* **76**, 155402 (2007).
27. D. A. Bagrets, I. V. Gornyi, A. D. Mirlin, and D. G. Polyakov, *Semiconductors* **42**, 994 (2008).
28. R. G. Pereira, S. R. White, and I. Affleck, *Phys. Rev. B* **79**, 165113 (2009).
29. T. Micklitz and A. Levchenko, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 196402 (2011).
30. S. Teber, *Phys. Rev. B* **86**, 195112 (2012).
31. K. A. Matveev and A. Furusaki, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 256401 (2013).
32. Z. Ristivojevic and K. A. Matveev, *Phys. Rev. B* **87**, 165108 (2013).
33. I. V. Protopopov, D. B. Gutman, and A. D. Mirlin, *Phys. Rev. B* **90**, 125113 (2014); *Phys. Rev. B* **91**, 195110 (2015).
34. L. Balents and R. Egger, *Phys. Rev. B* **64**, 035310 (2001).
35. T. Karzig, L. I. Glazman, and F. von Oppen, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 226407 (2010).
36. T. L. Schmidt, A. Imambekov, and L. I. Glazman, *Phys. Rev. B* **82**, 245104 (2010).

37. R. G. Pereira and E. Sela, Phys. Rev. B **82**, 115324 (2010).
38. A. Levchenko, Phys. Rev. Lett. **113**, 196401 (2014).
39. M. Bard, I. V. Protopopov, and A. D. Mirlin, Phys. Rev. B **97**, 195147 (2018).
40. K. A. Matveev and Z. Ristivojevic, Phys. Rev. B **102**, 045401 (2020).
41. Z. Yao, H. Postma, L. Balents, and C. Dekker, Nature **402**, 273 (1999).
42. O. M. Auslaender, A. Yacoby, R. de Picciotto, K. W. Baldwin, L. N. Pfeiffer, and K. W. West Phys. Rev. Lett. **84**, 1764 (2000).
43. O. M. Auslaender, H. Steinberg, A. Yacoby, Y. Tserkovnyak, B. I. Halperin, K. W. Baldwin, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, Science **308**, 88 (2005).
44. Y. Jompol, C. J. B. Ford, J. P. Griffiths, I. Farrer, G. A. C. Jones, D. Anderson, D. A. Ritchie, T. W. Silk, and A. J. Schofield, Science **325**, 597 (2009).
45. H. Steinberg, G. Barak, A. Yacoby, L. N. Pfeiffer, K. W. West, B. I. Halperin, and K. Le Hur, Nature Phys. **4**, 116 (2007).
46. H. Kamata, N. Kumada, M. Hashisaka, K. Muraki, and T. Fujisawa, Nature Nanotechnol. **9**, 177 (2014).
47. E. Slot, M. A. Holst, H. S. J. van der Zant, and S. V. Zaitsev-Zotov, Phys. Rev. Lett. **93**, 176602 (2004).
48. L. Venkataraman, Y. S. Hong, and P. Kim, Phys. Rev. Lett. **96**, 076601 (2006).
49. A. N. Aleshin, H. J. Lee, Y. W. Park, and K. Akagi, Phys. Rev. Lett. **93**, 196601 (2004).
50. J. D. Yuen, R. Menon, N. E. Coates, E. B. Namdas, S. Cho, S. T. Hannahs, D. Moses, and A. J. Heeger, Nature Mater. **8**, 572 (2009).
51. C. Blumenstein, J. Schaefer, S. Mietke, A. Dollinger, M. Lochner, X. Y. Cui, L. Patthey, R. Matzdorf, and R. Claessen, Nature Phys. **7**, 776 (2011).
52. G. Barak, H. Steinberg, L. N. Pfeiffer, K. W. West, L. Glazman, F. von Oppen, and A. Yacoby, Nature Phys. **6**, 489 (2010).
53. G. Granger, J. P. Eisenstein, and J. L. Reno, Phys. Rev. Lett. **102**, 086803 (2009).
54. C. Altimiras, H. le Sueur, U. Gennser, A. Cavanna, D. Mailly, and F. Pierre, Nature Phys. **6**, 34 (2010).
55. H. le Sueur, C. Altimiras, U. Gennser, A. Cavanna, D. Mailly, and F. Pierre, Phys. Rev. Lett. **105**, 056803 (2010).
56. M. G. Prokudina, S. Ludwig, V. Pellegrini, L. Sorba, G. Biasiol, and V. S. Khrapai, Phys. Rev. Lett. **112**, 216402 (2014).
57. J. R. Taylor, *Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions*, Dover Publ. (2006).
58. Y. M. Sirenko, V. Mitin, and P. Vasilopoulos, Phys. Rev. B **50**, 4631 (1994).
59. A. M. Lunde, K. Flensberg, and L. I. Glazman, Phys. Rev. B **75**, 245418 (2007).
60. A. Levchenko, Z. Ristivojevic, and T. Micklitz, Phys. Rev. B **83**, 041303(R) (2011).
61. B. Sutherland, *Beautiful Models*, World Sci., Singapore (2004).
62. T. Cheon and T. Shigehara, Phys. Rev. Lett. **82**, 2536 (1999).
63. T. Ogawa, A. Furusaki, and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. **68**, 3638 (1992).
64. A. H. Castro Neto and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. B **53**, 9713 (1996).
65. A. Imambekov and L. I. Glazman, Phys. Rev. Lett. **100**, 206805 (2008).
66. A. Lamacraft, Phys. Rev. Lett. **101**, 225301 (2008).
67. M. Schechter, D. M. Gangardt, and A. Kamenev, Ann. Phys. **327**, 639 (2012).
68. K. A. Matveev and A. V. Andreev, Phys. Rev. B **86**, 045136 (2012).
69. M.-T. Rieder, A. Levchenko, and T. Micklitz, Phys. Rev. B **90**, 245434 (2014).
70. T. Micklitz, J. Rech, and K. A. Matveev, Phys. Rev. B **81**, 115313 (2010).
71. M.-T. Rieder, T. Micklitz, A. Levchenko, and K. A. Matveev, Phys. Rev. B **90**, 165405 (2014).
72. H. Risken, *The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications*, Springer (1996).
73. V. L. Gurevich, V. B. Pevzner, and K. Hess, Phys. Rev. B **51**, 5219 (1995).
74. A. Sergeev, M. Yu. Reizer, and V. Mitin, Phys. Rev. Lett. **94**, 136602 (2005).
75. G. Seelig and K. A. Matveev, Phys. Rev. Lett. **90**, 176804 (2003).
76. G. Seelig, K. A. Matveev, and A. V. Andreev, Phys. Rev. Lett. **94**, 066802 (2005).

77. A. Levchenko and J. Schmalian, *Ann. Phys.* **419**, 168218 (2020).
78. S. Brazovskii, F. Matveenko, and P. Nozieres, *JETP Lett.* **58**, 796 (1993).
79. C. Nayak, K. Shtengel, D. Orgad, M. P. A. Fisher, and S. M. Girvin, *Phys. Rev. B* **64**, 235113 (2001).
80. A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, and A. M. Tsvelik, *Bosonization and Strongly Correlated Systems*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1998).
81. B. N. Narozhny and A. Levchenko, *Rev. Mod. Phys.* **88**, 025003 (2016).
82. I. D’Amico and G. Vignale, *Phys. Rev. B* **62**, 4853 (2000).
83. M. Pustilnik, E. G. Mishchenko, and O. A. Starykh, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 246803 (2006).
84. K. A. Matveev, A. V. Andreev, and A. D. Klironomos, *Phys. Rev. B* **90**, 035148 (2014).
85. J. Lin, K. A. Matveev, and M. Pustilnik, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 016401 (2013).
86. S. Apostolov, D. E. Liu, Z. Maizelis, and A. Levchenko, *Phys. Rev. B* **88**, 045435 (2013).

СИММЕТРИЙНЫЙ ПОДХОД В ЗАДАЧЕ О РАСШИРЕНИИ ГАЗОВ В ВАКУУМ

Е. А. Кузнецов^{a,b,c}, М. Ю. Каган^{d,e}*

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

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

^c *Сколковский Институт науки и технологий
121205, Сколково, Московская обл., Россия*

^d *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
109028, Москва, Россия*

^e *Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук
119334, Москва, Россия*

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

Представлен краткий обзор результатов о разлете квантовых и классических газов в вакуум на основе использования симметрий. Для квантовых газов в приближении Гросса–Питаевского дополнительные симметрии возникают для газов с химическим потенциалом μ , зависящим от плотности n степенным образом с показателем $\nu = 2/D$, где D — размерность пространства. Для газовых конденсатов бозе-атомов при температурах $T \rightarrow 0$ эта симметрия возникает для двумерных систем. При $D = 3$ и, соответственно, $\nu = 2/3$ такая ситуация реализуется для взаимодействующего ферми-газа при низких температурах в так называемом унитарном пределе [1]. Эта же симметрия для классических газов в трехмерной геометрии возникает для газов с показателем адиабаты $\gamma = 5/3$. Оба эти факта были обнаружены в 1970 году независимо Талановым [2] для двумерного нелинейного Шредингера (совпадающего с уравнением Гросса–Питаевского), описывающего стационарную самофокусировку света в средах с керровской нелинейностью, а для классических газов — Анисмовым и Лысыковым [3]. В квазиклассическом пределе уравнения Гросса–Питаевского совпадают с уравнениями гидродинамики идеального газа с показателем адиабаты $\gamma = 1 + 2/D$. Автомодельные решения в этом приближении описывают на фоне расширяющегося газа угловые деформации газового облака в рамках уравнений типа Ермакова. Такого рода изменения формы расширяющегося облака наблюдаются в многочисленных экспериментах как при разлете газа после воздействия мощного лазерного излучения, например, на металл, так и при разлете квантовых газов в вакуум.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040222

1. ВВЕДЕНИЕ: ИСТОРИЯ ВОПРОСА

Симметрии в физике всегда играли ключевую роль при получении точных соотношений и результатов, на них основанных. Вряд ли имеет смысл пе-

речислять много различных физических примеров, где используются симметрии. Нам кажется достаточным сослаться на курс Ландау–Лифшица [4], где их великое множество. В данном кратком обзоре мы рассмотрим, как симметрии реализуются в задаче разлета в вакуум квантовых и классических газов в рамках соответственно уравнений Гросса–Питаевского (ГП) и уравнений газовой динамики (уравнения непрерывности и уравнения Эйле-

* E-mail: kuznetso@itp.ac.ru

ра для одноатомных газов с показателем адиабаты $\gamma = 5/3$). Если говорить о квантовых газах, то мы будем рассматривать такие, для которых химический потенциал μ зависит от плотности n степенным образом с показателем $\nu = 2/D$, где D — размерность пространства. Именно только для таких значений показателя ν возникает дополнительная симметрия. Отметим, что в приближении ГП при температуре $T \rightarrow 0$ для конденсата слабонеидеального бозе-газа главным взаимодействием является s -рассеяние. Если длина рассеяния a_s положительна, то между атомами имеется отталкивание и состояние такого газа в магнитооптических ловушках оказывается устойчивым. При этом химический потенциал $\mu = gn$, где $g = 4\pi\hbar^2 a_s/m$. Таким образом, только для двумерного бозе-газа появляется симметрия, о которой пойдет речь ниже. В случае отрицательной длины рассеяния между бозе-атомами возникает притяжение. В нелинейной оптике такого рода притяжение приводит к самофокусировке света для сред с керровской нелинейностью. Отталкивание, в свою очередь, приводит к дефокусировке светового пучка, которая приводит к тем же самым эффектам, что и дифракция в поперечном направлении к пучку. В случае $a_s < 0$ бозе-конденсаты оказываются неустойчивыми, что приводит к формированию сжимающихся областей газа — коллапсу (см. обзор [5] и ссылки там), наблюдаемому в эксперименте [6, 7]. Чтобы получить неустойчивое значение длины рассеяния в экспериментах, используют резонанс Фешбаха [8, 9], позволяющий изменять a_s в больших пределах: от очень больших положительных значений до сильно отрицательных. Если для бозе-атомов в случае отрицательных a_s возникает коллапс, то для ферми-газов s -притяжение обеспечивает образование куперовских пар, которые при $T \rightarrow 0$ образуют сверхтекучий бозе-конденсат. Варьируя длину рассеяния с помощью резонанса Фешбаха, можно создать бозе-конденсат в так называемом унитарном пределе [1], который реализуется при условии $(|a_s|k_F)^{-1} \rightarrow 0$, где $p_F = \hbar k_F$ — импульс Ферми. В этом режиме положительный химический потенциал $\mu(n) = 2(1 + \beta)\varepsilon_F$, где в соответствии с работами [10–13] $\beta = -0.63$ есть универсальная константа, а

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (6\pi^2 n)^{2/3}$$

— локальная энергия Ферми. Величина m представляет собой удвоенную массу ферми-атома. В унитарном пределе, таким образом, химический потенциал имеет степенную зависимость от плотности с показателем $\nu = 2/3$.

Наиболее простая симметрия в случае степенной зависимости химического потенциала от плотности — это симметрия относительно растяжений пространственных координат и времени вида

$$\mathbf{r} \rightarrow \alpha \mathbf{r}, \quad t \rightarrow \alpha^2 t, \quad (1)$$

где α — скейлинговый параметр. Этот факт легко проверить исходя из уравнения ГП [14] для волновой функции бозе-конденсата ψ :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + \mu(n)\psi, \quad (2)$$

где $n = |\psi|^2$. Сохранение числа частиц $N = \int |\psi|^2 d\mathbf{r}$ и степенная зависимость $\mu \propto n^{2/D}$ обеспечивают одинаковые зависимости от скейлингового параметра α кинетического члена и химического потенциала (определяющего нелинейность в (2)): они пропорциональны α^{-2} .

В нелинейной оптике и физике плазмы уравнение ГП (2) имеет название нелинейного уравнения Шредингера (НУШ). Стандартный вид НУШ возникает после приведения к безразмерному виду уравнения (2):

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{1}{2} \Delta \psi - (\nu + 1)|\psi|^{2\nu} \psi = 0, \quad (3)$$

которое представимо в гамильтоновом виде [5]

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\delta H}{\delta \psi^*}$$

с гамильтонианом

$$H = \int \left[\frac{1}{2} |\nabla \psi|^2 + |\psi|^{2(\nu+1)} \right] d\mathbf{r}. \quad (4)$$

Следует отметить, что скейлинговая симметрия (1) есть также в уравнении Шредингера для движения квантовомеханической частицы в потенциале $U = \beta r^{-2}$ независимо от знака β и при любой размерности D . Эта же симметрия присутствует и для гидродинамики идеального газа с показателями адиабаты $\gamma = 5/3$ для потенциальных трехмерных течений [3] и $\gamma = 2$ в случае двумерных течений. Последнее, в частности, связано с тем, что уравнение ГП (2) в квазиклассическом пределе (приближение Томаса–Ферми) совпадает с уравнениями гидродинамики для потенциальных течений газа [15, 16], и поэтому данная симметрия сохраняется в случае газовой динамики с $\gamma = 1 + 2/D$. На это обстоятельство внимание авторов [3] обратил Дзялошинский [17].

Однако скейлинговое преобразование не исчерпывает всех симметрий уравнений (2) и (3). Более общей является симметрия относительно преобразований Таланова [2] — преобразований конформного

типа, которые включают в себя как скейлинговые преобразования амплитуды, так и изменения фазы волновой функции ψ . Это преобразование было найдено для двумерного НУШ, описывающего стационарную самофокусировку света в среде с керровской нелинейностью. Роль времени в уравнении (3) играет координата z вдоль направления распространения пучка света.

При преобразованиях Таланова общего вида (для всех $\nu = 2/D$) уравнение (3) остается инвариантным при замене волновой функции ψ , координат \mathbf{r} и времени t на новую волновую функцию $\tilde{\psi}$ и новые координаты \mathbf{r}' и время t' [18]:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{\tau}{\tau + t} \exp\left[\frac{ir^2}{4(\tau + t)}\right] \tilde{\psi}(\mathbf{r}', t'), \quad (5)$$

$$\mathbf{r}' = \frac{\mathbf{r}\tau}{\tau + t}, \quad t' = \frac{t\tau}{\tau + t}.$$

В линейной оптике эти соотношения известны как линзовые преобразования.

Важно отметить, что суперпозиция преобразований с $\lambda_1 = \tau_1^{-1}$ и $\lambda_2 = \tau_2^{-1}$ представляет преобразование (5) с $\lambda_3 = \lambda_1 + \lambda_2$. Таким образом, преобразования (5) образуют абелеву группу [18].

Прямым следствием этой симметрии является теорема вириала, полученная Власовым, Петрищевым, Талановым [19] для двумерного НУШ с кубической нелинейностью:

$$\frac{d^2}{dt^2} \int r^2 |\psi|^2 d\mathbf{r} = 4H, \quad (6)$$

Впервые эта теорема была установлена в работе [19] для фокусирующей нелинейности. Легко видеть, что уравнение (6) справедливо и в случае отталкивания (дефокусирующей нелинейности) [15, 16]. Важно, что теорема вириала (6) верна при любом значении $\nu = 2/D$ [18, 20]. Отметим, что, с точки зрения классификации, НУШ с $\nu = 2/D$ относится к так называемым критическим моделям [5, 18, 20].

Простое интегрирование уравнения (6) дает, что средний квадрат размера облака $R^2 = \int r^2 |\psi|^2 d\mathbf{r} / N$ меняется во времени квадратично:

$$NR^2 = 2Ht^2 + C_1 t + C_2. \quad (7)$$

В случае отталкивания (дефокусирующей нелинейности) гамильтониан H положителен. Поэтому при больших временах, $t \rightarrow \infty$, средний размер R растет со временем линейно. Соотношение (7) содержат две константы, C_1 и C_2 , которые являются новыми по сравнению с H и N интегралами движения. Однако

они отличаются от гамильтониана и числа частиц наличием явной зависимости от времени t :

$$C_1 = \frac{d}{dt} \int r^2 |\psi|^2 d\mathbf{r} - 4Ht, \quad (8)$$

$$C_2 = \int r^2 |\psi|^2 d\mathbf{r} - 2Ht^2 - C_1 t.$$

Такого рода интегралы относятся к неавтономным, что, как будет видно далее, не позволяет установить полную интегрируемость при автомодельной редукции квазиклассических уравнений. Примером таких неавтономных интегралов движения служит закон сохранения центра масс, явно содержащий время t .

В случае газовой динамики впервые, по-видимому, эта симметрия была найдена Овсянниковым [21], а эффективно была использована Анисимовым и Лысковым [3] для построения точного осесимметричного автомодельного решения, описывающего нелинейные угловые деформации газового облака на фоне его расширения в вакуум. Впоследствии было выяснено, что такого рода деформации наблюдаются в различных физических задачах, например, при воздействии мощного лазерного излучения на твердое вещество, в результате чего на фоне расширяющегося газового облака его первоначальная форма в виде диска преобразуется в сигарообразную форму (см. монографию [22] и содержащиеся там ссылки). Для квантовых газов при их расширении в вакуум такие трансформации являются типичными как для бозе-газов, так и для ферми-газов (см. соответственно работы [23] и [24, 25] и ссылки в них). Следует отметить, что первые масштабно-инвариантные, зависящие от времени решения для бозе-конденсатов в гидродинамическом режиме для анизотропной ловушки были найдены Каганом, Сурковым и Шляпниковым [26]; в частности, ими был определен спектр дыхательных мод осциллирующего типа. Позднее автомодельные режимы наблюдались в экспериментах группы Томаса [24, 25] при анизотропном расширении из оптической ловушки в вакуум сильновзаимодействующего вырожденного ферми-газа атомов ${}^6\text{Li}$.

Хотелось бы отметить, что в шестидесятых годах прошлого века эта задача — задача о разлете газа в вакуум — была весьма популярна. Первые классические результаты в этом направлении были получены Овсянниковым (1956 г.) [21] и Дайсоном (1968 г.) [27]. Эти работы имели множество различных приложений не только в гидродинамике, но также и в астрофизике (см., например, оригинальную статью Зельдовича [28]).

В данном небольшом обзоре мы в основном ограничимся рассмотрением квазиклассического расширения квантовых газов в вакуум, что совпадает с разлетом идеального газа с показателем адиабаты $\gamma = 1 + 2/D$. С помощью автомоделного решения будет показано, каким образом эволюционирует форма разлетающегося облака для квантовых газов в квазиклассическом пределе и для разлета идеального газа. Динамика автомоделного разлета в этом случае описывается в рамках системы обыкновенных дифференциальных уравнений ермаковского типа. Следует отметить, что впервые рассматриваемая симметрия была использована Ермаковым в 1880 г. [29] при построении решений для ряда механических систем, включая движение классической частицы в потенциале, представляющем сумму осцилляторного потенциала и потенциала $V(r) = \beta/r^2$. Следует отметить, что эта же симметрия помогает в нахождении спектра в квантовом случае для систем N частиц, двигающихся в плоскости и взаимодействующих между собой с потенциалом $V(r_{ij}) = \beta/r_{ij}^2$ (r_{ij} — расстояние между частицами) в присутствии внешнего осцилляторного потенциала [30, 31]. Отметим также, что в семидесятые годы прошлого века результаты Ермакова были переоткрыты Рейем и Рейдом [32]. Сейчас все такого рода уравнения принято называть системами Ермакова–Рея–Рейда (см., например, работу [33] и ссылки в ней). В заключении этой статьи мы обсудим, в чем состоит различие между разлетом квантового и классического газов, а также экспериментальные данные по разлету квантовых газов в вакуум.

2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ И КВАЗИКЛАССИКА

Рассмотрим уравнения ГП для волновой функции ψ бозе-конденсата [14]:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + \mu(n)\psi. \quad (9)$$

Здесь m — масса бозона. В случае бозе-атомов m — масса атома, для ферми-атомов m — масса куперовской пары, т. е. равна удвоенной массе атома. Химический потенциал μ для бозе-атомов равен

$$\mu = gn, \quad (10)$$

где $g = 4\pi\hbar^2 a_s/m$ — константа взаимодействия, пропорциональная длине s -рассеяния a_s . Для положительных значений длины рассеяния между бозона-

ми имеет место отталкивание, а при $a_s < 0$ — притяжение. В последнем случае конденсат неустойчив — развитие этой неустойчивости ведет к коллапсу (см., например, обзор [5]).

Для ферми-атомов отрицательное значение a_s при уменьшении температуры, $T \rightarrow 0$, способствует сначала формированию куперовского спаривания атомов, впоследствии образующих бозе-конденсат. Как уже отмечалось во Введении, предел $(|a_s|k_F)^{-1} \rightarrow 0$, где $p_F = \hbar k_F$ — импульс Ферми, соответствует так называемому унитарному режиму, для которого

$$\mu(n) = 2(1 + \beta)\varepsilon_F, \quad (11)$$

где $\beta = -0.63$, а

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (6\pi^2 n)^{2/3}$$

— локальная энергия Ферми. В этом случае уравнение движения для волновой функции конденсата ψ ($T \rightarrow 0$) представляет собой обобщенное уравнение ГП (2) с $\mu(n)$ (11).

После простого приведения к безразмерному виду уравнения ГП при $\nu = 2/D$ получаем стандартное НУШ (3) с гамильтонианом (4), в котором первый член совпадает с полной кинетической энергией, а второе слагаемое ответственно за отталкивание между бозе-частицами.

Вводя стандартным образом амплитуду и фазу, $\psi = A \exp(i\varphi(r, t))$ ($n = A^2$), НУШ (3) переписывается в виде двух уравнений — уравнения непрерывности для n и уравнения эйконала для фазы φ :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + (\nabla \cdot n \nabla \varphi) = 0, \quad (12)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{(\nabla \varphi)^2}{2} + \mu(n) + T_{QP} = 0, \quad (13)$$

где $\mathbf{v} = \nabla \varphi$ представляет собой скорость (предполагается отсутствие вихрей, $\nabla \times \mathbf{v} = 0$). Во втором уравнении слагаемое

$$T_{QP} = -\frac{\Delta \sqrt{n}}{2\sqrt{n}} \quad (14)$$

ответственно за квантовое давление.

Уравнения для плотности n и фазы φ сохраняют гамильтонову форму:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\delta H}{\delta \varphi}, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\delta H}{\delta n}, \quad (15)$$

где гамильтониан совпадает с (4). В переменных n и φ гамильтониан H имеет вид

$$H = \int \left[\frac{n(\nabla\varphi)^2}{2} + \frac{(\nabla\sqrt{n})^2}{2} + n^{\nu+1} \right] d\mathbf{r}. \quad (16)$$

Как уже отмечалось во Введении, НУШ (3) при $\nu = 2/D$ обладает дополнительной симметрией относительно преобразований Таланова [2]. Преобразования Таланова содержат как скейлинговые преобразования вида $t \rightarrow \alpha^2 t$ и $\mathbf{r} \rightarrow \alpha \mathbf{r}$ благодаря сохранению полного числа частиц $N = \int |\psi|^2 d\mathbf{r}$, так и преобразования фазы. Обе эти симметрии — нетеровского типа, они приводят к появлению двух дополнительных интегралов движения, C_1 и C_2 (7), следующих из интегрирования соотношения вириала (6).

Квазиклассическое приближение (нестационарное приближение Томаса–Ферми) для уравнения ГП соответствует пренебрежению квантовым давлением в уравнении (13):

$$\mu(n) \gg |T_{QP}|. \quad (17)$$

В результате уравнения движения превращаются в уравнения гидродинамики для потенциального течения идеального газа с показателем адиабаты $\gamma = 1 + 2/D$:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + (\nabla \cdot n \nabla \varphi) = 0, \quad (18)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{(\nabla \varphi)^2}{2} + \mu(n) = 0. \quad (19)$$

Следует подчеркнуть, что все симметрии в этих уравнениях сохраняются. Для этой системы остается справедливой также и теорема вириала; в этом случае в гамильтониане (16) необходимо пренебречь вторым слагаемым, ответственным за квантовое давление.

В основном далее мы будем пренебрегать квантовым давлением. Пренебрежение квантовым давлением предполагает более быстрые пространственные и временные изменения фазы (большие фазовые градиенты и производные по времени) по сравнению с пространственно-временными вариациями модуля ψ -функции в уравнении ГП. Подчеркнем, что все указанные симметрии не зависят от характера взаимодействия — отталкивания или притяжения. Это же относится и к теореме вириала (6). Для отталкивания из теоремы вириала следует, что асимптотически при больших t средний размер облака квантового газа, расширяющегося в вакуум, вне зависимости от того, учитывается или не учитывается квантовое давление, растет линейно со временем, т. е. имеет место выход на баллистический режим [34, 35].

Рассмотрим, каким образом происходит разлет квантовых газов в вакуум в квазиклассическом приближении. В этом случае уравнения движения, как отмечалось, совпадают с уравнениями гидродинамики для идеального газа с $\gamma = 1 + 2/D$. В трехмерном случае, таким образом, речь идет о разлете в вакуум одноатомного газа (напомним, что для идеального газа $\gamma = (i + 2)/i$, где i — число степеней свободы).

В 1970 году Анисимов и Лысыков [3] открыли очень интересное явление, связанное с нелинейными деформациями формы газового облака, расширяющегося в вакуум. Такое поведение непосредственно следует из найденного ими решения для газа с $\gamma = 5/3$ (см. также работы [22, 36, 37]). В данном разделе мы воспользуемся теоремой вириала и построим анизотропное квазиклассическое решение, которое совпадает с решением Анисимова–Лысыкова при $D = 3$.

Будем искать решение уравнений (12) и (13) в автомодельном виде:

$$n = \frac{1}{V(\mathbf{a})} f(\xi), \quad (20)$$

где скейлинговые параметры \mathbf{a} являются функциями времени t , $\xi_l = x_l/a_l$ — автомодельные переменные, а $V(\mathbf{a}) = \prod_{l=1}^D a_l$ — объем в пространстве скейлинговых параметров. Отметим, что анзац (20) сохраняет полное число частиц.

Подстановка (20) в уравнение непрерывности (12) допускает интегрирование, в результате чего фаза φ находится с точностью до произвольной функции $\varphi_0(t)$:

$$\varphi = \varphi_0(t) + \sum_l \frac{\dot{a}_l a_l}{2} \xi_l^2. \quad (21)$$

Функция $\varphi_0(t)$ определяется из уравнения эйконала. Подстановка (21) в (13) дает D уравнений движения для параметров a_l :

$$\ddot{a}_l a_l = \frac{\lambda}{V(\mathbf{a})^{2/D}}, \quad (22)$$

где λ — произвольная положительная константа, определяемая из начальных условий. Для $f(\xi)$ в результате имеем

$$f(\xi) = \left[1 - \frac{D\lambda}{2(2+D)} \xi^2 \right]^{D/2}. \quad (23)$$

Таким образом, плотность в переменных ξ зависит только от модуля $|\xi|$. При

$$|\xi| > |\xi|_{max} = \sqrt{\frac{2(2+D)}{D\lambda}}$$

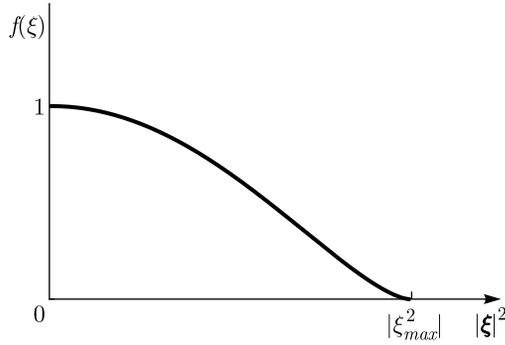


Рис. 1. Поведение $f(\xi)$ для ферми-газа в унитарном пределе (произвольные единицы)

плотность n следует положить равной нулю (см. рис. 1 для $D = 3$). В соответствии с уравнениями (22) динамика параметров $a_i(t)$ ($i = 1, \dots, D$) представляет собой уравнения Ньютона для движения частицы в D -мерном пространстве,

$$\ddot{a}_i = -\frac{\partial U}{\partial a_i}, \quad (24)$$

в потенциале

$$U(\mathbf{a}) = \frac{D\lambda}{2V(\mathbf{a})^{2/D}}. \quad (25)$$

Отметим, что эти уравнения относятся к так называемым системам ермаковского типа [29] (см. также работу [33] и ссылки там).

Очевидно, что уравнения (24) должны иметь ту же симметрию, что и исходное уравнение ГП (2). Во-первых, уравнения (24) сохраняют энергию

$$E = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^D \dot{a}_l^2 + U(\mathbf{a}). \quad (26)$$

Во-вторых, для уравнений (24) прямым вычислением легко устанавливается вириальное соотношение (6), записанное в терминах a_i . Для $\sum a_i^2$ имеем

$$\frac{d^2}{dt^2} \sum_i a_i^2 = 2 \sum_i \left[\left(\frac{da_i}{dt} \right)^2 + a_i \frac{d^2 a_i}{dt^2} \right].$$

Подстановка (24) в это соотношение дает

$$\frac{d^2}{dt^2} \sum_i a_i^2 = 2 \sum_i \left(\frac{da_i}{dt} \right)^2 + \frac{2D\lambda}{V(\mathbf{a})^{2/D}} = 4E,$$

что совпадает с (6). Дважды интегрируя, получаем два интеграла, C_1 и C_2 :

$$\sum_i a_i^2 = 2Et^2 + C_1 t + C_2. \quad (27)$$

Казалось бы, наличие трех интегралов для системы (24) — E , C_1 и C_2 — гарантирует ее интегрируемость для всех физических размерностей, включая $D = 3$. Однако это не так в силу того, что интегралы C_1 и C_2 как функционалы от a_i явно зависят от времени:

$$C_1 = \frac{d}{dt} \sum_i a_i^2 - 4Et, \quad (28)$$

$$C_2 = \sum_i a_i^2 - 2Et^2 - C_1 t, \quad (29)$$

и по этой причине являются неавтономными, хотя и находятся в инволюции с другими интегралами движения, ср. с (8).

2.1. Разлет двумерного газа

Вначале рассмотрим более подробно разлет двумерного газа (см. работу [16]). В цилиндрической системе координат с $a^2 = a_1^2 + a_2^2$ и полярным углом ϕ интеграл энергии записывается в виде

$$E = \frac{\dot{a}^2}{2} + \frac{a^2 \dot{\phi}^2}{2} + \frac{2\lambda}{a^2 \sin 2\phi}.$$

Домножая далее E на $a^2 = 2Et^2 + C_1 t + C_2$, легко получить, что комбинация

$$\tilde{E} = Ea^2 - \frac{1}{2} a^2 \dot{a}^2 = EC_2 - \frac{1}{8} C_1^2$$

является константой (интеграл Ермакова). В результате мы приходим к закону сохранения новой «энергии»

$$\tilde{E} = \frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{d\tau} \right)^2 + U_{eff}(\phi) \quad (30)$$

с новым временем τ :

$$d\tau = \frac{dt}{r^2}, \quad \tau = \int_0^t \frac{dt'}{2E(t')^2 + C_1 t' + C_2}, \quad (31)$$

где

$$U_{eff}(\phi) = \frac{2\lambda}{\sin 2\phi} \quad (32)$$

играет роль потенциальной энергии. Величина U_{eff} всегда положительна и стремится к бесконечности при $\phi \rightarrow 0$ и $\phi \rightarrow \pi/2$. Минимальное значение $U_{eff} = 2\lambda$ при $\phi = \pi/4$ соответствует изотропному случаю. В изотропном случае меняется только величина a^2 , определяемая из соотношения вириала:

$$a^2 = 2Et^2 + C_1 t + C_2.$$

Новое время τ (31) может быть легко выражено через t :

$$\sqrt{2\tilde{E}}\tau = \text{arctg} \frac{\sqrt{2\tilde{E}}(t+t_0)}{\chi} - \text{arctg} \frac{\sqrt{2\tilde{E}}t_0}{\chi},$$

где $\chi^2 = \tilde{E}/E$ и $t_0 = C_1/4E$, так что $\tau = 0$ при $t = 0$. Если начальная скорость газа равна нулю (что типично для эксперимента), то константа $C_1 = 0$ и

$$\sqrt{2\tilde{E}}\tau = \text{arctg} \frac{\sqrt{2\tilde{E}}t}{C_2}.$$

В этом случае асимптотически при $t \rightarrow \infty$

$$\tau \rightarrow \tau_\infty = \frac{\pi}{2\sqrt{2\tilde{E}}}. \quad (33)$$

Траектория $\phi(\tau)$ находится из интегрирования выражения (30):

$$\tau = \int \frac{d\phi}{\sqrt{2[\tilde{E} - U_{eff}(\phi)]}}.$$

Отсюда τ -период в потенциале $U_{eff}(\phi)$ (32) выражается через интеграл

$$T = 2 \int_{\phi^{(-)}}^{\phi^{(+)}} \frac{d\phi}{\sqrt{2[\tilde{E} - U_{eff}(\phi)]}},$$

где $\phi^{(\pm)}$ — корни уравнения $\tilde{E} = U_{eff}(\phi)$ (точки остановки). При больших значениях \tilde{E} колебания слабо зависят от деталей потенциала $U_{eff}(\phi)$. Асимптотически угловая «скорость» $d\phi/d\tau \rightarrow \pm\sqrt{2\tilde{E}}$, а τ -период $T \rightarrow \pi/\sqrt{2\tilde{E}}$, т.е. в этом пределе T превосходит в два раза τ_∞ (33). Отметим также, что зависимость $T(\tilde{E})$ является монотонной для $U_{eff}(\phi)$ с максимумом, соответствующим минимуму потенциала $U_{eff}(\pi/4)$. Это означает, что при $C_1 = 0$ вторая точка остановки является недостижимой при $t \rightarrow \infty$. В частности, если стартовать с левой точки остановки, то система не достигает правой точки остановки. И наоборот: если стартовая точка правая, то левая недостижима. Такая ситуация, как мы увидим далее, является типичной и для трехмерного цилиндрически-симметричного случая.

2.2. Разлет трехмерного газа

Для разлета ферми-газа в унитарном пределе, когда $\nu = 2/3$, уравнения для скейлинговых параметров интегрируются тем же самым способом, что

и в двумерном случае. При $D = 3$ энергию (26) следует записать, вводя сферическую систему координат (a, θ, ϕ) :

$$E = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{da}{dt} \right)^2 + a^2 \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + a^2 \sin^2 \theta \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 \right] + \frac{3\lambda}{2^{1/3}a^2} \frac{1}{(\sin^2 \theta \cos \theta \sin 2\phi)^{2/3}}.$$

Соответственно вводим снова энергию

$$\tilde{E} = Ea^2 - \frac{1}{2}a^2\dot{a}^2 = EC_2 - \frac{1}{8}C_1^2$$

— ермаковский интеграл, сохранение которого является следствием симметрии относительно растяжений, и новое время τ с помощью той же формулы (31). В результате имеем

$$\tilde{E} = \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + \sin^2 \theta \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 + U_{eff}, \quad (34)$$

где эффективный потенциал выражается через сферические углы:

$$U_{eff} = \frac{3\lambda}{2^{1/3}(\sin^2 \theta \cos \theta \sin 2\phi)^{2/3}}. \quad (35)$$

Таким образом, мы приходим к системе с двумя степенями свободы, θ и ϕ .

Для цилиндрически-симметричных решений, когда $\cos \phi = \sin \phi = \sqrt{2}/2$, т.е. при $\phi = \pi/4$, энергия \tilde{E} записывается в виде

$$\tilde{E} = \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + \frac{3\lambda}{2^{1/3}(\sin^2 \theta \cos \theta)^{2/3}}, \quad (36)$$

аналогичном (30) для двумерного случая. Разница состоит только в виде эффективного потенциала U_{eff} . Интегрирование этого уравнения приводит к результату Анисимова – Лысыкова [3].

В общем случае (при учете зависимости от обеих углов) одного интеграла \tilde{E} недостаточно. Как было показано Гафе [38], данная система имеет еще один дополнительный интеграл движения (помимо \tilde{E}), который следует из теста Пенлеве. Существование уже двух интегралов движения гарантирует полную интегрируемость этой системы. Важно отметить, как и в предыдущем случае, что движение в потенциале (35) сохраняет свой нелинейный квазиосцилляционный характер.

2.3. Учет квантового давления

Обсудим теперь, какова роль квантового давления при расширении квантовых газов в вакуум. Отметим, что в точке $\xi = \xi_{max}$ для полученных выше решений критерий квазиклассичности (17) нарушается — в этой точке вторая производная амплитуды A по ξ обращается в бесконечность, соответственно член квантового давления становится бесконечно большим. Это типичная ситуация для квазиклассических решений в квантовой механике, когда требуется решить задачу о сшивке решений в точке остановки [39]. В данном случае роль точки остановки играет $\xi = \xi_{max}$. В окрестности точки $\xi = \xi_{max}$ необходимо сшивать построенное решение при $\xi < \xi_{max}$ (внутренняя область) с внешней областью $\xi > \xi_{max}$. Вдали от ξ_{max} во внутренней области решение должно переходить в найденное квазиклассическое, а во внешней области ψ должна подчиняться линейному уравнению Шредингера. Следует сказать, что эта задача обсуждалась детально в работе [40] для режима сильного трехмерного коллапса в кубическом НУШ ($\nu = 1$). Задача сшивки в данном случае может быть рассмотрена аналогичным образом.

Далее будем предполагать $\Delta\xi \ll \xi_{max}$, т. е. представляя переходную область $\Delta\xi$ достаточно узкой. Легко понять, что задача может быть рассмотрена как одномерная в направлении, нормальном к поверхности $\xi = \xi_{max}$.

Начнем с изотропного разлета двумерного бозе-газа, когда химический потенциал $\mu(n) = n$. Обратимся к уравнению (13) для фазы φ . Для автомодельного квазиклассического решения фаза, напомним, находится из интегрирования уравнения непрерывности, т. е. φ не чувствительна к изменению амплитуды в области сшивки. Это означает, что всюду в переходной области можно считать, что

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \frac{(\nabla\varphi)^2}{2} \approx -2A_0^2,$$

где $A_0^2 = a^{-2}(1 - \lambda\xi^2/4)$ есть решение квазиклассических уравнений. В результате уравнение для амплитуды A в области сшивки записывается в виде

$$\frac{1}{2}\nabla^2 A - 2(A^2 - A_0^2)A = 0.$$

Поскольку $A_0(\xi_{max}) = 0$ ($\xi_{max} = 2/\sqrt{\lambda}$), в этом уравнении в слагаемом A_0^2 нужно удерживать линейные отклонения по $\chi = \xi - \xi_{max}$: $A_0^2 = -\chi a^{-2}\sqrt{\lambda}$, а в операторе Лапласа ∇^2 в силу узости переходного слоя оставить вторую производную по χ . В резуль-

тате приходим к следующему дифференциальному уравнению для функции $g = A/a$:

$$\frac{1}{2} \frac{d^2 g}{d\chi^2} - 2(g^2 + \sqrt{\lambda}\chi)g = 0,$$

с граничными условиями $g \rightarrow 0$ при $\chi \rightarrow \infty$ и $g \rightarrow \sqrt{-\lambda^{1/2}\chi}$ при $\chi \rightarrow -\infty$. Это уравнение представляет собой уравнение Пенлеве второго типа [40]. При больших положительных χ это уравнение превращается в уравнение Эйри с экспоненциально затухающим решением. При меньших $|\chi|$ решение будет близко к функции Эйри, оно осциллирующего характера. При дальнейшем отходе от границы $\xi = \xi_{max}$ во внутреннюю область в решении будут сохраняться осцилляции, но их амплитуда будет убывать. Само решение при $\chi \rightarrow -\infty$ будет выходить на нужную асимптотику.

Появление этих осцилляций является главным проявлением квантовой природы бозе-конденсата при его расширении в вакуум. Эти осцилляции имеют дифракционное происхождение, они подобны кольцам Ньютона.

Хотелось бы отметить, что в одномерной задаче о разлете бозе-газа в вакуум, как показано в работе [41] (см. в ней рис. 3e), вообще нет никаких осцилляций на краю. Причина состоит в том, что плотность в этом случае в окрестности крайней точки ведет себя квадратично, и поэтому никакого нарушения квазиклассики в этой точке не наблюдается. Однако при других условиях [42] осцилляции на краю наблюдаются. Подчеркнем, что задача о сшивке в пределе малых $\Delta\xi \ll \xi_{max}$ сводится к одномерной задаче, но она по построению существенно образом отличается от задачи разлета в рамках одномерного НУШ, интегрируемого с помощью метода обратной задачи рассеяния [43].

В анизотропном случае, очевидно, осцилляции сохранятся. Во-первых, в операторе Лапласа наибольшая производная будет по нормали к поверхности $\xi = \xi_{max}$. Во-вторых, угловая скорость $v_\Omega = r\dot{\Omega}$ при достаточно больших временах $t \rightarrow \infty$, когда размер R газового облака значительно превосходит начальный размер R_0 , оказывается значительно меньше \dot{R} . Согласно теореме вириала (6), $\dot{R} \approx v_\infty$, а

$$v_\Omega = r|\dot{\Omega}| = \frac{|d\Omega/d\tau|}{r} \leq \frac{2\sqrt{E}}{v_\infty t}.$$

Это означает, что главные изменения будут происходить по нормали к границе $\xi = \xi_{max}$, а временными изменениями по углу можно пренебречь. Если в начальный момент выполнено условие квазиклассич-

ности, то оно будет выполнено всюду за исключением узкой области $\delta\xi \ll |\xi|_{max}$. При этом отношение $\delta\xi$ и $|\xi|_{max}$ в силу автомодельности можно считать неизменным, что справедливо по крайней мере при больших t . Таким образом, асимптотически задачу о сшивке следует считать одномерной по $|\xi|$ с локально-замороженным направлением нормали. Отсюда становится ясным, что вокруг поверхности $\xi = \xi_{max}$ формируется пояс осцилляций плотности дифракционного характера.

Аналогичным образом анализируется поведение квантового ферми-газа в унитарном пределе в окрестности поверхности $\xi = \xi_{max}$.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, мы показали, как симметрии для уравнения ГП, когда химический потенциал зависит от плотности n степенным образом с показателем $\nu = 2/D$ и D — размерность пространства, влияют на расширение квантовых газов в вакуум. Вследствие теоремы вириала, независимо от соотношения между квантовым давлением и химическим потенциалом, средний размер расширяющегося облака растет асимптотически при больших временах линейно с t , так что скорость расширения стремится к постоянному значению $v_\infty = (2H/N)^{1/2}$. Наиболее общая симметрия уравнения ГП — симметрия относительно преобразований Таланова, совокупность которых образует абелеву группу. Эта же симметрия имеет место для потенциальных течений газов с показателем адиабаты $\gamma = 1 + 2/D$, описываемых с помощью уравнений газовой динамики: уравнения непрерывности и уравнения Эйлера. Важно, что эта гидродинамическая система совпадает с уравнением ГП в квазиклассическом пределе и наследует тем самым симметрии уравнения ГП.

Мы показали также, что в квазиклассическом приближении уравнение ГП имеет автомодельные анизотропные решения, описывающие на фоне разлета нелинейные угловые квазиосцилляции формы облака квантового газа. В трехмерном случае эти решения совпадают с решениями Анисимова–Лысикова для расширения в вакуум классического одноатомного газа с показателем адиабаты $\gamma = 5/3$ за исключением области, где в квазиклассике плотность обращается в нуль. Это целая поверхность, которая играет ту же самую роль, что и точка останова в квазиклассическом приближении в обычной квантовой механике. Задача сшивки решения во внутренней и во внешней областях показывает,

что в окрестности этой поверхности возникают пространственные осцилляции плотности дифракционного характера. Именно этим различаются квантовый и классические газы при их разлете.

В заключение обсудим, в какой мере экспериментальные данные соответствуют полученным аналитическим результатам. В экспериментах [24] наблюдалось автомодельное расширение сильно взаимодействующего ферми-газа из ловушки сигарообразной формы. На рис. 2, взятом из работы [24], представлены изображения расширяющегося ферми-газа. В начальный момент времени газовое облако имело форму сильно вытянутого эллипсоида в виде сигары (время $t = 100$ мкс), затем при $t = 600$ мкс — почти сферическую и на конечной стадии облако имело форму диска. Общее время наблюдения было 2000 мкс, которое можно взять в качестве полупериода (или меньше) угловых осцилляций формы газового облака, $t \leq t_{osc}/2$, в соответствии с результатами предыдущего раздела. Таким образом, все эти стадии качественно отвечают автомодельному решению.

На рис. 3 представлены результаты измерений среднего размера облака как функции времени для трех значений $(k_F a_s)^{-1}$ [25]. Все три зависимости $\tau^2(t)$ с хорошей точностью представляют собой параболические зависимости в полном соответствии с соотношением (7), следующим из теоремы вириала (6).

Строго в резонансе, $(k_F a_s)^{-1} = 0$, средний размер облака $\langle \mathbf{r}^2 \rangle$ может быть выражен через начальный потенциал ловушки $U(\mathbf{r})$ в виде [25]

$$\langle \mathbf{r}^2 \rangle = \langle \mathbf{r}^2 \rangle_{t=0} + \frac{t^2}{m} \langle \mathbf{r} \cdot \nabla U(\mathbf{r}) \rangle_{t=0}. \quad (37)$$

Вычисления, представленные в работе [44], показывают, что закон расширения (37) совпадает с квазиклассической зависимостью $\langle \mathbf{r}^2 \rangle$ (27) в унитарном пределе. Следует отметить, что, согласно выражению (27), величина $\langle \mathbf{r}^2 \rangle$ действительно зависит линейно от энергии, что было проверено в экспериментах [25].

Подчеркнем, что эти зависимости опираются на квазиклассическую теорию, которая ничем не отличается от гидродинамики идеального газа с показателем адиабаты $\gamma = 5/3$. Как мы показали, отличие квантового газа от классического в задаче о расширении в вакуум состоит в учете квантового давления, что приводит к появлению осцилляций плотности на границе расширяющегося облака. Судя по всему, в экспериментах [24, 25] наблюдается расши-

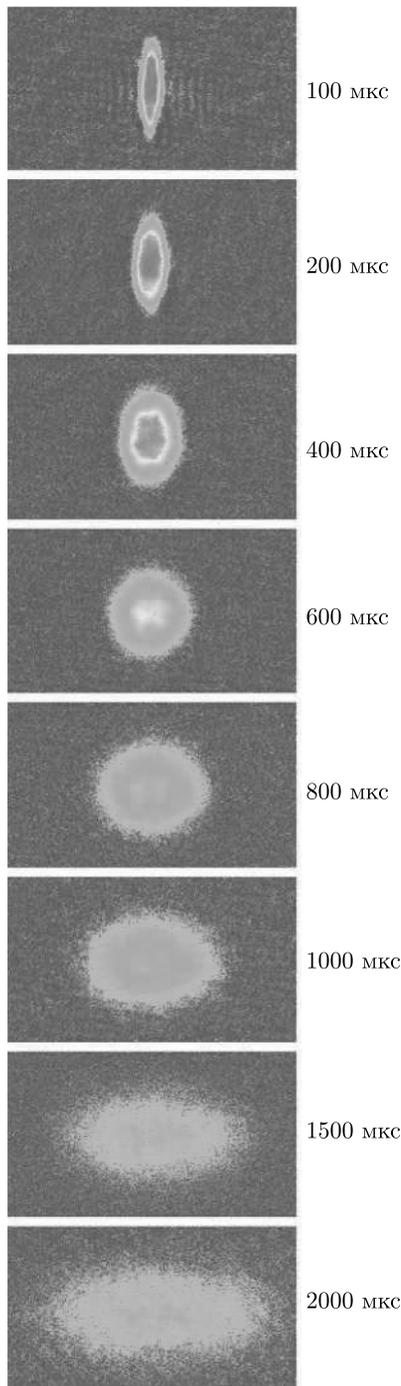


Рис. 2. (В цвете онлайн) Изображения расширяющегося сильно взаимодействующего ферми-газа во времени. Начальная форма в виде сигары

рение скорее нормального ферми-газа, чем сверхтекучего.

Что касается разлета бозе-атомов, то в эксперименте [23] наблюдалась примерно та же самая последовательность изменения формы облака, что

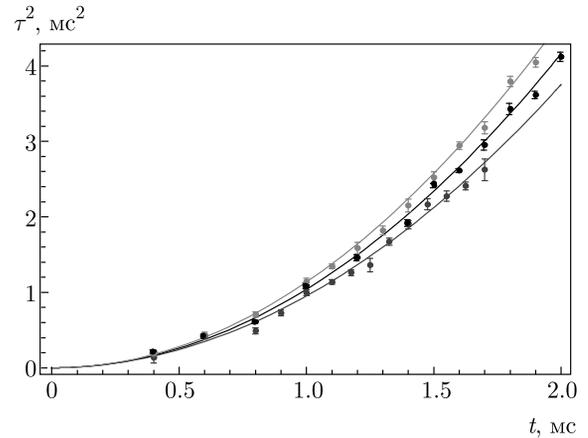


Рис. 3. Зависимость $\tau^2(t)$: по вертикальной оси отложены экспериментальные значения $\tau^2(t) \equiv m[\langle r^2 \rangle - \langle r^2 \rangle_{t=0}] / \langle \mathbf{r} \cdot \nabla U \rangle_{t=0}$, измеренные при расширении сильно взаимодействующего ферми-газа в зависимости от времени t ($U(\mathbf{r})$ — начальное значение потенциала ловушки). Черные символы соответствуют газу в резонансе, $(k_{Fa_s})^{-1} = 0$, красные и синие — соответственно $(k_{Fa_s})^{-1} = 0.59$ и $(k_{Fa_s})^{-1} = -0.61$, сплошные кривые — результаты расчета [25]

и в трехмерной задаче Анисимова–Лысикова. Это свидетельствует о том, что нормальная компонента играет в этом эксперименте более существенную роль, чем сверхтекучая компонента. Напомним, что одним из ключевых экспериментов по открытию бозе-эйнштейновских конденсатов газов щелочных элементов ^7Li , ^{23}Na , ^{87}Rb [45–47] было определение функции распределения бозе-атомов при расширении газа в вакуум после выключения оптической ловушки. Функция распределения имела бимодальную форму, которая соответствовала нормальной и сверхтекучей компонентам. Для нормальной компоненты распределение по скоростям было широким — тепловым — максвелловского вида, а сверхтекучая компонента обладала более узким распределением с шириной, определяемой параметром взаимодействия (в смысле ГП). При малых, но конечных температурах из-за уменьшения плотности при разлете температура бозе-конденсации падает, что неминуемо должно приводить к росту числа атомов нормальной компоненты. По этой причине форма облака должна определяться нормальной компонентой, которую можно считать одноатомным газом. Холодная сверхтекучая компонента будет сосредоточена внутри расширяющегося облака. Для ферми-газов эта ситуация, по-видимому, также имеет место. В отличие от бозе-газов, переход к нормальной компоненте при разлете ферми-газа будет

сопровождаться также и разрушением куперовских пар. Таким образом, разлет квантового газа должен приводить к появлению колец Ньютона, что в экспериментах как [23], так и [24, 25] не наблюдалось. Наблюдение таких осцилляций, по крайней мере на начальной стадии разлета, было бы свидетельством того, что газ находится в квантовом состоянии.

Благодарности. Авторы благодарны А. В. Турлапову и А. М. Камчатнову за ряд полезных обсуждений.

Финансирование. Работа одного из авторов (Е. А. К.) выполнялась при поддержке Российского научного фонда (грант № 19-72-30028). Другой автор (М. Ю. К.) благодарит за поддержку Программу фундаментальных исследований Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» и выражает благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований (грант № 20-02-00015). Авторы внесли равные вклады в выполнение этой работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. П. Питаевский, УФН **178**, 633 (2008) [L. P. Pitaevskii, Physics-Uspekhi **51**, 603 (2008)].
2. В. И. Таланов, Письма в ЖЭТФ **11**, 303 (1970) [V. I. Talanov, Sov. Phys. JETP Lett. **11**, 199 (1970)].
3. С. И. Анисимов, Ю. И. Лысиков, ПММ **34**, 926 (1970) [S. I. Anisimov and Yu. I. Lysikov, J. Appl. Math. Mech. **34**, 882 (1970)].
4. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика* в 10 тт., Физматлит, Москва (2002).
5. В. Е. Захаров, Е. А. Кузнецов, УФН **182**, 569 (2012) [V. E. Zakharov and E. A. Kuznetsov, Physics-Uspekhi **55**, 535 (2012)].
6. S. L. Cornish, S. T. Thompson, and C. E. Wieman, Phys. Rev. Lett. **96**, 170401 (2006).
7. C. Eigen, A. L. Gaunt, A. Suleymanzade, N. Navon, Z. Hadzibabic, and R. P. Smith, Phys. Rev. X **6**, 041058 (2016).
8. H. Feshbach, Ann. Phys. **5**, 357 (1958).
9. C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, Rev. Mod. Phys. **82**, 1225 (2010).
10. J. Joseph, B. Clancy, L. Luo, J. Kinast, A. Turlapov, and J. E. Thomas, Phys. Rev. Lett. **98**, 170401 (2007).
11. M. Bartenstein, A. Altmeyer, S. Riedl, S. Jochim, C. Chin, J. Hecker Denschlag, and R. Grimm, Phys. Rev. Lett. **92**, 120401 (2004).
12. M. J. H. Ku, A. T. Sommer, L. W. Cheuk, and M. W. Zwierlein, Science **335**, 563 (2012).
13. G. Zürn, T. Lompe, A. N. Wenz, S. Jochim, P. S. Julienne, and J. M. Hutson, Phys. Rev. Lett. **110**, 135301 (2013).
14. E. P. Gross, Nuovo Cim. **20**, 454 (1961); L. P. Pitaevskii, Sov. Phys. JETP **13**, 451 (1961).
15. E. A. Kuznetsov, M. Yu. Kagan, and A. V. Turlapov, Phys. Rev. A **101**, 043612 (2020).
16. Е. А. Кузнецов, М. Ю. Каган, ТМФ **202**, 458 (2020).
17. И. Е. Дзялошинский, частное сообщение (1970).
18. E. A. Kuznetsov and S. K. Turitsyn, Phys. Lett. A **112**, 273 (1985).
19. С. Н. Власов, В. А. Петрищев, В. И. Таланов, Изв. вузов, Радиофизика **14**, 1353 (1971) [S. N. Vlasov, V. A. Petrishchev, and V. I. Talanov, Radiophys. Quant. Electr. **14**, 1062 (1971)].
20. K. Rypdal and J. J. Rasmussen, Phys. Scripta **33**, 498 (1986).
21. Л. В. Овсянников, ДАН СССР **111**, 47 (1956).
22. S. I. Anisimov and V. A. Khokhlov, *Instabilities in Laser-Matter Interaction*, CRC Press Inc., Boca Raton (1995).
23. Ю. В. Лиханова, С. Б. Медведев, М. П. Федорук, П. Л. Чаповский, Письма в ЖЭТФ **103**, 452 (2016) [Yu. V. Likhonova, S. B. Medvedev, M. P. Fedoruk, and P. L. Chapovsky, JETP Lett. **103**, 403 (2016)].
24. К. М. О'Нара, S. L. Hemmer, M. E. Gehm, S. R. Granade, and J. E. Thomas, Science **298**, 2179 (2002).
25. E. Elliott, J. A. Joseph, and J. E. Thomas, Phys. Rev. Lett. **112**, 040405 (2014).
26. Yu. Kagan, E. L. Surkov, and G. V. Shlyapnikov, Phys. Rev. A **55**, R18 (1997).
27. F. J. Dyson, J. Math. Mech. **91**, 18 (1968).
28. Я. Б. Зельдович, Астроном. ж. **41**, 873 (1964) [Ya. B. Zel'dovich, Sov. Astron. J. **8**, 700 (1964)].
29. В. П. Ермаков, *Дифференциальные уравнения второго порядка. Условия интегрируемости в конечном виде: из лекций по интегрированию дифференциальных уравнений* [V. P. Ermakov,

- Differential Equations of the Second Order. Integrability Conditions in the Closed Form*, University Izv., Kiev (1880)].
30. F. Calogero, J. Math. Phys. **10**, 2191 (1969).
 31. L. P. Pitaevskii and A. Rosch, Phys. Rev. A **55**, R853 (1997).
 32. J. R. Ray and J. L. Reid, Phys. Lett. A **71**, 317 (1979).
 33. C. Rogers and W. K. Schief, J. Math. Anal. and Appl. **198**, 194 (1996).
 34. A. V. Turlapov and M. Yu. Kagan, J. Phys.: Condens. Matter **29**, 383004 (2017).
 35. М. Ю. Каган, А. В. Турлапов, УФН **189**, 225 (2019) [M. Yu. Kagan and A. V. Turlapov, Physics-Uspekhi **188**, 225 (2019)].
 36. O. I. Bogoyavlensky, in *Stochastic Behavior in Classical and Quantum Hamiltonian Systems*, Springer-Verlag, Berlin (1979), p. 151.
 37. А. В. Борисов, И. С. Мамаев, А. А. Килин, Нелинейная динамика **4**, 363 (2008).
 38. B. Gaffet, J. Fluid Mech. **325**, 113 (1996).
 39. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1989) [L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, Pergamon Press (1965)].
 40. В. Е. Захаров, Е. А. Кузнецов, ЖЭТФ **91**, 1310 (1986) [V. E. Zakharov and E. A. Kuznetsov, Sov. Phys. JETP **64**, 773 (1986)].
 41. G. A. El, V. V. Geogjaev, A. V. Gurevich, and A. L. Krylov, Physica D **87**, 186 (1995).
 42. S. K. Ivanov and A. M. Kamchatnov, Phys. Rev. A **99**, 013609 (2019).
 43. В. Е. Захаров, А. Б. Шабат, ЖЭТФ **61**, 118 (1971) [V. E. Zakharov and A. B. Shabat, Sov. Phys. JETP **34**, 62 (1972)].
 44. E. A. Kuznetsov, M. Yu. Kagan, and A. V. Turlapov, arXiv:1903.04245 [cond-mat.quant-gas].
 45. M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Science **269**, 198 (1995).
 46. Cl. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett, and R. G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).
 47. K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrew, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).

PHASE SLIPS, DISLOCATIONS, HALF-INTEGER VORTICES, TWO-FLUID HYDRODYNAMICS, AND THE CHIRAL ANOMALY IN CHARGE AND SPIN DENSITY WAVES

S. Brazovskii^{a*}, *N. Kirova*^b

^a *Université Paris-Saclay, CNRS, Laboratoire de Physique Théorique et Modèles Statistiques
91405, Orsay, France*

^b *Université Paris-Saclay, CNRS, Laboratoire de Physique des Solides
91405, Orsay, France*

Received January 18, 2021,
revised version January 18, 2021
Accepted for publication January 18, 2021

Contribution for the JETP special issue in honor of I. E. Dzyaloshinskii's 90th birthday

DOI: 10.31857/S0044451021040234

Abstract. This brief review recalls some chapters in theory of density waves in quasi-1D electronic systems which may have appeared after inspirations from studies of I. E. Dzyaloshinskii and collaborations with him. First we address the spin density waves which rich order parameter allows for an unusual object of a complex topological nature: a half-integer dislocation combined with a semi-vortex of the staggered magnetization. It becomes energetically preferable with respect to an ordinary dislocation due to the high Coulomb energy at low concentration of carriers. Generation of these objects should form a sequence of π -phase slips in accordance with experimental doubling of phase-slips rate. Next, we revise the commonly employed time-dependent Ginzburg–Landau (TDGL) approach which is shown to suffer from a violation of the charge conservation law resulting in nonphysical generation of particles which is particularly pronounced for electronic vortices in the course of their nucleation or motion. The suggested consistent theory exploits the chiral transformations taking into account the principle contribution of the fermionic chiral anomaly to the effective action. The derived equations clarify partitions of charges, currents and rigidity among subsystems of the condensate and normal carriers and the gluing electric field. Being non-analytical with respect to the order parameter,

contrarily the conventional TDGL type, the resulting equations still allow for a numerical modeling of transient processes related to space- and spatiotemporal vorticity in density waves (DWs).

1. Introduction.

1.1. Inspirations from I. E. Dzyaloshinskii.

The authors had a chance to publish together with I. E. Dzyaloshinskii (I. E. D. in the following) the article [1] on doubly-quasi-periodic solitonic lattices emerging in a 1D electronic system under simultaneous effects of the charge doping away from the half band filling and of the spin polarization. This publication was in the course of our studies in theory of charge DWs (CDWs) which had been started in 1976 by one of us (S. B., a thankful disciple of I. E. D.) under the inspiration and initially with participation [2, 3] of I. E. D. The trick of the chiral transformations having been employed in [2] (see below), actually suggested by I. E. D., provided a handy frame to study adiabatic models of CDWs which later would lead S. B. to notice an instability of normal electrons or holes, excited or injected to a CDW, towards formation of solitons with the electron buried at the solitons' midgap state, see [4] for a review. The resulting physics of microscopic solitons and their arrays [5] can be traced back to I. E. D. invention of the commensurability locking (published neglectfully only in conference proceedings [6]) and forth to his work on exact solutions of many-body lattice models [7–10]. Much later, an indirect inspiration came to us [11, 12] from the article [13], where I. E. D. had noticed that

* E-mail: sergei.brazovski@universite-paris-saclay.fr

a presence of a dislocation in a crystal possessing the antiferromagnetic spin order enforces a curious half-integer vortex of spins' rotations.

In this short review, we shall firstly describe combined topological defects — half-integer vortices of displacements and spin rotations in incommensurate spin DWs (SDWs) which might necessarily appear under applications of the driving electric field. These considerations are related to I. E. D. study [13] and are coherent with a persistent interest in fractional vortices: from helium A ([14, 15] about the same time as [13]) and triplet superconductors (reviews [16, 17]) to FFLO phase [18, 19] and Bose condensate of polaritons [20] (see also Ref. [21] for a more recent review). This direction in general is in line with long standing interests of I. E. D. in topological defects, recall [22] and particularly [23].

Next, we shall quote and augment for modelling quite a recent development [24] on construction of the chirally invariant (recall [2]) description of transient processes in a CDW or SDW in presence of normal carriers. This formulation is free from a drawback of the non-conservation of condensed particles which we show to be inherent to the traditional TDGL approach.

1.2. Significance of static and transient topological configurations in incommensurate sliding density waves. The DWs, see reviews [25–28], are seen as superstructures, usually weak (with an amplitude $A \ll 1$) and hence harmonic ($A \cos[\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{r} + \varphi(\mathbf{r})]$, \mathbf{q}_0 and φ are the superstructure wave vector and phase). The DWs are produced by modulations of electronic charges and atomic displacements or of electronic spins for CDWs or SDWs, correspondingly. The spectacular phenomena is the collective Fröhlich conductivity due to the overall sliding with the collective current proportional to the phase velocity, $j_c \propto \partial_t \varphi$. The DW sliding is ultimately related to the current conversion process which necessarily involves topological defects [29] like solitons, dislocation lines/loops, and the transient processes of phase slips which develop as the edge dislocation line (D-line) proliferating/expanding across the sample [30, 31] or as the plane of the DW amplitude vanishing across a narrow sample [32–35].

The DW deformations generate a local charge density $n_c \propto \partial_x \varphi$ which brings about a high cost of the Coulomb energy. The Coulomb enhancement of the dislocation energy plays an intriguing role in SDWs bringing to life a kind of a mixed topological object: a half-integer dislocation combined with a semi-vortex of a staggered magnetization vector. The phase slips, necessary for the current conversion or the depinning,

should proceed via propulsion of these combined objects which provides a natural interpretation for a confusing 2-fold enhancement of a frequency generated by moving SDWs in comparison with CDWs.

Beyond transient dislocations contributing to phase slips, static arrays of dislocations can appear in lateral geometries when the electric field is applied transversely to the direction x of the CDW sliding. Indeed, the interaction energy $e\Phi \partial_x \varphi / \pi$ of the deformed CDW with the electric potential Φ resembles the one for a superconductor under a magnetic field described by the vector potential with the component $A_x \equiv \Phi$. Then the transverse to the chains electric field $E_y = -\partial_y \Phi$ acts upon the CDW phase analogously to the action of the transverse magnetic field in a superconducting film. Hence, an array of static dislocations should appear above the electric field threshold as the vortex lattice above the critical field H_{c1} in a superconductor.

Figures 1 and 2 illustrate the sequences of phase slips and the static dislocations. The plots were obtained from numerical modelling of a TDGL type equations as it has been described elsewhere [24, 36, 37].

2. Combined half-integer dislocation and the magnetization vortex in a spin density wave.

CDW and SDW are characterized by scalar and vector order parameters: $\eta_{cdw}(\mathbf{R}) = A \exp(i\varphi)$ and $\boldsymbol{\eta}_{sdw} = A \mathbf{m} \exp(i\varphi)$, where \mathbf{m} is the unit vector of the staggered magnetization and $\mathbf{R} = (x, \mathbf{r}_\perp)$ with x being the chain direction.

The energy density of spin rotations $\mathbf{m}(\mathbf{R})$ in SDWs is not affected by Coulomb forces:

$$W_{spin}\{\mathbf{m}\} = \frac{1}{2N_F} \left[\tilde{C}_\parallel (\partial_x \mathbf{m})^2 + \tilde{C}_\perp ((\partial_y \mathbf{m})^2 + (\partial_z \mathbf{m})^2) + W_{sa} \right]. \quad (1)$$

Here $N_F = 2/\pi \hbar v_F$ and v_F are the density of states and the Fermi velocity of the parent metal, \tilde{C}_\parallel and \tilde{C}_\perp are the elastic moduli related to the rotation of the staggered magnetization unit vector \mathbf{m} , and W_{sa} is the spin anisotropy energy. Elastic moduli \tilde{C}_\parallel and \tilde{C}_\perp are similar to bare moduli of phase displacements taken without Coulomb interactions, i. e., C_\parallel^0 and C_\perp in Eq. (2) below.

The energy for deformations related to phase displacements in both CDW and SDW takes a form

$$W_{chrg}\{\varphi\} = \frac{1}{2N_F} \left[C_\parallel^0 \left(\frac{1}{\pi} \partial_x \varphi \right)^2 + C_\perp \left(\frac{1}{\pi} \nabla_\perp \varphi \right)^2 \right] + W_C + W_{str}, \quad (2)$$

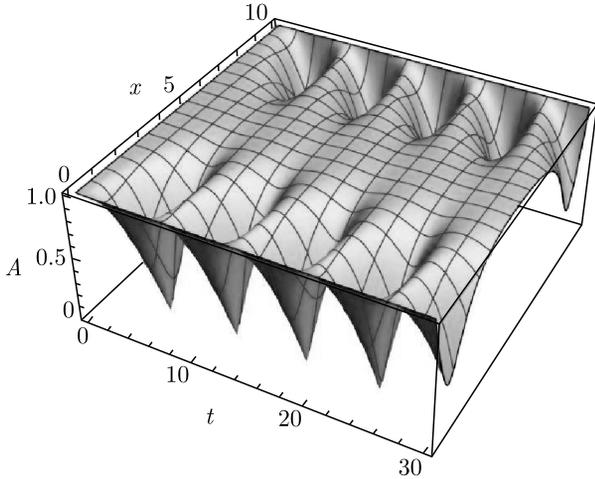


Fig. 1. A time-periodic sequence of phase-slip events seen as a set of nodes of the DW amplitude $A(x, t)$

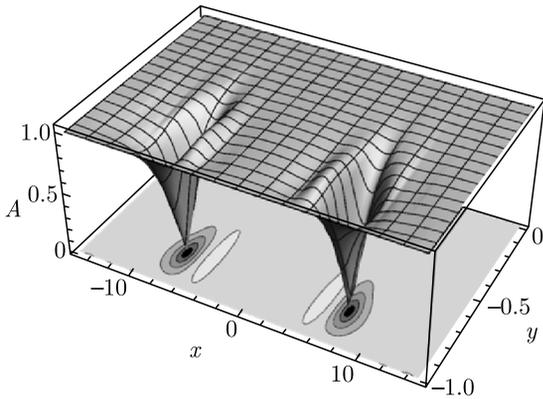


Fig. 2. A static array of dislocations appearing in the electric field applied transversely to the direction x of DW displacements

where dimensionless parameters C_{\parallel}^0 and C_{\perp} are the normalized compression and shear moduli; $C_{\perp} \propto (AT_c N_F a_{\perp})^2$ is a measure of the interchain coupling related to the transition temperature T_c (a_{\perp} is the interchain distance); W_{str} is the stress energy from an applied electric potential and/or from disbalance of normal carriers which promote deformation and/or the motion of the DW.

The Coulomb part of the energy, W_C , comes from the local charge density related to the DW displacements: $n_c = e\rho_c \partial_x \varphi / \pi a_{\perp}^2$, where ρ_c and $\rho_n = 1 - \rho_c$ are the normalized densities of the condensate and of the normal carriers. The Coulomb interactions drastically affect the charged phase deformations of dislocations greatly increasing their energy and stretching the shape in the chains' x -direction, as we shall remind below. Vaguely, the combined effect of Coulomb inter-

actions and the screening results in hardening of the effective compressibility [38] which vanishes at T_c and diverges at low T with freezing out of normal carriers. The effective compressibility C_{\parallel} hardens with growing r_{\perp} (starting from C_{\parallel}^0 at shortest interchain distances) as $C_{\parallel} \sim r_{\perp}^2 / r_0^2$ beyond the screening length of the parent metal, $r_{\perp} > r_0 \sim 1 \text{ \AA}$, until it saturates beyond the screening length $r_{scr} = r_0 / \sqrt{\rho_n}$ at the value which grows activationally with lowering T . At $r_{\perp} > r_{scr}$

$$C_{\parallel}^0 \Rightarrow C_{\parallel} = \rho_c / \rho_n,$$

$$C_{\parallel} \propto \rho_c \propto A^2 \propto (T_c - T) \text{ at } T \rightarrow T_c$$

and

$$C_{\parallel} \propto \rho_n^{-1} \propto \exp(\Delta/T) \text{ at } T \rightarrow 0.$$

The resulting big energy of dislocations at small ρ_n does not prevent their creation which just requires for bigger applied potentials, but the Coulomb energy changes drastically the energy dependence of the dislocation on its position Y (with respect to a counterpart or a surface). While the spin-vortex energy per its unit length is a standard $W_V \sim T_c \ln(Y/a_{\perp})$, for the dislocation as the charged phase vortex, this form of the energy is reached only when the Coulomb interaction is screened at $Y \gg r_{scr}$, where $W_D \sim T_c (r_{scr}/r_0) \ln(Y/r_{scr})$ with the energy scale being greatly enhanced as r_{scr}/r_0 .

Coulomb interactions become even more important in an intermediate (wide at low T) region $r_0 < r_{\perp} < r_{scr}$ governed by the nonlocal, due to unscreened Coulomb interactions, elasticity with $C_{\parallel} \sim r_{\perp}^2 / r_0^2$. For dislocations with $r_{scr} \gg Y \gg r_0$, a curious confinement law is established with $W_D \sim T_c Y / r_0$ meaning a constant force acting upon the D-line.

The energies $W_V(Y)$ and $W_D(Y)$ are similar only near T_c at small A (hence, at the vanishing gap Δ) when the abundant free carriers screen Coulomb interactions already at shortest distances. Otherwise, at the developed gap $\Delta > T$, the energy of dislocations is greatly enhanced with respect to that of vortices which brings about the option of their splitting into combined half-integer vortices. In SDWs, the Coulomb enhancement of the dislocation energy plays a principal role bringing to life a special combined topological object: the half-integer dislocation $\varphi \rightarrow \varphi + \pi$ accompanied by the 180° rotation \mathcal{O}_{π} of the staggered magnetization $\mathbf{m} \rightarrow -\mathbf{m}$. Indeed, the SDW order parameter $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{m} \cos(Qx + \varphi)$ allows for the following three types of self-mapping $\boldsymbol{\eta} \rightarrow \boldsymbol{\eta}$ associated with vorticities ν_{φ} and ν_m .

(i) Normal dislocation $D_{2\pi}$: $\varphi \rightarrow \varphi + 2\pi \equiv \varphi$ and $\mathbf{m} \rightarrow \mathbf{m}$; $\nu_{\varphi} = 1$ and $\nu_m = 0$.

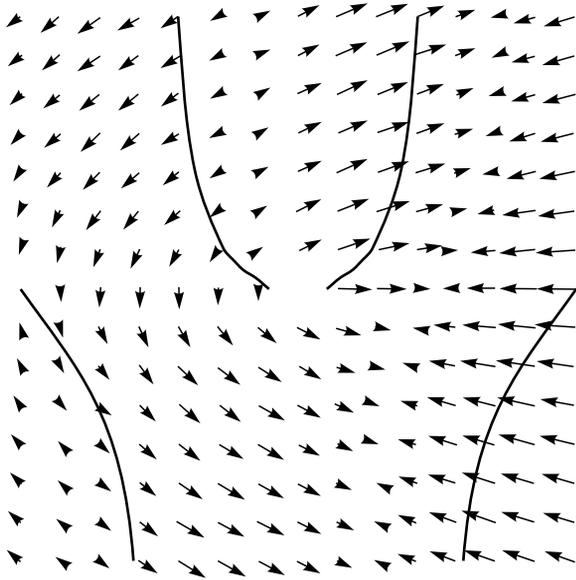


Fig. 3. Vector-field \mathbf{m} for the half-integer dislocation combined with the semi-vortex of the magnetization. Solid lines indicate constant DW phases. Due to the presence of the half-integer dislocation, the number of sites changes between the upper and the lower rows from 2.5 periods ($6 + 6 + 3$) to 2 periods ($7 + 5$)

(ii) Normal \mathbf{m} -vortex $V_{2\pi}$: $\mathbf{m} \rightarrow \mathcal{O}_{2\pi}\mathbf{m} \equiv \mathbf{m}$ and $\varphi \rightarrow \varphi$; $\nu_\varphi = 0$ and $\nu_m = 1$.

(iii) Combined object $D_\pi V_\pi$: $\varphi \rightarrow \varphi \pm \pi$ and $\mathbf{m} \rightarrow \mathcal{O}_\pi\mathbf{m} = -\mathbf{m}$; $\nu_\varphi = \pm 1/2$ and $\nu_m = \pm 1/2$.

In the last case, both the orientational factor \mathbf{m} and the translational one $\cos(Qx + \varphi)$ change the sign, but their product in $\boldsymbol{\eta}$ stays invariant, as it is demonstrated schematically in Fig. 3. Remind that at a given position, the energies of vortices depend on their winding numbers proportional to $\nu_{\varphi,m}^2$

We must compare the energies of objects (i) and (iii) under the requirement of the charge conservation, i. e., preserving the total phase vorticity $\sum \nu_\varphi$. For magnetic vortices the total vorticity $\sum \nu_m$ does not need to be conserved but in the bulk it must be kept zero; otherwise, the energy of noncompensated vortices diverges logarithmically at large distances. For phase dislocations, the energy divergence is not a limitation since it is compensated by driving potentials. Hence, the only decomposition path for the conventional dislocation of the case (i) to the two pairs of half-vortices of the case (iii) is $D_{2\pi} \Rightarrow \{D_\pi, V_\pi\} + \{D_\pi, V_{-\pi}\}$. If the energy parameters for both D and V were the same, then the dissociation cost is zero: $\nu_{2\pi}^2 = 1 \Rightarrow 4\nu_\pi^2 = 1$, and the result will depend on a tiny balance of similar coefficients. But with dominating Coulomb energy of dislocations,

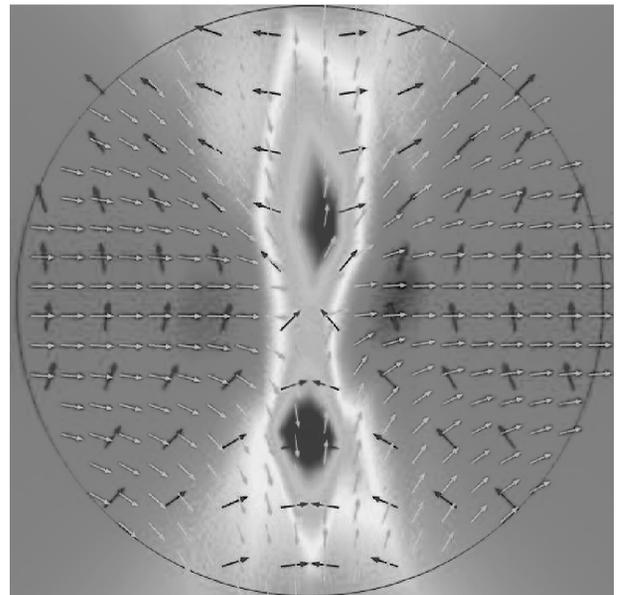


Fig. 4. Results of the modeling of the evolution from a single integer dislocation to the split pair of half-integer combined vortices: (upper panel) the order parameter amplitude $A(x, y)$; (lower panel) vector fields of the CDW phase and of the spin rotation on the background of the density plot for the amplitude

as expected at low T , the magnetic vortex energy can be neglected, then the decomposition gains nearly half of the energy, $(\nu_{2\pi} = 1)^2 \Rightarrow 2(\nu_\pi = 1/2)^2 = 1/2$, which makes it inevitable.

Figure 4 demonstrates results of our modeling of the evolution from a single phase-only integer vortex (the dislocation) to the split pair of half-integer combined vortices.

The known SDW crystals possess low symmetries which originates the spin anisotropy in all three directions. Being small, the anisotropy will not affect the arrangement in a vicinity of the D-line, but at large distances from the D-line, the π -rotation of spins will be concentrated in space within the Néel domain wall, as it has been outlined already in [13]. The wall will form a string (a plane in 3D) which tempts to confine the two combined objects.

Unusually, there will be no confinement within a quite wide region $r_{\perp} < r_{scr}$, where the linear law, rather than conventional logarithmic one, for the D-line energy takes place as we have sketched above. Here, the total energy gain with respect to the normal D-line is $-E_C N/2$, where $E_C \sim T_c a_{\perp}/r_0$ and $N = Y/a_{\perp}$ is the number of chains separating combined vortices. This repulsive anti-confinement energy directly overruns the energy lost due to domain wall formation $W_{spin}^A = w^A N$, both having the similar N -dependence. Usually $w^A \sim 1$ K/chain $\ll E_C \sim 10^1$ K, so the net interaction between the two semivortices is strongly repulsive.

Beyond the screening length $r_{\perp} > r_{scr}$, the Coulomb energy slows down while the W_{spin}^A keeps growing linearly, then the total energy gain of two objects with respect to one D-line is

$$W = -E_0 \ln N + w^A N, \quad E_0 \sim T_c \frac{r_{scr}}{r_0} = \frac{T_c}{\sqrt{\rho_n}}.$$

Hence there is an equilibrium distance between the semi-vortices, $N_{eq} \sim E_0/w^A \propto 1/\sqrt{\rho_n}$, which diverges with freezing out of the screening when $\rho_n \rightarrow 0$. Already at accessibly low temperatures, the string length may reach the sample width which is typically about 1 μm .

3. Two-fluid hydrodynamics for collective and normal variables in density waves.

Related cases of vortices in superconductors and dislocations in DWs [32–34] are described usually within GL-like models and their time-dependent (TDGL) generalizations. While being consistent for

the explicitly gauge-invariant theory of superconductors [39, 40], this approach fails for DWs and other electronic crystals. Working at all steps explicitly with interfering order parameter and normal electrons, employing the chiral invariance, and taking the account for the related quantum anomaly have allowed us [24] to construct the treatable theory without descending to the burdens of microscopic calculations.

The equations of motion for the CDW phase certify the local equilibrium of forces (elastic, Coulomb, frictional) with no relation to the charge conservation. Instead, the last is usually preserved automatically by construction of the charge and the current densities:

$$n_c = \frac{1}{\pi} \rho_c \partial_x \varphi, \quad j_c = -\frac{1}{\pi} \rho_c \partial_t \varphi \quad (3)$$

(to be compared with $j_{sc} \propto \rho_{sc} \partial_x \vartheta$ for the current dependence on the phase ϑ in superconductors).

The normalized (to $T = 0$) condensate density or the phase rigidity $\rho_c(A)$ has a property that $\rho_c(0) = 1$ and $\rho_c(A) \sim A^2 \rightarrow 0$ at $A \rightarrow 0$. The expressions (3) can ensure the charge conservation automatically indeed, but only if the CDW amplitude is invariable: $A(t, x) = \text{const}$, otherwise

$$\frac{dn_c}{dt} = \partial_t n_c + \partial_x j_c = \frac{1}{\pi} (\partial_x \rho_c \partial_t \varphi - \partial_t \rho_c \partial_x \varphi) \neq 0. \quad (4)$$

The charge conservation $dn_c/dt = 0$ is violated in the current-carrying state ($\partial_t \varphi \neq 0$) if ρ_c is not space homogeneous ($\partial_x \rho_c \neq 0$) and in the strained (charged) state $\partial_x \varphi \neq 0$ if ρ_c varies in time, $\partial_t \rho_c \neq 0$. It is ultimately necessary to take into account the normal carriers explicitly, without integrating them out prematurely. At first sight, that would require for descending to the fully microscopic theory with its notorious complications even in linear or gapless regimes [33, 41]. Still, there is a way [24] to keep the phenomenology which is based on the knowledge of chiral invariance and transformation, importantly taking into account the chiral anomaly.

The Lagrangian $H - i\hbar \partial_t$ for electrons in 1D CDW has a form

$$\mathcal{L} = \left(\begin{array}{c} -i\hbar \partial_t - i\hbar v_F \partial_x + \Phi - v_F A_x \\ \Delta e^{-i\varphi} \end{array} \quad \begin{array}{c} \Delta e^{i\varphi} \\ -i\hbar \partial_t + i\hbar v_F \partial_x + \Phi + v_F A_x \end{array} \right), \quad (5)$$

where Φ and A_x are the scalar and the vector potentials. The chiral transformation $\psi_{\pm} \rightarrow \psi_{\pm} \exp(\pm i\varphi/2)$ [2] brings the wave function Ψ to the local frame of a distorted CDW phase. It eliminates the phase factors in non-diagonal elements in \mathcal{L} , but in expense of additional parts in Φ and A_x :

$$\Phi \rightarrow V = \Phi + \frac{\hbar v_F}{2} \partial_x \varphi, \quad (6)$$

$$A_x \rightarrow A_x^* = A_x + \frac{\hbar}{2v_F} \partial_t \varphi,$$

$$E_x \longrightarrow E_x^* = -\partial_x V + \partial_t A_x^* = E_x - \frac{\hbar v_F}{2} \left(\partial_x^2 - \frac{1}{v_F^2} \partial_t^2 \right) \varphi. \quad (7)$$

The additions to Φ and A_x from x - and t -derivatives of the phase are naturally interpreted as the Fermi energy shift $\delta E_F = v_F \delta P_F$ following the Fermi momentum shift $\delta P_F = \hbar \partial_x \varphi / 2$ under the CDW phase deformations. Under the CDW phase deformation and the applied electric field E_x , the electrons experience the chiral invariant potentials V and A_x^* and the longitudinal force E_x^* .

At first sight, we have arrived at the transparent picture of a 1D Dirac semiconductor with the gap $2\Delta = 2A\Delta_0$ under the effective electric field (7), and it looks straightforward to exclude the fermions to arrive at an effective action $S\{\Phi, \varphi, A\} = \int W dx dt$. And here we arrive at puzzling contradictions.

(i) In view of Eq. (7), the free energy W should contain the potential and the phase only in the invariant combination V . Having chosen the phase as $(\hbar v_F / 2) \partial_x \varphi = -\Phi$, the effective potential V disappears from the action, then no density and no polarization are perturbed with respect to Φ . This contradicts to basic properties of the CDW in both the semiconductor with respect to electrons and the metal in the collective behavior.

(ii) We definitely expect W to contain the term proportional to $\rho_c (\partial_x \varphi)^2$, where ρ_c is a collective density responsible for the phase rigidity. But treating the Lagrangian (5) perturbatively with respect to the effective electric field (7), we evidently should get

$$\delta W_n = -\frac{\epsilon(k, \omega)}{8\pi e^2} (E_x^*)^2 = -\frac{\epsilon(k, \omega)}{8\pi e^2} \left(-\frac{\hbar v_F}{2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + E_x \right)^2, \quad (8)$$

where ϵ is the dielectric susceptibility as a function of the wave number k and the frequency ω (the last will be neglected here for shortness). At small k ,

$$\epsilon = \epsilon_\Delta + \frac{1}{(lk)^2}, \quad \frac{1}{l^2} = \frac{\rho_n}{r_0^2}, \quad \rho_n = \frac{dn}{d\zeta} N_F^{-1}. \quad (9)$$

Here n is the concentration of free electrons related to their chemical potential ζ and ρ_n is the normalized density of states which also will be found to be the normal density. The dielectric constant $\epsilon_\Delta \propto (r_0 \xi_0)^{-2}$ collects the polarization of electrons gapped by the CDW while ρ_n comes from conducting carriers thermally excited or injected [42] above the gap providing the finite screening length $l = r_0 / \sqrt{\rho_n}$. Both contributions to δW_n bring drastic contradictions.

a) The term with ϵ_Δ in Eq. (9) yields to (8) the fourth order gradients of the phase $(\partial_{xx}^2 \varphi)^2$ instead of the expected second order $(\partial_x \varphi)^2$.

b) The singularity in k in the term with ρ_n seems at first to serve fortunately by canceling excess gradients leading to the contribution proportional to $(\partial_x \varphi)^2$: $\delta W_{\rho_n} = -\rho_n (\hbar v_F / 4\pi) (\partial_x \varphi + \pi N_F \Phi)^2$. This expression brings two confusions with respect to the expected $W_{\rho_c} = \rho_c (\hbar v_F / 4\pi) (\partial_x \varphi)^2$. The signs in expressions for W_{ρ_n} and W_{ρ_c} are opposite, and also temperature dependencies are conflicting among coefficients ρ_n (expected to rise from zero at $T = 0$ up to 1 at T_c) and ρ_c (expected to fall to zero at T_c starting from 1 at $T = 0$).

These contradictions can be traced back to the notion of the chiral anomaly, and they can be cured by properly taking this anomaly into account. The chiral anomaly is ubiquitous in the premature linearization of electronic spectra. First, in the course of the linearization, the control is lost of the position of the bottom of the electronic band, hence of the difference between actions of the external potential Φ and of the Fermi energy shifting δE_F which wrongly appear to be additive. Moreover, the whole energy cost of the chiral transformation δW_{CT} is lost. This energy can be captured from the non-linearized spectrum of the normal metal if we consider the chiral transformation perturbation $\delta n_{CT} = \partial_x \varphi / \pi$ as a redistribution of the total particle density accompanying this transformation:

$$\delta W_{CT} = \frac{\hbar v_F}{4\pi} (\partial_x \varphi)^2 + \frac{\Phi}{\pi} \partial_x \varphi, \quad (10)$$

where the first term is the density perturbation cost $(\delta n_{CT})^2 / 2N_F$ and the second term is its potential energy $\delta n_c \Phi$. Beyond these physical arguments [43, 44], the derivation of the chiral anomaly in the spirit of the field-theory procedure of regularization of fermionic determinants was demonstrated for CDWs [45] and for SDWs [45, 46], recall also the special field-induced SDWs [47].

Bringing together the nonperturbative contribution (10) and the perturbative one (8), we get

$$W_{tot} = \delta W_{\rho_n} + \delta W_{CT} = \rho_c \left(\frac{\hbar v_F}{4\pi} (\partial_x \varphi)^2 + \frac{\Phi}{\pi} \partial_x \varphi \right) - \rho_n \frac{\Phi^2}{\pi \hbar v_F}, \quad (11)$$

where $\rho_c = 1 - \rho_n$. The above equation correctly manifests the expected dependencies in T and A yielding also the important relation $\rho_c + \rho_n = 1$.

The total charge density becomes

$$n_{tot} = \frac{\partial W_{tot}}{\partial \Phi} = \frac{1}{\pi} \rho_c \partial_x \varphi - \rho_n \Phi N_F = \frac{1}{\pi} \partial_x \varphi - \rho_n V N_F. \quad (12)$$

The above illustrative discussion was valid in lowest bilinear approximation in gradients and potentials for the constant amplitude A . Below, we shall suggest a general nonlinear scheme necessary for modeling configurations with vortices.

The above relations written for the limit $A = \text{const}$ and for small deviations of n_e and n_h can be generalized by extending the energy functional as $\int W dx$ with

$$W = \frac{\hbar v_F}{4\pi} \left[\kappa_x (\partial_x A)^2 + \kappa_{\perp} (\nabla_{\perp} A)^2 + \kappa_{\perp} A^2 (\nabla_{\perp} \varphi)^2 \right] + \left\{ \frac{\hbar v_F}{4\pi} (\partial_x \varphi)^2 + \frac{1}{\pi} \Phi \partial_x \varphi \right\} + \left(\Phi + \frac{\hbar v_F}{2} \partial_x \varphi \right) n + F(A, n_e, n_h) - \frac{\epsilon_{host} a_{\perp}^2}{8\pi} (\nabla \Phi)^2, \quad (13)$$

where ϵ_{host} is the dielectric permittivity of the host crystal.

Here the parameter κ_{\perp} is the CDW share modulus coming from the interchain coupling of CDWs, and the on-chain rigidity $\kappa_x \sim 1$ (to be put $\kappa_x = 1$); $F(A, n_e, n_h)$ is a free energy as a function of the normalized gap value $A = \Delta/\Delta_0$ and of the concentration of normal carriers: electrons n_e and holes n_h with $n = n_e - n_h$. The equilibrium value A_{eq} is connected with n_e and n_h via the minimum of $F(A, n_e, n_h)$ in such a way that $A_{eq}(n_e, n_h)$ vanishes when $n_{e,h}$ or, better say, their chemical potentials $\pm \zeta$ surpass critical values, hence the metallic phase with $A = 0$ is restored. The terms in brackets $\{ \dots \}$ are originated by the chiral anomaly of Eq. (10) coming from background deformations of the CDW phase, the next term (proportional to n) comes from the energy of intrinsic electrons in the combined potential V .

Assuming the dissipative regime for both φ and A , functional derivatives of (13) yield equations for the time evolution and the Poisson equation for Φ :

$$\partial_x^2 A + \kappa_{\perp} \nabla_{\perp}^2 A + \kappa_{\perp} A (\nabla_{\perp} \varphi)^2 - \frac{\partial F}{\partial A} = \gamma_A \partial_t A, \quad (14)$$

$$\partial_x^2 \varphi + \pi N_F \partial_x \Phi + \pi \partial_x n + \kappa_{\perp} \nabla_{\perp} (A^2 \nabla_{\perp} \varphi) = \gamma_{\varphi} \partial_t, \quad (15)$$

$$\frac{1}{\pi} \partial_x \varphi + n = -N_F r_0^2 \nabla^2 \Phi. \quad (16)$$

Here $\gamma_{\varphi} = \gamma A^2$, $\gamma = \text{const}$ and $\gamma_A = \text{const}$ are the damping coefficients; γ_{φ} is related to the sliding CDW conductivity σ_{CDW} as $\gamma_{\varphi} \sigma_{CDW} = N_F e^2 / a_{\perp}^2 = 1/4\pi r_0^2$.

In spite of a superficial similarity, Eqs. (14)–(16) show striking differences with respect to commonly use TDGL ones. Thus, in Eq. (14) the conventional term $\kappa_{\perp} A (\nabla_{\perp} \varphi)^2$ does not find its partner with the x -derivative of φ as if the longitudinal gradient of φ does not suppress the amplitude — the phase-slip nodes would not appear then. In Eqs. (15) and (16), the terms containing $\partial_x \varphi$, $\partial_{xx} \varphi$, and $(\partial_x \varphi)^2$ are not multiplied by A^2 , so the attempt to present them as derivatives of Ψ will bring singularities proportional to $1/A$ and $1/A^2$. Contrary to conventional GL-type equations, now Eqs. (14)–(16) are nonanalytic in the order parameter $\eta = A \exp(i\varphi)$ or, in other words are singular in its amplitude. Nevertheless, there are hidden cancellations allowing to compensate for singularities, even if implicitly, which is vitally important for allowance of space- and spatiotemporal vortices.

There are some technical challenges in numerical implementations of the quoted above equations which one commonly does not meet working within conventional GL approaches, see, e. g., Refs. [35,48]. The first is the control of compensations at $A \rightarrow 0$ in expressions for total charges, currents, and the condensate energy bringing to action the hidden function of the condensate density ρ_c . The second is the entanglement in dependencies of thermodynamic functions and their derivatives on A and on n or ζ : approaching of n or ζ to critical values should eliminate the energy minimum over A at $A \neq 0$ opening the metallic state, e. g., in the vortex core.

The best, and may be the only analytically transparent, advancing is possible with the simplest Landau type expression for F :

$$F(n, A) = \frac{n^2}{2N_F} + \frac{1}{2} \left[-\tau + \left(\frac{n}{n_{cr}} \right)^2 \right] \times \times (A\Delta_0)^2 N_F + \frac{b}{4} A^4 \Delta_0^2 N_F, \quad (17)$$

where $a, b \sim 1$. In Eq. (17), the first term is the contribution of the normal metal, while two other terms give the Landau type expansion in the order parameter with the proximity $\tau \propto (1 - T/T_c)$ to the transition temperature being shifted by presence of the normal carriers which critical concentration is n_{cr} .

We have performed the numerical modeling employing the following combination of equations: Eq. (13) for A with F given by Eq. (17), Eq. (14) for φ , and the dissipative equation for \mathbf{m} generated by the func-

tional (1). The vortices can be spontaneously generated only if equations are written in invariarian variables, rather than in the economical form for non-unique phase φ and the angle θ . The order parameter $\eta_{SDW} = A m \exp(i\varphi)$ is written as $\eta_{SDW} = (u + iv)\{p, q\}$. For the CDW or for frozen alligned spins in SDW, the invariant variables are just u and v . For a SDW with a spin vorticity, the allowed varibles were taken as a set of four bilinear combinations $\{\alpha, \beta, \gamma, \delta\} = \{up, uq, vp, vq\}$ imposing the apparent constraint $\alpha\delta = \beta\gamma$. Examples of resulting calculations are shown in Figs. 1, 2, and 4.

4. Conclusions.

A necessity of semi-vortices in conventional antiferromagnets in presence of frozen-in host lattice dislocations was understood already by I. E. D. [13]. In the SDW, the semi-vortices become the objects of the lowest energy created in the course of phase slip process; the normal dislocation must split into two objects of the combined topology with the repulsion between them. The combined topological objects, where the spin rotations are coupled to DW displacements, are stabilized by lowering the Coulomb energy of dislocations. This combination effectively reduces the SDW period.

Exploiting the chiral transformation and understanding the role of the chiral anomaly allows formulating a phenomenological theory in terms of equations for the DW complex order parameter, the electric potential, and the concentration of normal carriers. This approach resolves the problem of violation of the conservation law for condensed carriers rising dangerously for nonstationary inhomogeneous regimes; that allows to model consistently such strongly nonlinear effects as phase slips and nucleation and propagation of phase vortices.

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

REFERENCES

1. S. Brazovskii, I. Dzyaloshinskii, and N. Kirova, *Sov. Phys. JETP* **54**, 1209 (1981).
2. S. Brazovskii and I. Dzyaloshinskii, *Sov. Phys. JETP* **44**, 1233 (1976).
3. S. Brazovskii, I. Dzyaloshinskii, and S. P. Obukhov, *Sov. Phys. JETP* **45**, 814 (1977).
4. S. Brazovskii and N. Kirova, *Soviet Science Reviews*, ed. by I. M. Khalatnikov, Harwood Acad. Publ., New York (1984), Vol. A5, p. 99.
5. S. Brazovskii, *AIP Conf. Proc.* **1134**, 74 (2009).
6. I. Dzyaloshinskii, *Nobel Symposium* **24**, 143 (1973).
7. S. A. Brazovskii, I. E. Dzyaloshinskii, and I. M. Krichever, *Sov. Phys. JETP* **56**, 212 (1982).
8. S. A. Brazovskii, I. E. Dzyaloshinskii, and I. M. Krichever, *Phys. Lett. A* **91**, 40 (1982).
9. I. E. Dzyaloshinskii and I. M. Krichever, *Sov. Phys. JETP* **56**, 908 (1982).
10. I. E. Dzyaloshinskii and I. M. Krichever, *Sov. Phys. JETP* **58**, 1031 (1983).
11. N. Kirova and S. Brazovskii, *J. de Phys. IV* **9**, Pr10-119 (1999).
12. N. Kirova and S. Brazovskii, *J. de Phys. IV* **10**, Pr3-183 (2000).
13. I. E. Dzyaloshinskii, *JETP Lett.* **25**, 98 (1977).
14. G. E. Volovik and V. P. Mineev, *JETP Lett.* **24**, 561 (1976).
15. M. C. Cross and W. F. Brinkman, *J. Low Temp. Phys.* **27**, 683 (1977).
16. I. A. Lukyanchuk and M. E. Zhitomirsky, *Supercond. Rev.* **1**, 207 (1995).
17. G. E. Volovik, *PNAS* **97**, 2431 (2000).
18. L. Radzihovsky and A. Vishwanath, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 010404 (2009).
19. S. Brazovskii, *Physica B* **404**, 482 (2009).
20. Y. G. Rubo, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 106401 (2007).
21. V. P. Mineev, *Low Temperature Physics/Fizika Nizkikh Temperatur* **39**, 1056 (2013).
22. S. I. Anisimov and I. E. Dzyaloshinskii, *Sov. Phys. JETP* **31**, 773 (1970).
23. I. E. Dzyaloshinskii and G. E. Volovik, *Ann. Phys.* **125**, 67 (1980).
24. S. Brazovskii and N. Kirova, *Ann. Phys.* **403**, 184 (2019).
25. P. Monceau, *Adv. Phys.* **61**, 325 (2012).
26. G. Grüner, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 1129 (1988).
27. G. Grüner, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 1 (1994).

28. *Charge Density Waves in Solids*, ed. by L. Gor'kov and G. Grüner, Elsevier Sci. Publ., Amsterdam (1990).
29. S. Brazovskii and N. Kirova, JETP **129**, 659 (2019).
30. N. P. Ong, G. Varma, and K. Maki, Phys. Rev. Lett. **52**, 663 (1984).
31. N. P. Ong and K. Maki, Phys. Rev. B **32**, 6582 (1985).
32. L. P. Gor'kov, JETP Lett. **38**, 87 (1983).
33. L. P. Gor'kov, see [28], p. 403.
34. L. P. Gor'kov, Sov. Phys. JETP **59**, 1057 (1984).
35. I. Batistic, A. Bjelis, and L. Gor'kov, J. de Phys. **45**, 1049 (1984).
36. T. Yi, N. Kirova, and S. Brazovskii, Eur. Phys. J., Special Topics **222**, 1035 (2013).
37. T. Yi, A. Rojo Bravo, N. Kirova, and S. Brazovskii, J. Supercond. Nov. Mag. **28**, 1343 (2015).
38. S. N. Artemenko, A. F. Volkov, and A. N. Kruglov, Sov. Phys. JETP **64**, 906 (1986).
39. B. I. Ivlev and N. B. Kopnin, Adv. Phys. **33**, 47 (1984).
40. N. Kopnin, *Theory of Nonequilibrium Superconductivity*, Oxford Univ. Press, U.K. (2001).
41. S. Artemenko and A. Volkov, see [28], p. 365.
42. S. Brazovskii, N. Kirova, H. Requardt, F. Ya. Nad, P. Monceau, R. Currat, J. E. Lorenzo, G. Grbel, and Ch. Vettier, Phys. Rev. B **61**, 10640 (2000).
43. S. Brazovskii, J. de Phys. I **3**, 2417 (1993).
44. S. Brazovskii, J. de Phys. IV **3**, C2-267 (1993).
45. I. V. Krive, A. S. Rozhavsky, and V. A. Rubakov, JETP Lett. **46**, 121 (1987).
46. K. Sengupta and N. Dupuis, Phys. Rev. B **61**, 495 (2000).
47. V. M. Yakovenko and H.-S. Goan, Phys. Rev. B **58**, 10648 (1998).
48. S. M. Gol'berg, N. B. Kopnin, and M. I. Tribel'skii, Sov. Phys. JETP **67**, 812 (1988).

DIMENSIONLESS PHYSICS

*G. E. Volovik**

*Low Temperature Laboratory, Aalto University
P. O. Box 15100, FI-00076 Aalto, Finland*

*Landau Institute for Theoretical Physics, Russian Academy of Sciences
142432, Chernogolovka, Moscow Region, Russia*

Received June 30, 2020,
revised version August 11, 2020
Accepted for publication August 12, 2020

Contribution for the JETP special issue in honor of I. E. Dzyaloshinskii's 90th birthday

DOI: 10.31857/S0044451021040246

It is not excluded that the Standard Model of particle physics together with general relativity are effective theories which emerge at low energy for the collective modes of the extreme ultraviolet [1]. Sakharov gravity [2], which emerges in the fermionic vacuum, provides the characteristic example. The scenario, where all the known symmetries in our Universe emerge on the macroscopic scale, but disappear in the highly trans-Planckian microscopic regime, takes place in different many-body condensed matter systems. For example, the analogs of Lorentz invariance and the curved spacetime are developed for some low energy fermionic and bosonic modes [3], but these phenomena disappear at large energy, where the microscopic degrees of freedom intervene (the analog of the trans-Planckian degrees of freedom). The condensed matter systems with topologically stable Weyl points in the fermionic spectrum, such as Weyl semimetals and the chiral superfluid phase of liquid ^3He , demonstrate simultaneous emergence of chiral fermions, gauge bosons, and tetrad gravity [4–8], which do not survive on the high-energy atomic level.

We do not know the structure of the trans-Planckian world, but we can try different possible scenarios of emergent physics and search for the common properties in the low energy corner. Here we consider two scenarios of emergent gravity, which are very different, but have the important common property.

The first one is the tetrad gravity, where the tetrad fields emerge as bilinear combinations of the fermionic fields by symmetry breaking. This scenario has been investigated by Diakonov [9], Vladimirov and Diakonov [10, 11], and Obukhov and Hehl [12]. The analog of Diakonov–Vladimirov (DV) scenario takes place in topological superfluid $^3\text{He-B}$ [13].

The other one is the analog of gravity in the elasticity theory of crystals [14–20], where the elastic deformations are described in terms of the tetrads of elasticity [16]. In principle, this analogy can be extended to the real gravity, if the quantum vacuum is considered as a plastic (malleable) fermionic crystalline medium and the elasticity tetrads become the gravitational tetrads [21, 22]. The condensed matter analog of such vacuum is the quantum crystal with fermionic quasiparticles, such as vacancies [23–25].

The common property of these two approaches to quantum gravity is that the tetrad fields in both theories have dimension of inverse length. As a result, most of the physical quantities which obey diffeomorphism invariance become dimensionless [11, 26–28]. Since the two very different scenarios lead to the same phenomenon, it is natural to suggest that the gravity in our universe also follows this common rule. Here we consider some consequences which come from this rule.

Let us consider the theory of the crystal elasticity using approach of Ref. [16]. The deformed crystal structure can be described as a system of three crystallographic surfaces of a constant phase, $X^a(x) = 2\pi n^a$, $n^a \in Z$ with $a = 1, 2, 3$. The intersection of the surfaces

* E-mail: volovik@boo.jum.hut.fi

$$\begin{aligned} X^1(\mathbf{r}, t) &= 2\pi n^1, & X^2(\mathbf{r}, t) &= 2\pi n^2, \\ X^3(\mathbf{r}, t) &= 2\pi n^3 \end{aligned} \quad (1)$$

are the nodes of the deformed crystal lattice. For the undeformed crystal, $X^a(\mathbf{r}, t) = \mathbf{K}^a \cdot \mathbf{r}$, where \mathbf{K}^a are the (primitive) reciprocal lattice vectors. The deformations of the crystal can be described in terms of the elasticity tetrads, the gradients of the phase functions:

$$E_i^a(x) = \partial_i X^a(x). \quad (2)$$

In the absence of dislocations, $E_i^a(x)$ is an exact differential:

$$\partial_k E_l^a(x) - \partial_l E_k^a(x) = 0. \quad (3)$$

In the presence of the topological defects – dislocations, the density of dislocations plays the role of torsion:

$$T_{kl}^a = (\partial_k E_l^a - \partial_l E_k^a). \quad (4)$$

Such construction can be extended to the 3+1 quantum vacuum with $a = 0, 1, 2, 3$, assuming that the vacuum looks like the plastic crystalline medium. In this model the elasticity tetrads E_μ^a become the gravitational tetrads [21, 22]. The deformed vacuum crystal with dislocations describes the curved geometry of the teleparallel Weitzenböck gravity with vanishing curvature and nonzero torsion. On the macroscopic coarse grained level, where the separate dislocations are not resolved, the torsion field $T_{\mu\nu}^a$ can be considered as a continuous function of coordinates. The metric $g_{\mu\nu}$ originates from the elasticity tetrads:

$$g_{\mu\nu} = \eta_{ab} E_\mu^a E_\nu^b, \quad (5)$$

where $\eta_{ab} = (-, +, +, +)$.

The important property of the elasticity tetrads is that being the derivatives, they have the canonical dimensions of inverse length, $[E_\mu^a] = [l]^{-1}$. Correspondingly, the metric has dimension $[g_{\mu\nu}] = 1/[l]^2$, while the interval is dimensionless: $ds^2 = -g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu$, $[\Delta s] = 1$. The distance between the two nodes of the deformed crystal is determined by the integer number of crystal surfaces between the points of the grid and thus does not depend on the length scale. In such quantum vacua, the size of the unit cell is not fixed and can be arbitrary.

Let us introduce notation d for conventional dimension of the physical quantities and the notation d_{DV} for the shifted dimension of the same quantities. The shift of dimensions means that $[l]^{-d} \rightarrow [l]^{-d_{DV}}$ in the DV approach. For the interval ds , the conventional dimension $d = -1$ and the shifted dimension $d_{DV} = 0$, see Table 1. For the torsion field $d = 1$, and $d_{DV} = 2$.

The shift of the dimensions of the physical quantities leads to the new properties of the quantum vacua and also topological insulators, which allows extending the application of the topological anomalies. For example, the Chern–Simons term describing the 3+1 intrinsic quantum Hall effect becomes dimensionless. As a result, the prefactor of this term is given by the integer momentum-space topological invariants as in the case of 2+1 dimension [26–28]. The shift is also important for the Nieh–Yan anomaly [28].

In the DV theory [9–12], the tetrads are composite fields emerging as bilinear combinations of fermionic fields. Tetrads appear as the order parameter of the symmetry breaking transition (see also Ref. [29]):

$$e_\mu^a = i \langle \psi^\dagger \Gamma^a \nabla_\mu \psi - \nabla_\mu \psi^\dagger \Gamma^a \psi \rangle. \quad (6)$$

The corresponding symmetry breaking scheme is $L_L \times L_S \rightarrow L_{L+S}$, where L_L and L_S are two separate symmetries under Lorentz rotations of the coordinate and spin space, respectively. These two symmetries are broken to the diagonal subgroup — the Lorentz group of the combined rotations in two spaces, L_{L+S} . In addition, this order parameter breaks the PT symmetry, see also Ref. [30]. The similar scheme of symmetry breaking of three-dimensional rotations in the orbital and spin spaces takes place in the superfluid ${}^3\text{He-B}$ [13, 31]:

$$SO(3)_L \times SO(3)_S \rightarrow SO(3)_{S+L}.$$

According to Eq. (6), the frame field e_μ^a transforms as a derivative in the same manner as the elasticity tetrads. That is why it has the dimension of inverse length, $[e_\mu^a] = 1/[l]$, i. e., its dimension is shifted from $d = 0$ to $d_{DV} = 1$, see Table 2. In such vacua, it is natural to assume that the fermionic field ψ as well as the bosonic fields Φ are scalars under diffeomorphisms [9, 10], i. e., their dimensions are shifted from $d = 3/2$ and $d = 1$ to $d_{DV} = 0$, see Tables 2 and 3, respectively. For Weyl or massless Dirac fermions one has the conventional action:

$$S = \int d^4x |e| e^{a\mu} (\psi^\dagger \Gamma^a \nabla_\mu \psi + \text{H.c.}).$$

This action expressed in terms of the DV tetrads remains dimensionless, since $[e] = [l]^{-4}$, $[e^{a\mu}] = [l]$, and $[\psi] = 1$, see Table 2. This suggests that the DV dimension of tetrads is natural, which is also supported by the elasticity tetrads.

The nontrivial dimension of the metric suggests that metric is not the quantity, which describes the space-time, but the quantity, which determines the dynamics of effective low energy fields in the background of microscopic quantum vacuum.

The shifts of dimensions are shown in Tables 1, 2, and 3 correspondingly for gravity, fermions, and scalar fields. Many quantities, which obey diffeomorphism invariance, become dimensionless. The action is dimensionless and remains dimensionless in the DV dimensions, since the action is a diffeomorphism invariant. Another example of the diffeomorphism invariant quantity is the rest mass M of particles. In the case of mass, the dimension is shifted from $d = 1$ to $d_{DV} = 0$. That the DV dimension of mass is $[M] = 1$ can be seen from the classical equation for the particle spectrum: $g^{\mu\nu} p_\mu p_\nu = M^2$. According to Table 1, M^2 has dimension $d_{DV} = -2 + 1 + 1 = 0$, i. e., $[M] = 1$, and the action and the mass terms in fermionic and bosonic actions are dimensionless:

$$S = M \int ds, \tag{7}$$

$$S = \int d^4x |e| M \psi^\dagger \psi, \tag{8}$$

$$S = \int d^4x \sqrt{-g} (g^{\mu\nu} \nabla_\mu \Phi \nabla_\nu \Phi + M^2 \Phi^2), \tag{9}$$

$$S = \frac{1}{4} \int d^4x \sqrt{-g} (F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + M^2 g^{\mu\nu} A_\mu A_\nu). \tag{10}$$

This follows from the DV dimensions

$$[e] = [\sqrt{-g}] = [l]^{-4}, \quad [\Phi] = [\psi] = 1, \quad [g^{\mu\nu}] = [l]^{-2},$$

$$[ds] = [M] = 1, \quad [A_\mu] = [l]^{-1}.$$

Since the scalar curvature in general relativity is diffeomorphism invariant, it is dimensionless in the DV approach, $[\mathcal{R}] = 1$. Its dimension is shifted from $d = 2$ to $d_{DV} = 0$. Other examples of the diffeomorphism invariant quantities are the Newton constant G and the cosmological constant Λ in the Einstein–Hilbert action:

$$S_{GR} = \frac{1}{16\pi G} \int d^4x \sqrt{-g} \mathcal{R} + \int d^4x \sqrt{-g} \Lambda. \tag{11}$$

The dimensions of G and Λ are shifted from correspondingly $d = -2$ and $d = 4$ to $d_{DV} = 0$, i. e., $[\Lambda] = [G] = 1$. These dimensionless quantities are determined by the ratio of the mass scales [32] or by the functions of scalar fields [33]. In principle, only the ratio between the mass parameters makes sense [10]. In a given case, only the combination ΛG^2 matters. According to Zeldovich [32], this combination is expressed in terms of QCD mass scale: $\Lambda G^2 \sim \Lambda_{QCD}^6 G^3$ (see also Refs. [34–37]). In the other approaches, the electroweak

energy scale [38,39] and the neutrino mass scale [40] enter, $\Lambda G^2 \sim M_W^8 G^4$ and $\Lambda G^2 \sim M_n^4 G^2$, respectively.

The spacetime volume $V = \int d^4x \sqrt{-g}$ is dimensionless, $[V] = 1$, and may have quantized values. Then Λ as the corresponding Lagrange multiplier may have universal quantized values with $\Lambda = 0$ in the equilibrium Minkowski vacuum.

The dimensionless Lagrange multiplier appears also in the q -theory of the quantum vacuum [41], if the q -theory is based on the 4-form gauge field introduced by Hawking for phenomenological description of the quantum vacuum [42],

$$q^2 = F^{\mu\nu\alpha\beta} F_{\mu\nu\alpha\beta}.$$

In the DV units the vacuum variable q and the Lagrange multiplier μ_q (the corresponding chemical potential of the conserved quantity) are dimensionless, see Table 3. If μ_q is fundamental, it becomes the general characteristics of the quantum vacuum. While the variable q determines the variable vacuum energy $\Lambda(q) = \epsilon(q) - \mu_q q$, the universal chemical potential provides the nullification of Λ in the Minkowski vacuum. At this value of μ_q , all the initial states (even those with the Planck scale Λ) finally relax to Minkowski vacuum with $\Lambda = 0$ [41], thus providing the solution of the cosmological constant problems.

In the DV approach, mass and energy have different dimensions. While mass is dimensionless, $[M] = 1$, the energy has dimension of frequency, $[E] = [\omega] = [\sqrt{g_{00}}] = 1/[l]$. Correspondingly, the temperature is dimensionless, $[T] = 1$, while the constant temperature, which enters the Tolman law [43], $T(\mathbf{r}) \sqrt{-g_{00}(\mathbf{r})} = T_{Tolman}$, has dimension of frequency, $[T_{Tolman}] = [\omega] = [\sqrt{g_{00}}] = 1/[l]$, see Table 1. Tolman temperature is the integration constant in equilibrium in a stationary spacetime [44].

The Unruh temperature of the accelerated body is $T_U = a/2\pi$ [45], where a is covariant acceleration,

$$a^2 = g_{\mu\nu} \frac{d^2 x^\mu}{ds^2} \frac{d^2 x^\nu}{ds^2}.$$

Since a is diffeomorphism-invariant, it is dimensionless together with the Unruh temperature, $[a] = [T_U] = 1$. The same is with the Hawking temperature of a black hole. For the Schwarzschild black hole with rest energy M_{BH} , Bekenstein entropy S_{BH} , Hawking temperature T_{BH} , and horizon area A_{BH} :

$$T_{BH} = \frac{1}{8\pi G M_{BH}}, \tag{12}$$

$$S_{BH} = 4\pi G M_{BH}^2 = \frac{A_{BH}}{4G}.$$

Table 1. Dimension shifts for gravity

General relativity	Dimension d	d_{DV}
$g^{\mu\nu}$	0	-2
$g_{\mu\nu}$	0	2
$\sqrt{-g}$	0	4
$d^4x \sqrt{-g}$	-4	0
$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu$	-2	0
$dA = \sqrt{dS^{\mu\nu} dS_{\mu\nu}}$	-2	0
M	1	0
$S = M \int ds$	0	0
∂_μ	1	1
p_μ	1	1
$R = g^{\mu\nu} R_{\mu\nu}$	2	0
G_{Newton}	-2	0
R/G_{Newton}	4	0
$\Lambda_{cosmological}$	4	0
$T_{Hawking}$	1	0
T_{Tolman}	1	1
$T_{Tolman}/\sqrt{g_{00}}$	1	0

Table 3. Dimension shifts for scalar fields

Scalar/Vector	Dimension d	d_{DV}
Φ	1	0
$g^{\mu\nu} \partial_\mu \Phi \partial_\nu \Phi$	4	0
$M^2 \phi^2$	4	0
A_μ	1	1
$F_{\mu\nu}$	2	2
$F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}$	4	0
$(F_{\mu\nu} F^{\mu\nu})^k$	$4k$	0
$F_{\mu\nu} \tilde{F}^{\mu\nu}$	4	4
$F_{\mu\nu\alpha\beta}$	4	4
$F^{\mu\nu\alpha\beta}$	4	-4
$q^2 = F^{\mu\nu\alpha\beta} F_{\mu\nu\alpha\beta}$	8	0
μ_q	0	0

All the quantities, that enter Eq. (12), are dimensionless in the DV approach, $[T_{BH}] = [S_{BH}] = [M_{BH}] = [A_{BH}] = [G] = 1$. The area of the black hole is dimensionless, because the covariant form of the scalar area element is

$$dA = \sqrt{dS^{\mu\nu} dS_{\mu\nu}}.$$

Table 2. Dimension shifts for fermions

Fermions	Dimension d	d_{DV}
e_μ^a	0	1
e_a^μ	0	-1
$e = \sqrt{-g}$	0	4
ψ	3/2	0
$M\bar{\psi}\psi$	4	0
$i\bar{\psi}\Gamma^a e_a^\mu D_\mu \psi$	4	0
\mathcal{T}_a	1	2
$\mathcal{T}_a \mathcal{T}^a$	2	4
$\lambda_{Nieh-Yan}^2$	2	0
$e_\mu^a A_\nu \tilde{F}^{\mu\nu}$	3	4
$ie_a^\mu e_b^\nu \bar{\psi} (\Gamma^a \Gamma^b - \Gamma^b \Gamma^a) \psi F_{\mu\nu}$	5	0
$QQQL$	6	0

Since

$$[S^{\mu\nu}] = [l]^2 \quad \text{and} \quad [S_{\mu\nu}] = [S^{\mu\nu}][g_{\mu\nu}]^2 = 1/[l]^2,$$

one obtains $[A] = 1$, which supports the idea that the area of the black hole horizon is quantized [46–48].

Similar quantization may occur for the de Sitter spacetime, which is the submanifold of Minkowski spacetime in the 4 + 1 dimension:

$$g_{\mu\nu}^{4+1 \text{ Mink}} x^\mu x^\nu = \alpha^2.$$

Since $[g_{\mu\nu}] = [l]^{-2}$, the parameter α is dimensionless as well as the scalar curvature $R = 12/\alpha^2$, i. e., in the DV dimensions $[R] = [\alpha] = 1$. The dimensionless parameter α of the de Sitter spacetime emphasizes the unique symmetry of this spacetime and supports quantization of this parameter (see, e. g., [49]), which could be similar to the Bekenstein quantization of the black hole area [46]. However, in case of the superplastic vacuum, the quantization of area can be very different from the quantization in terms of the Planck area, because the elementary cell of the underlying lattice may have nothing to do with the Planck scale.

Table 2 contains the operators with the mass dimensions 3, 5, and 6. The non-renormalisable dimension 5 operator gives a contribution to the electron magnetic moment [1]:

$$G_5 = ie_a^\mu e_b^\nu \bar{\psi} (\Gamma^a \Gamma^b - \Gamma^b \Gamma^a) \psi F_{\mu\nu},$$

and the non-renormalisable dimension 6 four-fermion operator describes the baryon number violation:

$$G_6 = QQQL,$$

where L and Q are the lepton and quark doublets. Since in the DV approach the mass is dimensionless, these operators become dimensionless: their $d_{DV} = 0$. The prefactors in these terms are determined either by the ratio of the mass scales (“ultraviolet” and “infrared”) or by the functions of scalar fields. The same is with the $4k$ mass operator for $k > 1$ in Table 3: $G_{4k} = (F_{\mu\nu} F^{\mu\nu})^k$.

In terms of the DV dimensionalities, the operators with $d_{DV} = 4$ are topological. The operators of the type $G_4 = F_{\mu\nu} \tilde{F}^{\mu\nu}$ are topological in both classes of dimensions, since for them $d = d_{DV} = 4$. They are accompanied by the fundamental integer or fractional prefactors. There are also operators, which have original dimension $d \neq 4$ but acquire dimension $d_{DV} = 4$ in the DV approach. This means that they are not topological in conventional approach, but may become topological in the DV dimensions.

The former dimension $d = 2$ operator $\mathcal{T}_a \mathcal{T}^a$ and the dimension $d = 3$ operator $e_\mu^a A_\nu \tilde{F}^{\mu\nu}$ acquire dimension $d_{DV} = 4$ in the DV dimensionalities. As a result, they become topological and their prefactors become the topological quantum numbers. The operator $e_\mu^a A_\nu \tilde{F}^{\mu\nu}$ determines the quantum Hall response in $3 + 1$ topological insulators [26, 27, 50] described by the following Chern–Simons topological term [27]:

$$S_{4D}[A_\mu] = \frac{1}{4\pi^2} \sum_{a=1}^3 N_a \int d^4x E_\mu^a \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta} A_\nu \partial_\alpha A_\beta. \quad (13)$$

It explicitly contains the elasticity tetrads E_μ^a . The integer coefficients N_a are three topological invariants in terms of the Green’s functions:

$$N_a = \frac{1}{8\pi^2} \epsilon_{ijk} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{BZ} dS_a^i \times \text{Tr}[(G_\omega G^{-1})(G_{k_i} G^{-1})(G_{k_j} G^{-1})]. \quad (14)$$

Invariants N_a describe the quantized response of Hall conductivity to crystal deformations:

$$\frac{d\sigma_{ij}}{dE_k^a} = \frac{e^2}{2\pi h} \epsilon_{ijk} N_a. \quad (15)$$

In terms of the conventional tetrads, the gravitational Nieh–Yan anomaly related to torsion [51–61],

$$\partial_\mu j_5^\mu = \lambda^2 (\mathcal{T}^a \wedge \mathcal{T}_a - e^a \wedge e^b \wedge R_{ab}), \quad (16)$$

contains the nonuniversal prefactor — the ultraviolet cut-off parameter λ with dimension of inverse length, $[\lambda] = 1/[l]$. Since λ may depend on coordinates, which explicitly violates the topology, the Nie–Yan contribution to the anomaly is still rather subtle (see recent literature [27, 61–65]). In the DV tetrads, the torsion in Eq. (4) has dimension $[T_{kj}^a] = 1/[l]^2$, and the prefactor λ^2 becomes dimensionless, $[\lambda] = 1$, which suggests that the prefactor is universal and is quantized.

The Chern–Simons term describing the 3+1 quantum Hall effect can be extended to the 3+1+1 Wess–Zumino actions:

$$S_{WZ}^{aab} = \frac{1}{8\pi^2} \int_{X^5} d^4x d\tau \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta\gamma} e_\gamma^a F_{\mu\nu}^b F_{\alpha\beta}^c. \quad (17)$$

$$S_{NY}^{abc} \propto \int_{X^5} d^4x d\tau \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta\gamma} e_\gamma^a T_{\mu\nu}^b T_{\alpha\beta}^c. \quad (18)$$

$$S_{WZ}^{ab} \propto \int_{X^5} d^4x d\tau \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta\gamma} e_\gamma^a T_{\mu\nu}^b F_{\alpha\beta}. \quad (19)$$

In terms of DV tetrads, these dimensionless terms are universal and do not depend on the cut-off parameters.

In two scenarios of emergent gravity, the superplastic vacuum and the DV theory with bilinear tetrad field, the invariance under diffeomorphisms leads to the dimensionless physics. In the DV theory, this invariance is assumed as fundamental. In the superplastic vacuum, the diffeomorphism invariance corresponds to the proposed invariance under arbitrary deformations of the 4D vacuum crystal. In words of ‘t Hooft (applied originally to the local conformal symmetry) “this could be a way to make distance and time scales relative, so that what was dubbed as “small distances” ceases to have an absolute meaning” [66]. This suggests that the dimensionless physics can be the natural consequence of the diffeomorphism invariance, and can be the general property of any gravity emerging in quantum vacuum. The dimensionless physics leads to new topological terms in action with the universal integer valued topological quantum numbers of the quantum vacuum.

The universality takes place only for the topological numbers and the symmetry parameters. The other dimensionless quantities are not universal, being described by the functions of the ratios of different mass scales. In this respect, the answer to the question of how many fundamental constants are there in physics [67–70] can be trivial: there are no fundamental constants, and the ratios of parameters and the ratio of the length scales are the only meaningful quantities [10].

Funding. This work has been supported by the European Research Council (ERC) under the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme (Grant Agreement No. 694248).

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

REFERENCES

1. S. D. Bass, *Progr. in Particle and Nuclear Phys.* **113**, 103756 (2020).
2. A. D. Sakharov, *Sov. Phys. Dokl.* **12**, 1040 (1968).
3. W. G. Unruh, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 1351 (1981).
4. H. B. Nielsen, in *Fundamentals of Quark Models*, ed. by I. M. Barbour and A. T. Davies, Scottish Univ. Summer School in Phys. (1976), p. 528.
5. G. E. Volovik, *JETP Lett.* **44**, 498 (1986).
6. C. D. Froggatt and H. B. Nielsen, *Origin of Symmetry*, World Scientific, Singapore (1991).
7. P. Hořava, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 016405 (2005).
8. G. E. Volovik, *The Universe in a Helium Droplet*, Clarendon Press, Oxford (2003).
9. D. Diakonov, arXiv:1109.0091.
10. A. A. Vladimirov and D. Diakonov, *Phys. Rev. D* **86**, 104019 (2012).
11. A. A. Vladimirov and D. Diakonov, *Phys. Particles and Nuclei* **45**, 800 (2014).
12. Y. N. Obukhov and F. W. Hehl, *Phys. Lett. B* **713**, 321 (2012).
13. G. E. Volovik, *Physica B* **162**, 222 (1990).
14. B. A. Bilby and E. Smith, *Proc. Roy. Soc. London A* **231**, 263 (1955); **236**, 481 (1956).
15. E. Kröner, *Arch. Rational Mech. Anal.* **4**, 18 (1960).
16. I. E. Dzyaloshinskii and G. E. Volovick, *Ann. Phys.* **125**, 67 (1980).
17. G. E. Volovik and V. S. Dotsenko (jr), *JETP Lett.* **29**, 576 (1979).
18. A. F. Andreev and M. Yu. Kagan, *JETP* **59**, 318 (1984).
19. H. Kleinert and J. Zaanen, *Phys. Lett. A* **324**, 361 (2004).
20. F. W. Hehl and Y. N. Obukhov, *Ann. de la Fond. Louis de Broglie* **32**, 157 (2007).
21. F. R. Klinkhamer and G. E. Volovik, *JETP Lett.* **109**, 362 (2019).
22. M. A. Zubkov, arXiv:1909.08412.
23. A. F. Andreev and I. M. Lifshitz, *JETP* **29**, 1107 (1969).
24. I. E. Dzyaloshinskii, P. S. Kondratenko, and V. S. Levchenkov, *JETP* **35**, 823 (1972).
25. I. E. Dzyaloshinskii, P. S. Kondratenko, and V. S. Levchenkov, *JETP* **35**, 1213 (1972).
26. J. Nissinen and G. E. Volovik, *JETP* **127**, 948 (2018).
27. J. Nissinen and G. E. Volovik, *Phys. Rev. Res.* **1**, 023007 (2019).
28. G. E. Volovik, *JETP Lett.* **111**, 368 (2020).
29. K. Akama, *Progr. Theor. Phys.* **60**, 1900 (1978).
30. S. N. Vergeles, arXiv:1903.09957.
31. D. Vollhardt and P. Wölfle, *The Superfluid Phases of Helium 3*, Taylor & Francis, London (1990).
32. Ya. B. Zel'dovich, *Sov. Phys. Usp.* **11**, 381 (1968).
33. A. A. Starobinsky, *Phys. Lett. B* **9**, 99 (1980).
34. R. Schützhold, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 081302 (2002).
35. F. R. Klinkhamer and G. E. Volovik, *Phys. Rev. D* **79**, 063527 (2009).
36. F. R. Urban and A. R. Zhitnitsky, *Nucl. Phys. B* **835**, 135 (2010).
37. A. O. Barvinsky and A. R. Zhitnitsky, *Phys. Rev. D* **98**, 045008 (2018).
38. N. Arkani-Hamed, L. J. Hall, C. Kolda, and H. Murayama, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4434 (2000).
39. F. R. Klinkhamer and G. E. Volovik, *Phys. Rev. D* **80**, 083001 (2009).
40. F. R. Klinkhamer and G. E. Volovik, *J. Phys. Conf. Ser.* **314**, 012004 (2011).
41. F. R. Klinkhamer and G. E. Volovik, *Phys. Rev. D* **78**, 063528 (2008).
42. S. W. Hawking, *Phys. Lett. B* **134**, 403 (1984).
43. R. C. Tolman, *Relativity, Thermodynamics and Cosmology*, Clarendon Press, Oxford (1934).
44. J. Santiago and M. Visser, *Eur. J. Phys.* **40**, 025604 (2019).
45. W. G. Unruh, *Phys. Rev. D* **14**, 870 (1976).

46. J. D. Bekenstein, *Lett. Nuovo Cim.* **11**, 467 (1974).
47. J. D. Bekenstein and V. F. Mukhanov, *Phys. Lett. B* **360**, 7 (1995).
48. V. Cardoso, V. F. Foitc, and M. Kleban, *JCAP* **2019**(08), 006 (2019).
49. A. Lopez-Ortega, *Phys. Lett. B* **682**, 85 (2009).
50. Xue-Yang Song, Yin-Chen He, A. Vishwanath, and Chong Wang, arXiv:1909.08637.
51. H. T. Nieh and M. L. Yan, *J. Math. Phys.* **23**, 373 (1982).
52. H. T. Nieh and M. L. Yan, *Ann. Phys.* **138**, 237 (1982).
53. H. T. Nieh, *Int. J. Mod. Phys. A* **22**, 5237 (2007).
54. S. Yajima, *Class. Quant. Grav.* **13**, 2423 (1996).
55. O. Chandia and J. Zanelli, *Phys. Rev. D* **55**, 7580 (1997).
56. O. Chandia and J. Zanelli, arXiv:hep-th/9708139.
57. O. Chandia and J. Zanelli, *Phys. Rev. D* **58**, 045014 (1998).
58. Y. N. Obukhov, E. W. Mielke, J. Budczies, and F. W. Hehl, *Found. Phys.* **27**, 1221 (1997).
59. O. Parrikar, T. L. Hughes, and R. G. Leigh, *Phys. Rev. D* **90**, 105004 (2014).
60. Y. Ferreira, Y. Kedem, E. J. Bergholtz, and J. H. Bardarson, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 056601 (2019).
61. J. Nissinen, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 117002 (2020).
62. Z. V. Khaidukov and M. A. Zubkov, *JETP Lett.* **108**, 670 (2018).
63. Ze-Min Huang, Bo Han, and M. Stone, *Phys. Rev. B* **101**, 125201 (2020).
64. Long Liang and T. Ojanen, *Phys. Rev. Res.* **2**, 022016(R) (2020).
65. Ze-Min Huang, Bo Han, and M. Stone, *Phys. Rev. B* **101**, 165201 (2020).
66. G. 't Hooft, *The Cellular Automaton Interpretation of Quantum Mechanics*, in *Fundamental Theories of Physics*, Vol. 185, arXiv:1405.1548v3.
67. M. J. Duff, L. B. Okun, and G. Veneziano, *JHEP* **2002**(03), 023 (2002).
68. J.-P. Uzan, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 403 (2003).
69. J.-P. Uzan, *Living Rev. Relativ.* **14**, 2 (2011).
70. M. J. Duff, *Contemp. Phys.* **56**, 35 (2015).

К ВОПРОСУ О НАПЕРСТКАХ ЛЕФШЕЦА В СИГМА-МОДЕЛЯХ, I

И. Кричевер^{a,b,c*}, Н. Некрасов^{d,e,f**}

^a Сколковский институт науки и технологий
143026, Москва, Россия

^b Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
101000, Москва, Россия

^c Columbia University, New York
10027, New York, NY, USA

^d Simons Center for Geometry and Physics, Stony Brook University
11794-3636, Stony Brook, NY, USA

^e Центр перспективных исследований Сколтеховского института
143026, Москва, Россия

^f Институт проблем передачи информации им. А. А. Харкевича
127051, Москва, Россия

Поступила в редакцию 3 ноября 2020 г.,
после переработки 3 ноября 2020 г.
Принята к публикации 3 ноября 2020 г.

Исследуются наперстки Лефшеца как возможные контуры континуального интегрирования. Точнее, в двумерных $O(N)$ - и $\mathbb{C}\mathbb{P}^{N-1}$ -сигма-моделях найден широкий класс комплексных критических точек, важный для теории конечного объема и конечных температур с различными хипотенциалами. В настоящей работе рассмотрен случай $O(2m)$ -модели и $\mathbb{C}\mathbb{P}^{N-1}$ -модели в секторе нулевого инстантонного заряда. Построены также некоторые решения $O(2m+1)$ -модели. Результаты исследований $\mathbb{C}\mathbb{P}^{N-1}$ -модели с произвольным инстантонным зарядом и $O(N)$ -модели с нечетным N будут представлены в следующей работе.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040258

1. ВВЕДЕНИЕ

В квантовой теории статистическая сумма формально определяется функциональным интегралом

$$Z_{\hbar}(\mathbf{t}) = \int_{\mathcal{F}} [D\Phi] e^{-\frac{S_{\mathbf{t}}(\Phi)}{\hbar}} \quad (1.1)$$

по некоторому пространству \mathcal{F} полей. Корреляционные функции даются интегралом такого же типа:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}_1(x_1) \dots \mathcal{O}_r(x_r) \rangle_{\mathbf{t}} &= \\ &= \frac{1}{Z_{\hbar}(\mathbf{t})} \int_{\mathcal{F}} [D\Phi] e^{-\frac{S_{\mathbf{t}}(\Phi)}{\hbar}} \mathcal{O}_1(x_1) \dots \mathcal{O}_s(x_s). \end{aligned} \quad (1.2)$$

Для изучения аналитических свойств этих величин при изменении параметров t модели оказывается полезным деформировать область интегрирования так, чтобы она представляла собой цикл средней размерности в комплексифицированном пространстве полей $\mathcal{F}^{\mathbb{C}}$. При этом возможно, что имеется множество циклов, для которых интеграл (1.1) сходится. Для конечномерных интегралов такие циклы классифицируются группой относительных гомотопий $H_{\text{middle}}(\mathcal{F}^{\mathbb{C}}, \mathcal{F}_-^{\mathbb{C}}; \mathbb{Z})$, где $\mathcal{F}_-^{\mathbb{C}}$ — такие поля $\Phi \in \mathcal{F}^{\mathbb{C}}$, для которых $\text{Re}(S_t(\Phi)/\hbar) \gg 0$. Для общих значений параметров t существует базис $(\gamma_{\mathbf{a}})$ в

* E-mail: krichev@math.columbia.edu

** E-mail: nnekrasov@scgp.stonybrook.edu

$H_{\text{middle}}(\mathcal{F}^{\mathbb{C}}, \mathcal{F}^{\mathbb{C}}; \mathbb{Z})$ так называемых наперстков Лефшеца. Наперсток $\gamma_{\mathbf{a}}$, соответствующий критической точке \mathbf{a} функционала $S_t(\Phi)$, является объединением градиентных траекторий $\text{Re}(S_t(\Phi)/\hbar)$, выходящих из \mathbf{a} . Исходный функциональный интеграл равен сумме

$$Z_{\hbar}(t) = \sum_{\mathbf{a}} n_{\mathbf{a}} I_{\hbar}^{\mathbf{a}}(t), \quad (1.3)$$

где

$$I_{\hbar}^{\mathbf{a}}(t) = \int_{\gamma_{\mathbf{a}}} [D\Phi] e^{-\frac{S_t(\Phi)}{\hbar}} \quad (1.4)$$

— интеграл по наперстку Лефшеца, соответствующему комплексной критической точке \mathbf{a} . Кратности $n_{\mathbf{a}}$ являются целыми числами. При малых вариациях t они остаются постоянными, но при пересечении t некоторых гиперповерхностей (стенок маргинальной стабильности) кратности $n_{\mathbf{a}}$ могут скачкообразно меняться. Это называется явлением Стокса.

Настоящая работа посвящена изучению критических точек в некоторых полевых теориях.

1.1. Поля и симметрии

Пространство полей \mathcal{F} в каждой из моделей является пространством отображений некоторого исходного многообразия Σ в риманово многообразие X . Мы не будем затрагивать деликатный вопрос о гладкости отображений, имеющий отношение к проблеме точного определения меры в функциональном интеграле. Безусловно, для более строгого подхода необходимо рассмотреть обрезанную версию меры, а в определении функционального интеграла заменить микроскопическое действие $S_t(\Phi)$ на действие $S_{t(\wedge)}(\Phi_{\wedge})$, в котором характеристические импульсы полей Φ_{\wedge} не превосходят параметра \wedge , а константы $t(\wedge)$ зависят таким образом от \wedge , чтобы в пределе $\wedge \rightarrow \infty$ корреляционные функции (1.2) имели конечное значение при макроскопическом различии точек x_1, \dots, x_s . Мы надеемся, что для задачи классификации возможных интегральных контуров для асимптотически свободных теорий, таких как сигма-модели, более строгий подход даст такой же результат.

Для учета симметрий теории часто оказывается полезным рассматривать интегралы по пространствам $\text{Map}_{\hbar}(\Sigma, X)$ твистованных полей. Здесь $h : \pi_1(\Sigma) \rightarrow H$ обозначает гомоморфизм фундаментальной группы Σ в группу симметрий пространства X (и дополнительных структур X). h -твистованные отображения являются $\pi_1(\Sigma)$ -эквивариантными

отображениями $f : \tilde{\Sigma} \rightarrow X$ универсального накрытия Σ , такими что

$$f(\gamma \cdot p) = h(\gamma) \cdot f(p). \quad (1.5)$$

Другими словами, если зафиксировать точку $\xi \in \Sigma$ и представителя $f(\xi) \in X$, то твистованное отображение f в окрестности U точки ξ будет хорошо определенным отображением $U \rightarrow X$. Тем не менее, его продолжение на все многообразие Σ является многозначным с точностью до действия $h(\pi_1(\Sigma)) \subset G$ на X .

Еще одно явление, связанное с наличием симметрий X , это операторы дефекта, связанные со всеми гомотопическими группами $\pi_k(H)$. Например, элементы групп $\pi_{\dim(\Sigma)-1}(H)$ классифицируют локальные твистованные операторы, которые дают возможность определить функциональный интеграл по пространству $\Gamma(\Sigma, X \times_H \mathbf{H})$ сечений расслоения, ассоциированного с главным H -расслоением \mathbf{H} над Σ , задаваемым

$$c \in H^{\dim \Sigma}(\Sigma, \pi_{\dim(\Sigma)-1}(H)) \quad (1.6)$$

1.2. Квантовая механика

Случай $\Sigma = \mathbf{S}^1$, соответствующий конечномерным квантовым моделям (в которых Σ одномерно), был рассмотрен в работе [1]. В этом случае (X, ω) является симплектическим многообразием, чья комплексификация $(X^{\mathbb{C}}, \omega^{\mathbb{C}})$ является алгебраической интегрируемой системой

$$\pi : X^{\mathbb{C}} \rightarrow U^{\mathbb{C}} \approx \mathbb{C}^r,$$

лагранжевы слои которой $J_u = \pi^{-1}(u)$ над общими $u \in U^{\mathbb{C}}$ являются поляризованными абелевыми многообразиями. Действие моделей $S_t(\Phi)$ дается выражением

$$S_t(\Phi) = \oint_{\Sigma} d^{-1}\omega^{\mathbb{C}} - \sum_{k=1}^r t_k \oint u_k(s) ds, \quad (1.7)$$

в котором $s \sim s + 1$ — параметр на Σ , u_k — глобальные координаты на U , являющиеся гамильтонианами интегрируемой системы, \mathbf{t} — набор времен, или обобщенных обратных температур. Функциональный интеграл (1.1) представляет след комплексифицированного оператора эволюции:

$$Z_{\hbar}(\mathbf{t}) = \text{Tr}_{\mathcal{H}} \exp -\frac{1}{\hbar} \sum_k t_k \hat{H}_k. \quad (1.8)$$

Обозначим через $\Xi \subset U$ дискриминант системы, т. е. множество сингулярных слоев J_u . Зафиксируем некоторую начальную точку $u_* \in U \setminus \Xi$ и обозначим через Γ группу монодромии, т. е. образ фундаментальной группы, отвечающей выбору отмеченной точки $\pi_1(U^C \setminus \Xi, u_*)$ в группу $Sp(2r, \mathbb{Z}) \times \mathbb{Z}^f$ аффинных преобразований слоя $H_1(J_{u_*}, \mathbb{Z})$, сохраняющих симплектическую структуру, заданную формой пересечения (определяемой поляризацией).

В этом случае критические точки \mathbf{a} классифицируются орбитами $[c]$ группы монодромии Γ классов гомологий $c \in H_1(\pi^{-1}(u_*), \mathbb{Z})$. Обозначим через $\Gamma_{[c]} \subset \Gamma$ стабилизатор c , а через $\tilde{U}_{[c]} = \tilde{U}/\Gamma_{[c]}$ — соответствующий фактор универсальной накрывающей. Очевидно, что для любого целого $n \neq 0$ имеет место $\tilde{U}_{n[c]} = \tilde{U}_{[c]}$. Обозначим через $P := PH_1(J_{u_*}, \mathbb{Z})$ множество примитивных классов гомологий (т. е. классов гомологий, которые не являются целыми кратными других классов). Пусть $\mathcal{U}_\rho = \tilde{U}_\rho$, $\rho \in P$. Тогда для $n \in \mathbb{Z}$, $\mathbf{t} \in \mathbb{C}^r$ определим *суперпотенциал*, являющийся голоморфной функцией на \mathcal{U}_ρ , с помощью формулы

$$W_{n,\mathbf{t}} = n \oint_\rho d^{-1}\omega^C - \sum_{k=1}^r t_k u_k. \tag{1.9}$$

Множество

$$\mathcal{C} = \bigsqcup_{\rho \in P} \mathcal{C}_\rho, \quad \mathcal{C}_\rho \subset \mathcal{U}_\rho, \tag{1.10}$$

наперсток Лefшеца квантованной алгебраической интегрируемой системы можно представлять себе как дискретное подмножество в

$$\mathcal{U} = \bigsqcup_{\rho \in P} \mathcal{U}_\rho. \tag{1.11}$$

Для $\rho \neq 0$ множество \mathcal{C}_ρ является множеством критических точек *суперпотенциала* (1.9) на \mathcal{U}_ρ . Для $\rho = 0$, когда $\mathcal{U}_0 \approx U$, имеется тонкость. В этом случае суперпотенциал является линейной комбинацией координатных функций u_k , а значит, не имеет критических точек. Тем не менее, из физических соображений мы должны включить в \mathcal{C} множество $\Xi_{\max} \subset \Xi$ максимально вырожденных слоев, которые соответствуют вырожденным орбитам гамильтонова векторного поля, отвечающего сумме $\sum_k t_k u_k$, которая рассматривается как функция на всем фазовом пространстве X^C .

Имеется простая модификация задачи в случае систем с симметриями, сохраняющими гамильтонианы h_k . Вместо пространства петель $\mathcal{F} = LX$ и его

комплексификации $\mathcal{F}^C = LX^C$ надо, так же, как и в (1.5), рассмотреть пространство твистованных петель

$$\mathcal{F}_{[h]} = \{x(s) \mid 0 \leq s \leq 1, x(1) = h \cdot x(0)\}$$

и его комплексификацию $\mathcal{F}_{[h_c]}^C$. Здесь $[h]$ — класс сопряженности в группе H симплектических симметрий X , $[h_c]$ — класс сопряженности в комплексной группе H^C симплектических голоморфных симметрий X^C . Поскольку действие группы сохраняет гамильтонианы, группа действует на слоях J_u . В случае, когда H является группой Ли, порожденной гамильтонианами, твистованный случай эквивалентен нетвистованному с точностью до переопределения времен \mathbf{t} . Случай дискретной группы H очень интересен и не полностью описан в существующих публикациях. Он может быть сведен к (1.9) с P , являющимся пространством классов эквивалентности h -подкрученных петель на J_u .

1.3. Структура статьи

Мы рассматриваем двумерные полевые теории со значениями в нечетномерных сферах \mathbf{S}^{2m-1} или их фактор-пространствах по действию группы $U(1)$, являющихся комплексными проективными пространствами $\mathbb{C}\mathbb{P}^{n-1}$. Комплексификация этих пространств содержит, в качестве вещественных сечений, другие интересные симметрические пространства такие, как пространства Лобачевского, анти-де Ситтера и де Ситтера.

В разд. 2 мы вводим лагранжианы двумерных сигма-моделей и их реализацию в терминах (линейной) сигма-модели со связями и калибровочными группами. Затем мы обсуждаем твистованные граничные условия и их комплексификацию. После этого мы представляем первые свидетельства возможности существования в двумерных сигма-моделях аналога (1.9): в специальном классе *неймановских струнных решений* предъявляются алгебраически интегрируемые модели, а именно, модель Годена, т. е. система Хитчина в роде нуль с проколами, как в работе [2], но с иррегулярными сингулярностями.

В разд. 3 вводится основной инструмент нашего анализа: комплексные ферми-кривые. Вначале мы проанализируем построение ферми-кривой для малого возмущения постоянного потенциала уравнения Шредингера и покажем, как резонансные двойные точки разрешаются коэффициентами фурье потенциала $u(z, \bar{z})$.

В разд. 4 решается обратная задача восстановления потенциала $u(z, \bar{z})$ оператора Шредингера по

ферми-кривой конечного рода. Последние характеризуются как кривые с дополнительной структурой: голоморфной инволюцией, имеющей по крайней мере две неподвижные точки, и набором мероморфных дифференциалов Ω, Ω^\pm с заданными свойствами.

В разд. 5 оператор Шредингера $-\Delta + u$ связывается со своими решениями $\psi, \Delta\psi = u\psi$, так, как предписывается уравнениями движения сигма-модели. Мы показываем, что наличие такой связи обеспечивается дополнительной структурой на ферми-кривой: наличием некоторой мероморфной функции E . Более того, мы находим *суперпотенциал* \mathcal{W} , критические точки которого соответствуют дважды-периодическим решениям уравнений движения сигма-модели, и явно прослеживаем аналогию этого суперпотенциала с суперпотенциалом (1.9) в квантово-механических моделях.

Раздел 6 содержит заключение и описание направления будущих исследований. В частности, мы обсуждаем возможности конечномерных приближений конфигурационного пространства полевых теорий, мотивированных теорией алгебро-геометрических (или, что то же самое, конечнозонных) решений.

2. СИГМА-МОДЕЛИ

Предположим, что многообразие X , в котором принимают значения поля модели, является римановым многообразием с метрикой

$$g = g_{mn}(X)dX^m dX^n.$$

Тогда действие $S_t(\Phi)$ сигма-модели задается как

$$S_t(\Phi) = \int_{\Sigma} \sqrt{h} h^{\alpha\beta} g_{mn} \partial_\alpha X^m \partial_\beta X^n, \quad (2.1)$$

где $(X^m(z, \bar{z}))$ — координатная параметризация отображения $\Phi : \Sigma \rightarrow X$, а t обозначает параметры, которые описываются ниже. Лагранжиан модели зависит лишь от конформного класса метрики

$$ds_\Sigma^2 = h_{ab} d\xi^a d\xi^b, \quad h_{ab} \sim e^{2\psi} h_{ab}.$$

Пусть Σ — двумерный тор $\mathbf{S}^1 \times \mathbf{S}^1$. Обозначим через x, y вещественные координаты на Σ с периодами 1, т. е. $x \sim x + m, y \sim y + n$ при $m, n \in \mathbb{Z}$. Конформные структуры на Σ параметризуются комплексным числом $\tau = \tau_1 + i\tau_2$ с $\tau_2 > 0$ с помощью равенства

$$ds_\Sigma^2 \propto (dx + \tau dy)(dx + \bar{\tau} y) = dz d\bar{z}, \quad (2.2)$$

в котором $z = x + \tau y, \bar{z} = x + \bar{\tau} y$ обозначают, соответственно, голоморфную и антиголоморфную координаты на Σ .

Ниже мы будем часто использовать обозначения $\omega_x = 1, \omega_y = \tau$ для периодов и $\bar{\omega}_x = 1, \bar{\omega}_y = \bar{\tau}$ для сопряженных величин.

Параметры t модели — это параметры конформной структуры $\sqrt{h} h^{\alpha\beta}$ на Σ , параметры метрики g и параметры твистов. Последние возникают в тех случаях, когда метрика g допускает изометрии. Обозначим через H группу симметрий g . Продеформируем теорию с помощью плоской H -связности A :

$$S_t(\Phi; A) = \int_{\Sigma} dz d\bar{z} g_{mn} (\partial_z X^m + A_z^a V_a^m) \times (\partial_{\bar{z}} X^n + A_{\bar{z}}^a V_a^n), \quad (2.3)$$

где $A^a dz + \bar{A}^a d\bar{z}$ — форма H -связности с $\mathbf{a} = 1, \dots, \dim H$, а $V_a \in \text{Vect}(X)$ — образующие H , действующие изометриями X . Из инвариантности меры функционального интеграла относительно локальных преобразований отображения $\Phi : \Sigma \rightarrow X$, заданных изометриями H , следует, что корреляционные функции зависят только от классов эквивалентности

$$A \sim h^{-1} A h + h^{-1} dh.$$

В координатах x, y на Σ действие (2.3) имеет вид

$$S_t(\Phi; A) = \frac{1}{\tau_2} \int_{\mathbb{R}^2/\mathbb{Z}^2} dx dy \mathcal{L}, \quad (2.4)$$

$$\mathcal{L} = g_{mn}(X) (\tau \nabla_x X^m - \nabla_y X^m) \times (\bar{\tau} \nabla_x X^n - \nabla_y X^n),$$

где

$$\nabla_\alpha X^m = \partial_\alpha X^m + A_\alpha^a V_a^m(X), \quad \alpha = x, y. \quad (2.5)$$

Для плоских H -связностей A ,

$$dA^a + \frac{1}{2} f_{bc}^a A^b \wedge A^c = 0, \quad (2.6)$$

статсумма (1.1) может быть представлена в гамильтоновой форме:

$$\mathcal{Z}(A; \tau, \bar{\tau}) = \text{Tr}_{\mathcal{H}_{g_x - \text{twisted}}} (g_y q^{H_+} \bar{q}^{H_-}), \quad (2.7)$$

где

$$q = e^{2\pi i \tau},$$

$$\bar{q} = e^{-2\pi i \bar{\tau}},$$

$$H_\pm = \frac{1}{4\pi} (\hat{H} \pm \hat{P}),$$

$$g_x = P \exp \int_0^1 dx A_x,$$

$$g_y = P \exp \int_0^1 dy A_y, \quad (2.8)$$

— гамильтонианы и H -твисты, соответственно, а \mathcal{H}_{g_x} -twisted обозначает пространство состояний системы, полученное квантованием пространства g_x -твистованных петель в пространстве X .

Интересным аспектом теорий с группой симметрий H , имеющей нетривиальную фундаментальную группу $\pi_1(H)$, является возможность наличия топологически нетривиальных фонов при сохранении условия плоскости фоновой связности A . Они находятся во взаимно-однозначном соответствии с элементами $c \in H_2(\Sigma, \pi_1(H))$ (ср. (1.6)), известными для конечных $\pi_1(H)$ как обобщенные классы Штифеля–Уитни. Для простой группы Ли H фундаментальная группа $\pi_1(H)$ отождествляется с подгруппой центра $Z(\tilde{H})$ ее односвязного накрытия \tilde{H} . Топологически нетривиальный фон возникает при исследовании функционального интеграла по пространству \mathcal{F}_c сечений X -расслоений над Σ , ассоциированных с главным H -расслоением P над Σ . Последнее может быть тривиализовано над дополнением $\Sigma \setminus U_p$ малой окрестности U_p точки $p \in \Sigma$ и над самой окрестностью U_p . Класс гомотопии $c \in \pi_1(H)$ задается петлей в H , т.е. отображением $\partial U_p \rightarrow H$, определяемым переходом между двумя тривиализациями

$$P|_{\Sigma \setminus U_p} \times H \times \Sigma \setminus U_p$$

и

$$P|_{U_p} \approx H \times U_p.$$

Таким образом, с одной стороны, функциональный интеграл по \mathcal{F}_c может быть интерпретирован как 1-точечная функция на торе для локального оператора беспорядка \mathcal{O}_c :

$$\mathcal{Z}_c(A; \tau, \bar{\tau}) = \text{Tr}_{\mathcal{H}_{g_x}\text{-twisted}} (\mathcal{O}_c g_y q^{H_+} \bar{q}^{H_-}). \quad (2.9)$$

С другой стороны P_c поднимается до тривиального расслоения $\tilde{\Sigma} \times \tilde{H}$ для некоторой изогении $\tilde{\Sigma} \rightarrow \Sigma$. Плоская H -связность на Σ может рассматриваться как плоская \tilde{H} -связность на $\tilde{\Sigma}$, эквивариантная относительно действия $\pi_1(H)$.

Классически, в качестве группы симметрий проявляется только группа H , поскольку она является группой симметрий пространства X , в котором принимают значения поля. Тем не менее, квантово-механически, группа H может действовать на гильбертовом пространстве теории проективно, т.е. \mathcal{H} является на самом деле представлением группы \tilde{H} . Уравнение (2.9) является важным инструментом для исследования этого расширения симметрии.

Например, таким образом можно явно продемонстрировать существование BPS солитонов в $\mathcal{N} = 2$ суперсимметричной $\mathbb{C}\mathbb{P}^{N-1}$ -сигма-модели (см. [3]),

которые преобразуются в фундаментальном представлении $\wedge^l \mathbb{C}^N$ группы $\tilde{H} = SU(N)$, а значит, гильбертово пространство теории содержит возбуждения, симметрия которых расширена.

2.1. Комплексификация

Статистическая сумма (2.7) допускает аналитическое продолжение по параметрам q, \bar{q}, g_y . Это продолжение соответствует взятию того же функционального интеграла по (твистованным) отображениям $\Phi : \Sigma \rightarrow X$, но при соответствующей деформации действия (2.4), при которой параметры τ и $\bar{\tau}$ не являются комплексно сопряженными друг другу, а компонента связности A_y фонового поля становится комплексной. При этом модулярная инвариантность требует, чтобы компонента A_x также рассматривалась как комплексное калибровочное поле. Координаты X^m полей в (2.4), естественно, также становятся комплексными.

Мы продолжим называть периоды ω_α и $\bar{\omega}_\alpha$ для $\alpha = x, y$ сопряженными периодами. Сопряжение, которое имеется в виду, соответствует симметрии $(x, y) \mapsto (x, -y)$ физического тора, а не (искусственному в данном контексте) комплексному сопряжению.

Ниже мы обсудим геометрические аспекты комплексификации полей Φ . Они являются отображениями Σ в комплексификацию $X_{\mathbb{C}}$ исходного многообразия. В дальнейшем мы обсудим также аналитическое продолжение лагранжианов \mathcal{L} сигма-моделей, подкрученные граничные условия и уравнения движения. В заключение, мы проанализируем интересную редукцию уравнений движения $O(N)$ - и $\mathbb{C}\mathbb{P}^{N-1}$ -моделей, так называемый *анзац Неймана*. Значимость этого аназа заключена в его алгебраической интегрируемости. Мы покажем, что такие решения для $O(N)$ - и $\mathbb{C}\mathbb{P}^{N-1}$ -моделей описываются в терминах «иррегулярной версии» модели Хитчина рода нуль и \mathfrak{gl}_2 -модели Годена с нулевым спином.

2.1.1. Комплексификация сфер и проективных пространств

Хорошо известная тройка пространств $\mathbb{R}\mathbb{P}^m, \mathbb{C}\mathbb{P}^m, \mathbb{H}\mathbb{P}^m$ с симметриями $O(m), U(m), Sp(m)$ имеет интересные комплексификации.

Для векторного пространства L над полем k обозначим двойственное векторное пространство через L^\vee . Для $l \in L, p \in L^\vee$ обозначим значение p на l через $p \cdot l \in k$.

Пусть $V \approx \mathbb{C}^{m+1}$ — комплексное евклидово пространство, т.е. комплексное векторное пространство

с невырожденной симметрической формой $g(\cdot, \cdot)$. Пусть $W \approx \mathbb{C}^{n+1}$ — комплексное векторное пространство и, наконец, пусть $U \approx \mathbb{C}^{2(n+1)}$ — комплексное симплектическое пространство, т. е. комплексное векторное пространство с невырожденной анти-симметрической формой $\omega(\cdot, \cdot)$.

Имеют место (неканонические) изоморфизмы $U = W \oplus W^\vee$ для любого лагранжева подпространства $W \subset U$ и $V = W \oplus W^\vee$ для любого максимально изотропного подпространства $W \subset V$ в случае четного $n + 1$.

Пространство $S(V)$ векторов $x \in V$, таких что $g(x, x) = 1$, является комплексификацией сферы S^m .

Комплексификацией $\mathbb{P}\mathbb{R}(V)$ пространства $\mathbb{R}\mathbb{P}^m$ является фактор-пространство векторов $x \in V$, таких что $g(x, x) = 1$, по действию \mathbb{Z}_2 симметрии $x \mapsto -x$.

Комплексификацией $\mathbb{P}\mathbb{C}(W)$ пространства $\mathbb{C}\mathbb{P}^m$ является фактор-пространство пар (ψ, ψ^σ) , $\psi \in W, \psi^\sigma \in W^\vee$, таких что

$$\psi^\sigma \cdot \psi = 1, \tag{2.10}$$

по действию \mathbb{C}^\times

$$(\psi, \psi^\sigma) \mapsto (t\psi, t^{-1}\psi^\sigma), \quad t \in \mathbb{C}^\times. \tag{2.11}$$

Другими словами, $\mathbb{P}\mathbb{C}(W)$ является голоморфным симплектическим фактором $T^*W//\mathbb{C}^\times$, соответствующим отображению моментов (2.10).

Комплексификацией $\mathbb{P}\mathbb{H}(U)$ пространства $\mathbb{H}\mathbb{P}^m$ является фактор-пространство пар (u_1, u_2) в $u_{1,2} \in U$, таких что

$$\omega(u_1, u_2) = 1, \tag{2.12}$$

по действию группы $SL(2, \mathbb{C})$

$$(u_1, u_2) \mapsto (au_1 + bu_2, cu_1 + du_2), \tag{2.13}$$

$$ad - bc = 1.$$

2.1.2. Комплексификация: лагранжианы

Соответствующие лагранжианы, записанные в терминах приведенных выше геометрических структур, имеют вид

$$L_{\mathbb{R}\mathbb{P}^m} = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{T}^2} \sqrt{h} (h^{\alpha\beta} g(\partial_\alpha x, \partial_\beta x) + (g(x, x) - 1) U),$$

$$L_{\mathbb{C}\mathbb{P}^m} = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{T}^2} \sqrt{h} (h^{\alpha\beta} D_\alpha \psi^\sigma \cdot D_\beta \psi + (\psi^\sigma \cdot \psi - 1) U),$$

$$D_\alpha \psi^\sigma = \partial_\alpha \psi^\sigma - A_\alpha \psi^\sigma, \tag{2.14}$$

$$D_\alpha \psi = \partial_\alpha \psi + A_\alpha \psi,$$

$$L_{\mathbb{H}\mathbb{P}^m} = \frac{\varepsilon^{AB}}{4} \int_{\mathbb{T}^2} \sqrt{h} (h^{\alpha\beta} \omega(\mathfrak{D}_\alpha u_A, \mathfrak{D}_\beta u_B) + (\omega(u_A, u_B) - \varepsilon_{AB}) U),$$

$$\mathfrak{D}_\alpha u_1 = \partial_\alpha u_1 + A_\alpha u_1 + B_\alpha u_2,$$

$$\mathfrak{D}_\alpha u_2 = \partial_\alpha u_2 + C_\alpha u_1 - A_\alpha u_2,$$

где

$$\varepsilon^{12} = -\varepsilon^{21} = 1.$$

Лагранжиан

$$L_{\mathbb{R}\mathbb{P}^n} = \int_{\mathbb{T}^2} \sqrt{h} \left(\frac{1}{2} h^{ab} g(\partial_a x, \partial_b x) + (g(x, x) - 1) U \right) \tag{2.15}$$

$S(V)$ -модели, которую мы в дальнейшем будем называть $O(n + 1)$ -моделью, идентичен лагранжиану $\mathbb{R}\mathbb{P}^m$ -модели. Различие моделей в калибровке. В $\mathbb{R}\mathbb{P}^n$ -модели решения $(x(z, \bar{z}))$ и $(-x(z, \bar{z}))$ отождествляются. Необходимо также включить в модель твистованные секторы [4], в которых

$$x(z + \omega_\alpha, \bar{z} + \bar{\omega}_\alpha) = u_\alpha x(z, \bar{z}),$$

где $u_\alpha = \pm 1, \alpha = 1, 2$.

Для классической $\mathbb{C}\mathbb{P}^{m-1}$ -модели требуется решить уравнения Эйлера-Лагранжа для $L_{\mathbb{C}\mathbb{P}^{m-1}}$. Требуется определенная аккуратность для формулировки условий периодичности.

Пространство полей в $\mathbb{C}\mathbb{P}^{m-1}$ -модели — это пространство отображений

$$\mathcal{F} = \text{Maps}(\Sigma, \mathbb{C}\mathbb{P}^{m-1}) = \text{Maps}(\Sigma, \mathbf{S}^{2m-1}/U(1)), \tag{2.16}$$

которое является фактор-пространством $U(1)$ эквивариантных отображений

$$\mathcal{F} = \text{Maps}(P, \mathbf{S}^{2m-1})^{U(1)} / \mathcal{G}_P \tag{2.17}$$

$U(1)$ -расслоений P над Σ в сферу \mathbf{S}^{2m-1} по действию калибровочной группы $\mathcal{G}_P = \text{Maps}(\Sigma, U(1))$.

Множество связных компонент $\pi_0\text{Mars}(\Sigma, \mathbb{C}\mathbb{P}^{m-1})$ является множеством топологических классов расслоений P , которое при $n \geq 2$ изоморфно \mathbb{Z} . В настоящей работе мы рассматриваем только случай нулевого класса в \mathbb{Z} , а именно, $P = \Sigma \times U(1)$.

Соответствующее комплексифицированное пространство — это пространство отображений

$$\psi : \Sigma \rightarrow W, \quad \psi^\sigma : \Sigma \rightarrow W^\vee,$$

удовлетворяющих подкрученным граничным условиям

$$\psi(z + \omega_\alpha, \bar{z} + \bar{\omega}_\alpha) = u_\alpha(z, \bar{z})\psi(z, \bar{z}),$$

$$\psi^\sigma(z + \omega_\alpha, \bar{z} + \bar{\omega}_\alpha) = u_\alpha(z, \bar{z})^{-1}\psi^\sigma(z, \bar{z})$$

для $\alpha = 1, 2$, где $u_\alpha(z, \bar{z}) \in \mathbb{C}^\times$, профакторизованное по соотношению

$$(\psi, \psi^\sigma) \sim (t\psi, t^{-1}\psi^\sigma)$$

для любых двумерных периодических функций $t : \Sigma \rightarrow \mathbb{C}^\times$. Калибровочные поля \mathfrak{A}_α должны удовлетворять подкрученным условиям периодичности

$$\begin{aligned} A_\alpha(z + \omega_\beta, \bar{z} + \bar{\omega}_\beta) &= \\ &= A_\alpha(z, \bar{z}) + u_\beta(z, \bar{z})^{-1}\partial_\alpha u_\beta(z, \bar{z}). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Определение комплексификации $\mathbb{H}\mathbb{P}^n$ -модели мы оставляем в качестве упражнения.

2.1.3. Модели главного кирального поля

С общей точки зрения представляет интерес случай, когда многообразие $X = \mathcal{G}$ является компактной группой Ли. В этом случае так называемой модели главного кирального поля в качестве римановой метрики на X берется $\mathcal{G} \times \mathcal{G}$ инвариантная метрика

$$G = \text{tr}(g^{-1}dg)^2. \quad (2.19)$$

Группой симметрии модели главного кирального поля является $H = \mathcal{G} \times \mathcal{G}$.

2.1.4. Твистованные граничные условия и комплексификация

Как отмечалось во Введении (см. также (2.3)), простейший твист граничных условий соответствует выбору плоской связности в главном H -расслоении P_c над Σ . Для случая $\Sigma \approx \mathbf{S}^1 \times \mathbf{S}^1$ это соответствует

выбору двух коммутирующих элементов $h_x, h_y \in H$, $h_x h_y = h_y h_x$, с точностью до общего сопряжения

$$(h_x, h_y) \equiv (h^{-1}h_x h, h^{-1}h_y h), \quad h \in H.$$

Для главного кирального поля $X = \mathcal{G}$ твистованные граничные условия имеют вид

$$\begin{aligned} g(z + 1, \bar{z} + 1) &= a_L g(z, \bar{z}) a_R^{-1}, \\ g(z + \tau, \bar{z} + \bar{\tau}) &= b_L g(z, \bar{z}) b_R^{-1}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

где $a_{L,R}, b_{L,R} \in \mathcal{G}$ могут быть одновременно сопряжением переведены в максимальный тор $T \subset \mathcal{G}$.

Для $X = \mathbf{S}^{2m-1}$ коммутирующая пара общих твистов $h_x, h_y \in O(V)$ задает разложение

$$V \otimes \mathbb{C} = W \oplus W^\vee,$$

при котором h_x, h_y представляются унитарными коммутирующими операторами $a, b \in GL(W)$, $[a, b] = 0$:

$$\begin{aligned} h_x(\psi \oplus \psi^\sigma) &= a \cdot \psi \oplus \psi^\sigma a^{-1}, \\ h_y(\psi \oplus \psi^\sigma) &= b \cdot \psi \oplus \psi^\sigma b^{-1}, \\ \psi &\in W, \quad \psi^\sigma \in W^\vee, \\ g(\psi_1 \oplus \psi_1^\sigma, \psi_2 \oplus \psi_2^\sigma) &= \psi_2^\sigma \cdot \psi_1 + \psi_1^\sigma \cdot \psi_2. \end{aligned} \quad (2.21)$$

В случае $X = \mathbf{S}^{2m}$ коммутирующая пара твистов общего положения $h_x, h_y \in O(2n + 1)$, $h_x h_y = h_y h_x$, задает разложение

$$V \otimes \mathbb{C} = W \oplus W^\vee \oplus \mathbb{C},$$

такое что h_x, h_y могут быть представлены унитарными операторами $a, b \in U(W)$, как в (2.21), и действуют на \mathbb{C} умножением на ± 1 . В этом случае метрика на V имеет вид

$$\|\psi \oplus \psi^\sigma \oplus \chi\|_g^2 = 2\psi^\sigma \cdot \psi + \chi^2. \quad (2.22)$$

При комплексификации мы полагаем, что ψ, ψ^σ и χ являются независимыми полями со значениями в W, W^\vee и \mathbb{C} , соответственно. При этом a, b становятся общими коммутирующими элементами $GL(W)$. В настоящей работе мы рассматриваем только случай, когда

$$\begin{aligned} a &= \text{diag}(a_1, \dots, a_n), \\ b &= \text{diag}(b_1, \dots, b_n), \end{aligned} \quad (2.23)$$

хотя случай жордановых клеток также представляет интерес.

Для $X = \mathbb{C}\mathbb{P}^{m-1}$ граничные условия классифицируются элементами

$$c = e^{\frac{2\pi i p}{m}} \in \mathbb{Z}_m,$$

вторым классом Штифеля–Уитни $SU(m)/\mathbb{Z}_m$ рас-
слоения и парой h_x, h_y матриц из $SU(m)$, таких что

$$h_x h_y = c h_y h_x \quad (2.24)$$

с точностью до общего сопряжения

$$h_\alpha \sim h^{-1} h_\alpha h, \quad \alpha = x, y, \quad h \in SU(m).$$

Граничные условия имеют вид

$$\begin{aligned} \psi(z + \omega_\alpha, \bar{z} + \bar{\omega}_\alpha) &= h_\alpha e^{i\varphi_\alpha(z, \bar{z})} \psi(z, \bar{z}), \\ \psi^\sigma(z + \omega_\alpha, \bar{z} + \bar{\omega}_\alpha) &= e^{-i\varphi_\alpha(z, \bar{z})} \psi^\sigma(z, \bar{z}) h_\alpha^{-1}, \\ A_a(z + \omega_\alpha, \bar{z} + \bar{\omega}_\alpha) &= A_a(z, \bar{z}) + i\partial_a \varphi(z, \bar{z}), \end{aligned} \quad (2.25)$$

в котором $e^{i\varphi_\alpha(z, \bar{z})}$ является $U(1)$ -значной функцией. Обозначим $l = \text{gcd}(p, m)$ и $k = m/l$. Тогда $h_1 h_2^k = h_2^k h_1$, а значит, на k -листном накрытии $\tilde{\Sigma}$ тора Σ мы получим обычные твистованные граничные условия. При комплексификации h_x, h_y становятся обычными элементами $GL(W)$, коммутирующими с точностью до элемента c центра, как в (2.24).

2.2. Уравнения движения при комплексификации

Для $O(N)$ -модели с четным N имеем

$$\begin{aligned} \partial_z \partial_{\bar{z}} \psi &= U \psi, \\ \partial_z \partial_{\bar{z}} \psi^\sigma &= U \psi^\sigma, \\ U &= -\frac{1}{2} (\partial_z \psi^\sigma \cdot \partial_{\bar{z}} \psi + \partial_{\bar{z}} \psi^\sigma \cdot \partial_z \psi), \\ \psi^\sigma \cdot \psi &= 1, \end{aligned} \quad (2.26)$$

а для нечетного N

$$\begin{aligned} \partial_z \partial_{\bar{z}} \psi &= U \psi, \quad \partial_z \partial_{\bar{z}} \psi^\sigma = U \psi^\sigma, \\ \partial_z \partial_{\bar{z}} \chi &= U \chi, \\ U &= -\frac{1}{2} (\partial_z \psi^\sigma \cdot \partial_{\bar{z}} \psi + \partial_{\bar{z}} \psi^\sigma \cdot \partial_z \psi) - \partial_z \chi \partial_{\bar{z}} \chi, \\ \psi^\sigma \cdot \psi + \chi^2 &= 1. \end{aligned} \quad (2.27)$$

В случае $\mathbb{C}\mathbb{P}^{N-1}$ -модели комплексифицированные уравнения движения имеют вид

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} (D_{\bar{z}} D_z + D_z D_{\bar{z}}) \psi + U \psi &= 0, \\ -\frac{1}{2} (D_{\bar{z}} D_z + D_z D_{\bar{z}}) \psi^\sigma + U \psi^\sigma &= 0, \end{aligned} \quad (2.28)$$

где

$$\begin{aligned} D_{z, \bar{z}} \psi &= \partial_{z, \bar{z}} \psi + A_{z, \bar{z}} \psi, \\ D_{z, \bar{z}} \psi^\sigma &= \partial_{z, \bar{z}} \psi^\sigma - A_{z, \bar{z}} \psi^\sigma. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Калибровочные поля A_α и потенциал U выражаются в терминах решений ψ, ψ^σ , удовлетворяющих условиям связи

$$\psi^\sigma \cdot \psi = 1, \quad (2.30)$$

с помощью формул

$$\begin{aligned} A_{z, \bar{z}} &= -\psi^\sigma \cdot \partial_{z, \bar{z}} \psi, \\ U &= -\frac{1}{2} (D_z \psi^\sigma \cdot D_{\bar{z}} \psi + D_{\bar{z}} \psi^\sigma \cdot D_z \psi). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Уравнения (2.31) калибровочно инвариантны. Ниже мы часто будем использовать калибровку, в которой $A_{\bar{z}} = 0$.

2.3. Первые признаки алгебраической интегрируемости

Пусть (x, y) — вещественные координаты на Σ . Введем для $O(N)$ -модели *анзац Неймана*

$$\begin{aligned} \psi(x, y) &= e^{ix\theta} f(y), \\ \psi^\sigma(x, y) &= f^\sigma(y) e^{-ix\theta}, \end{aligned} \quad (2.32)$$

где $f(y) \in W$, $f^\sigma(y) \in W^\vee$ для четных N , а для нечетных N дополнительно $\chi(x, y) = \chi(y) \in \mathbb{C}$. Для $\mathbb{C}\mathbb{P}^{N-1}$ -модели мы будем использовать тот же анзац (2.32). Твист a имеет вид

$$a = e^{i\theta}. \quad (2.33)$$

В случае $O(N)$ -модели с четным N и в случае $\mathbb{C}\mathbb{P}^{N-1}$ -модели поля $f(y)$ и $f^\sigma(y)$ связаны соотношением

$$f^\sigma \cdot f = 1. \quad (2.34)$$

Для $O(N)$ -модели с нечетным N связь имеет вид

$$\chi^2(y) + f^\sigma(y) \cdot f(y) = 1. \quad (2.35)$$

Подстановка анзаца в уравнения движения (ниже производные $\partial_y \Xi$ по y обозначаются через $\dot{\Xi}$) для $O(N)$ -модели с четным N дает

$$\begin{aligned} \ddot{f} &= (\bar{\tau}\tau\theta^2 - u(y)) f + 2i\tau_1 \theta \dot{f}, \\ \ddot{f}^\sigma &= f^\sigma (\bar{\tau}\tau\theta^2 - u(y)) - 2i\tau_1 \dot{f}^\sigma \theta, \end{aligned} \quad (2.36)$$

где

$$\begin{aligned} u(y) &\equiv -4\tau_2^2 U = i\tau_1 (f^\sigma \theta \dot{f} - \dot{f}^\sigma \theta f) + \\ &\quad + \tau \bar{\tau} f^\sigma \cdot \theta^2 f + \dot{f}^\sigma \cdot \dot{f}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Уравнения (2.36), (2.37) являются обобщением системы Неймана [5], которая линеаризуется на якобиане спектральной кривой [6]. Система (2.36) допускает представление Лакса со спектральным параметром, являющимся вариантом gl_2 -системы Хитчина в роде нуль с регулярными [2] и иррегулярными особенностями. Похожий анзац существует и для $\mathbb{C}P^{N-1}$ -модели, которому также можно сопоставить систему Хитчина для рода нуль.

Можно сделать два заключения. Во-первых, существуют решения сигма-моделей, которые описываются линейным движением на некоторых абелевых многообразиях и которые аналогичны решениям, возникающим в квантово-механическом случае. Во-вторых, соответствующие абелевы многообразия являются якобианами или приммианами некоторых спектральных кривых. К сожалению, не видно никакого простого обобщения анзаца Неймана для получения более общих решений сигма-моделей. Необходим другой подход.

Для $N = 4$ имеет место совпадение $O(N)$ -модели и модели главного кирального поля с группой $SU(2)$. Последняя, как и любая модель главного кирального поля, допускает представление нулевой кривизны, которое будет рассмотрено в работе [7]. Подход, который мы используем в настоящей работе для решения $O(N)$ -модели, не использует представления нулевой кривизны. Он представляет собой развитие подхода, предложенного в работе [8] и развитого в работе [9]. Этот подход естественно назвать построением *интегрируемых линейных операторов с самосогласованными потенциалами*.

3. КОМПЛЕКСНАЯ ФЕРМИ-КРИВАЯ

Построение состоит из двух шагов. Сначала мы параметризуем периодический линейный оператор $-\Delta + u$ в терминах *спектральной кривой и линейного расслоения (дивизора) на ней*. Спектральная кривая C_u , которая называется *комплексной ферми-кривой*, параметризует блоховские решения линейного уравнения. Второй шаг состоит из характеристики спектральных кривых, на которых существует набор таких точек, что соответствующий им набор блоховских решений удовлетворяет определенным квадратичным соотношениям.

3.1. Периодические линейные операторы

В этом разделе мы представим первый шаг построения. Для двумерной периодической функции

$u : \Sigma \rightarrow \mathbb{C}$ рассмотрим блоховские решения уравнения Шредингера, т. е. решения уравнения

$$\partial\bar{\partial}\psi = u(z, \bar{z})\psi, \tag{3.1}$$

такие что

$$\begin{aligned} \psi(z + 1, \bar{z} + 1) &= a\psi(z, \bar{z}), \\ \psi(z + \tau, \bar{z} + \bar{\tau}) &= b\psi(z, \bar{z}). \end{aligned} \tag{3.2}$$

Для заданного $u = u(z, \bar{z})$ обозначим через

$$C_u \subset \mathcal{M} = \mathbb{C}^\times \times \mathbb{C}^\times$$

множество величин (a, b) , для которых имеются решения уравнения (3.1), (3.2).

В работе [10] было доказано, что для общего гладкого периодического потенциала множество C_u является гладкой римановой поверхностью бесконечного рода. Более того, было доказано, что *алгебро-геометрические потенциалы* плотны в пространстве всех периодических потенциалов. Алгебро-геометрическими называются потенциалы, для которых нормализация C_u аналитической кривой C_u , называемая *ферми-кривой*, имеет конечный род. Для таких потенциалов C_u компактифицируется двумя бесконечными точками P_\pm . Уравнение Шредингера с любым комплексным потенциалом является *формально самосопряженным*. Поэтому для любого блоховского решения с множителями $(a, b) \in C_u$ существует двойственное решение ψ^σ с множителями $(a^{-1}, b^{-1}) \in C_u$. Другими словами, любая ферми-кривая инвариантна относительно голоморфной инволюции $\sigma : C_u \rightarrow C_u$:

$$\sigma(a, b) := (a^{-1}, b^{-1}). \tag{3.3}$$

Отметим, что неподвижные точки инволюции, отличные от бесконечных, существуют только тогда, когда уровень $E = 0$ является собственным для (анти)периодической задачи для оператора H .

3.1.1. Модельный пример

Для мотивировки дальнейшего начнем с разбора простейшего примера, в котором потенциал постоянен, $u(z, \bar{z}) = u_0 = \text{const} \neq 0$. Обозначим через $\Lambda, \bar{\Lambda} \subset \mathbb{C}$ решетки периодов, которые в рамках комплексифицированной постановки не предполагаются комплексно-сопряженными:

$$\begin{aligned} \Lambda &= \{ m + n\tau \mid m, n \in \mathbb{Z} \}, \\ \bar{\Lambda} &= \{ m + n\bar{\tau} \mid m, n \in \mathbb{Z} \}, \\ \Lambda^0 &= \Lambda \setminus \{0\}. \end{aligned} \tag{3.4}$$

Для $\kappa = m + n\tau \in \Lambda^0$ определим

$$\begin{aligned} \bar{\kappa} &= m + n\bar{\tau}, \\ \kappa_1 &= m + n\tau_1, \\ \kappa_2 &= n\tau_2, \end{aligned} \quad (3.5)$$

и

$$\Lambda^{0,\kappa} = \Lambda \setminus \{0, \kappa\}. \quad (3.6)$$

Для постоянного потенциала общее решение уравнения (3.1) имеет вид

$$\psi(z, \bar{z}, \zeta) = \Upsilon_{\zeta, u_0} \equiv \exp(\zeta z + u_0 \zeta^{-1} \bar{z}). \quad (3.7)$$

Явная параметризация кривой C_{u_0} дается формулами

$$\begin{aligned} a(\zeta) &= \exp(\zeta + u_0 \zeta^{-1}), \\ b(\zeta) &= \exp(\zeta \tau + u_0 \zeta^{-1} \bar{\tau}). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Кривая инвариантна относительно инволюции

$$\begin{aligned} \sigma : \zeta &\rightarrow -\zeta, \\ a(-\zeta) &= a^{-1}(\zeta), \\ b(-\zeta) &= b^{-1}(\zeta). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Отображение (3.8) ферми-кривой $C_{u_0} = \mathbb{C}^*$ в кривую C_{u_0} является отображением нормализации: оно взаимно-однозначно вне бесконечного числа пар точек $(\zeta_{\kappa, u_0}^-, \zeta_{\kappa, u_0}^+)$ для $\kappa \in \Lambda^0$, которые отображаются в двойные точки

$$(a_{\kappa, u_0}, b_{\kappa, u_0}) = (a(\zeta_{\kappa, u_0}^\pm), b(\zeta_{\kappa, u_0}^\pm))$$

кривой C_{u_0} . Здесь ζ_{κ, u_0}^\pm — решения уравнений

$$\begin{aligned} \zeta_{\kappa, u_0}^+ - \zeta_{\kappa, u_0}^- &= \frac{\pi \bar{\kappa}}{\tau_2}, \\ \zeta_{\kappa, u_0}^+ \zeta_{\kappa, u_0}^- &= \frac{\bar{\kappa}}{\kappa} u_0. \end{aligned} \quad (3.10)$$

В явном виде

$$\begin{aligned} a_{\kappa, u_0} &= (-1)^m \exp \frac{\pi \kappa_1}{\tau_2} D_{\kappa, u_0}, \\ b_{\kappa, u_0} &= (-1)^n \exp \frac{\pi (\kappa \bar{\tau})_1}{\tau_2} D_{\kappa, u_0}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

где

$$\begin{aligned} D_{\kappa, u_0} &= \sqrt{1 + \frac{4u_0}{u_\kappa}}, \\ \zeta_{\kappa, u_0}^\pm &= \frac{\pi \bar{\kappa}}{2\tau_2} (D_{\kappa, u_0} \pm 1), \\ u_\kappa &= \frac{\pi^2 \kappa \bar{\kappa}}{\tau \bar{\tau}} \end{aligned} \quad (3.12)$$

и

$$\begin{aligned} \kappa_1 &:= m + n\tau_1, \\ (\kappa \bar{\tau})_1 &:= m\tau_1 + n\tau \bar{\tau}, \\ (\kappa \bar{\tau})_2 &:= -m\tau_2. \end{aligned} \quad (3.13)$$

3.1.2. Возмущение кривой

Обозначим через $e_\kappa, \kappa \in \Lambda$, базисные дважды периодические функции:

$$e_\kappa = \exp\left(\frac{\pi}{\tau_2} (\bar{\kappa} z - \kappa \bar{z})\right) = \exp(2\pi i(m x + n y)). \quad (3.14)$$

Тогда общий периодический потенциал может быть представлен в виде

$$u = u_0 + \varepsilon v = \sum_{\lambda \in \Lambda} u^{(\lambda)} e_\lambda, \quad (3.15)$$

где $u^{(\lambda)} \in \mathbb{C}$. Будем считать, что $\varepsilon v = \varepsilon v(z, \bar{z})$ — маленькое периодическое возмущение, т. е. $u^{(\lambda)} = \varepsilon v^{(\lambda)}$ для $\lambda \in \Lambda^0$ и $u^{(0)} = u_0 + \varepsilon v^{(0)}$ для постоянной моды.

Обозначая $H_{u_0} = -\partial \bar{\partial} + u_0$, получаем

$$H_{u_0} (e_\kappa \Upsilon_{\zeta, u_0}) = E_\kappa(\zeta, u_0) (e_\kappa \Upsilon_{\zeta, u_0}), \quad (3.16)$$

где

$$E_\kappa(\zeta, u_0) = \frac{\pi \kappa}{\tau_2 \zeta} (\zeta + \zeta_{\kappa, u_0}^+) (\zeta - \zeta_{\kappa, u_0}^-). \quad (3.17)$$

То, что правая часть уравнения (3.17) равна нулю в точках $\zeta = \mp \zeta_{\kappa, u_0}^\pm$, отражает равенство

$$e_\kappa \Upsilon_{\zeta_{\kappa, u_0}^-, u_0} = \Upsilon_{\zeta_{\kappa, u_0}^+, u_0}. \quad (3.18)$$

Будем искать решения уравнения Шредингера

$$(H_{u_0} + \varepsilon v) \Psi_{\zeta, u_0} = 0 \quad (3.19)$$

в виде

$$\Psi_{\zeta, u_0} = \Upsilon_{\zeta, u_0} + \sum_{\lambda \in \Lambda^0} \psi_{\zeta, u_0}^{(\lambda)} (e_\lambda \Upsilon_{\zeta, u_0}). \quad (3.20)$$

Уравнение (3.19) эквивалентно системе квадратичных уравнений:

$$\begin{aligned} v^{(\kappa)} + \left(v^{(0)} + \varepsilon^{-1} E_\kappa(\zeta, u_0) \right) \psi_{\zeta, u_0}^{(\kappa)} + \\ + \sum_{\lambda \in \Lambda^{0, \kappa}} v^{(\lambda)} \psi_{\zeta, u_0}^{(\kappa - \lambda)} = 0, \\ v^{(0)} + \sum_{\kappa \in \Lambda^0} v^{(\kappa)} \psi_{\zeta, u_0}^{(-\kappa)} = 0. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Будем решать уравнения (3.21) по теории возмущений для малых ε . Имеется два типа решений.

1. Вне двойных точек, т. е. $\varepsilon \ll |\zeta - \zeta_{\kappa, u}^\pm|$ для всех $\kappa \in \Lambda$. В этом случае решение (3.20) доминируется единственной плоской волной Υ_{ζ, u_0} , поправки к которой имеют порядок ε :

$$\psi_{\zeta, u_0}^{(\lambda)} = -\varepsilon \frac{v^{(\lambda)}}{E_\lambda(\zeta, u_0)} + \dots, \quad \lambda \in \Lambda^0, \quad (3.22)$$

а нулевая мода $u^{(0)}$ отличается от u_0 на члены порядка ε^2 :

$$u^{(0)} = u_0 - \varepsilon^2 \sum_{\kappa \in \Lambda^0} \frac{v^{(\kappa)} v^{(-\kappa)}}{E_\kappa(\zeta, u)} + \dots \quad (3.23)$$

Здесь и далее “...” обозначает члены более высокого порядка по ε . Соответствующая часть кривой C_{u_0} деформируется в кривую C_u :

$$\begin{aligned} a(\zeta) &= \exp \left(\zeta + \frac{u^{(0)}}{\zeta} + \frac{\tau_2}{\pi} \times \right. \\ &\times \left. \sum_{\kappa \in \Lambda^0} \frac{u^{(\kappa)} u^{(-\kappa)}}{(\zeta + \zeta_{\kappa, u_0}^+) (\zeta - \zeta_{\kappa, u_0}^-)} + \dots \right), \\ b(\zeta) &= \exp \left(\tau \zeta + \bar{\tau} \frac{u^{(0)}}{\zeta} + \frac{\tau_2 \bar{\tau}}{\pi} \times \right. \\ &\times \left. \sum_{\kappa \in \Lambda^0} \frac{u^{(\kappa)} u^{(-\kappa)}}{(\zeta + \zeta_{\kappa, u_0}^+) (\zeta - \zeta_{\kappa, u_0}^-)} + \dots \right). \end{aligned} \quad (3.24)$$

2. В окрестности одной из двойных точек, т.е. для выбранного $\kappa \in \Lambda^0$ и выбранного знака “+” или “-”, $\zeta = \zeta_+$ или $\zeta = \zeta_-$, где ζ_\pm находятся из уравнений

$$\begin{aligned} \zeta_+ - \zeta_- &= \frac{\pi \bar{\kappa}}{\tau_2}, \\ \frac{u_-}{\zeta_-} - \frac{u_+}{\zeta_+} &= \frac{\pi \kappa}{\tau_2}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

эквивалентных

$$\Upsilon_{\zeta_+, u_+} = e_\kappa \Upsilon_{\zeta_-, u_-}. \quad (3.26)$$

Явным образом, при

$$u_\pm = u \pm \varepsilon y, \quad u = u^{(0)} - \varepsilon x,$$

имеем

$$\zeta_\pm = \frac{\pi \bar{\kappa}}{2\tau_2} \left(\sqrt{D_{\kappa, u}^2 + \frac{4\varepsilon^2 y^2}{u_\kappa^2}} - \frac{2\varepsilon y}{u_\kappa} \pm 1 \right). \quad (3.27)$$

Решение уравнения $H\Psi = 0$ может быть найдено в виде

$$\begin{aligned} \Psi &= \psi^+ \Upsilon_{\zeta_+, u_+} + \psi^- \Upsilon_{\zeta_-, u_-} + \\ &+ \varepsilon \sum_{\lambda \in \Lambda^{0, \kappa}} \chi^\lambda e_\lambda \Upsilon_{\zeta_-, u_-}, \end{aligned} \quad (3.28)$$

причем коэффициенты

$$\begin{aligned} \psi^\pm &= \psi_0^\pm + \varepsilon \psi_1^\pm + \dots, \\ \chi^\lambda &= \chi_0^{(\lambda)} + \varepsilon \chi_1^{(\lambda)} + \dots \end{aligned}$$

определяются из билинейных уравнений, которые в пределе $\varepsilon \rightarrow 0$ сводятся к

$$x^2 - y^2 = v^{(\kappa)} v^{(-\kappa)} \quad (3.29)$$

и

$$\begin{aligned} \psi^+ &= t v^{(\kappa)} = \tilde{t}(x+y), \\ \psi^- &= t(y-x) = -\tilde{t} v^{(-\kappa)}, \\ \chi^{(\lambda)} &= t \frac{(x-y)v^{(\lambda)} - v^{(\lambda-\kappa)}v^{(\kappa)}}{\mathcal{E}_\lambda(\kappa)} = \\ &= \tilde{t} \frac{v^{(\lambda)}v^{(-\kappa)} - (x+y)v^{(\lambda-\kappa)}}{\mathcal{E}_\lambda(\kappa)}, \\ \lambda &\in \Lambda^{0, \kappa}, \end{aligned} \quad (3.30)$$

где t или \tilde{t} — произвольные нормирующие множители,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_\lambda(\kappa) &= \frac{u_\kappa}{2\lambda\bar{\lambda}} (2\lambda\bar{\lambda} - \\ &- \kappa\bar{\lambda} (1 + D_{\kappa, u^{(0)}}) - \bar{\kappa}\lambda (1 - D_{\kappa, u^{(0)}})). \end{aligned} \quad (3.31)$$

Часть кривой C_u в окрестности точки $(a_{\kappa, u_0}, b_{\kappa, u_0})$ в параметрах (x, y) имеет вид (ср. (3.5), (3.13))

$$\begin{aligned} \frac{a(x, y)}{a_{\kappa, u^{(0)}}} &= 1 + \frac{2\pi i \varepsilon}{\tau_2 u_\kappa D_{\kappa, u^{(0)}}} \times \\ &\times (\kappa_2 D_{\kappa, u^{(0)}} y - \kappa_1 x) + \dots, \\ \frac{b(x, y)}{b_{\kappa, u^{(0)}}} &= 1 + \frac{2\pi i \varepsilon}{\tau_2 u_\kappa D_{\kappa, u^{(0)}}} \times \\ &\times ((\kappa\bar{\tau})_2 D_{\kappa, u^{(0)}} y - (\kappa\bar{\tau})_1 x) + \dots \end{aligned} \quad (3.32)$$

Это параметрическое представление несингулярной квадрики, которая при $v^{(\kappa)} v^{(-\kappa)} \rightarrow 0$ вырождается в пару прямых, пересекающихся в двойной точке $(x, y) = (0, 0)$. Для

$$v^{(\kappa)} v^{(-\kappa)} \neq 0$$

двойная точка разрешается.

Отметим, что разрешение двойных точек происходит одновременно для κ и $-\kappa$, поскольку параметр в правой части (3.29) четен по κ . Можно проверить, что симметрия $\zeta \mapsto -\zeta$ сохраняется во всех порядках теории возмущений.

Замечание 3.1. Теория возмущений, развитая в работе [10], имеет другую природу и применима к конечным возмущениям. Для конечных возмущения кривая C_u оказывается «склеенной» из областей трех, а не двух, как выше, типов. Третий тип отвечает резонансам более высокого порядка, которые приходится рассматривать для конечных возмущений.

4. АЛГЕБРАИЧЕСКИ-ИНТЕГРИРУЕМЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ

Напомним, что алгебраически-интегрируемые потенциалы были определены выше как потенциалы, для которых соответствующая ферми-кривая C_u имеет конечный род.

Теория двумерных операторов, интегрируемых на одном уровне энергии, восходит к работе [11], в которой была предложена алгебро-геометрическая конструкция интегрируемых двумерных операторов Шредингера в магнитном поле

$$H = -\frac{1}{2}(D_z D_{\bar{z}} + D_{\bar{z}} D_z) + U(z, \bar{z}). \quad (4.1)$$

Сдвиг потенциала $U \rightarrow U - E$ преобразует уравнение $H\psi = E\psi$ к виду $H\psi = 0$. Поэтому без ограничения общности мы будем считать, что уровень энергии нулевой.

Построения работы [11] основывались на понятии *двухточечной, двухпараметрической* функции Бейкера – Ахиезера $\psi(z, \bar{z}, p)$, которая однозначно определялась гладкой алгебраической кривой Γ рода g с двумя отмеченными точками P_{\pm} и эффективным дивизором $D = \gamma_1 + \dots + \gamma_g$ степени g . Для функции Бейкера – Ахиезера и для потенциала оператора H были найдены явные формулы в терминах тэта-функции Римана Γ .

В работах [12, 13] были найдены *достаточные* условия, выделяющие среди общих алгебро-геометрических данных $\{\Gamma, P_{\pm}, D\}$ данные, соответствующие *потенциальным* операторам

$$H = -\partial_z \partial_{\bar{z}} + U(z, \bar{z}), \quad (4.2)$$

т. е. операторам с нулевым магнитным полем. Соответствующие кривые — это кривые с голоморфной инволюцией $\sigma : \Gamma \rightarrow \Gamma$, имеющие в точности две точки $P_{\pm} = \sigma(P_{\pm})$. Требование на число неподвижных точек было крайне существенным и для другого замечательного результата Новикова и Веселова: соответствующие функции Бейкера – Ахиезера допускают явные выражения в терминах тэта-функций Прима.

В работе [14] конструкция Новикова и Веселова была обобщена на случай, в котором выделенный уровень энергии является собственным для (анти)переиодической задачи для оператора Шредингера.

Пусть Γ является гладкой алгебраической кривой рода g с инволюцией

$$\sigma : \Gamma \rightarrow \Gamma, \quad \sigma \circ \sigma = Id, \quad (4.3)$$

имеющей $n + 1$ пару

$$\Gamma^{\sigma} = \{P_{\pm}\} \cup \{p_{\pm}^{(i)} \mid i = 1, \dots, n\}$$

неподвижных точек

$$\begin{aligned} \sigma(P_{\pm}) &= P_{\pm}, \\ \sigma(p_{\pm}^{(i)}) &= p_{\pm}^{(i)}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Зафиксируем в окрестности двух из этих неподвижных точек P_{\pm} локальные координаты $k_{\pm}^{-1}(p)$, такие что $k_{\pm}^{-1}(P_{\pm}) = 0$, которые предполагаются нечетными относительно σ , т. е.

$$k_{\pm}(\sigma(p)) = -k_{\pm}(p). \quad (4.5)$$

В дальнейшем фактор-кривая Γ/σ будет обозначаться через Γ_0 . Проекция

$$\pi : \Gamma \rightarrow \Gamma_0 = \Gamma/\sigma \quad (4.6)$$

представляет кривую Γ как двулистное накрытие кривой Γ_0 , ветвящееся в точках Γ^{σ} . В таком представлении инволюция σ соответствует перестановке листов накрытия. Из формулы Римана – Гурвица следует, что род кривой Γ равен

$$g = 2g_0 + n, \quad (4.7)$$

где g_0 — род кривой Γ_0 .

Рассмотрим абелев интеграл третьего рода $d\Omega$ на Γ_0 с полюсами только в неподвижных точках инволюции, вычеты в которых удовлетворяют соотношениям

$$\begin{aligned} \text{Res}_{P_{\pm}} d\Omega &= \pm 1, \\ \text{Res}_{p_{\pm}^{(i)}} d\Omega &= -\text{Res}_{p_{\pm}^{(i)}} d\Omega. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Число нулей дифференциала $d\Omega$ равно $2(g_0 + n) = g + n$. Обозначим их через γ_s^0 , $s = 1, \dots, g + n$, т. е.

$$d\Omega(\gamma_s^0) = 0. \quad (4.9)$$

Выберем для каждого s точку γ_s на Γ такую, что

$$\pi(\gamma_s) = \gamma_s^0, \quad s = 1, \dots, g + n \quad (4.10)$$

(число таких выборов равно 2^{g+n}). Ниже $\gamma_1, \dots, \gamma_{g+n}$ будет называться допустимым дивизором.

Лемма 4.1. (см. [14]) *Для допустимого дивизора общего положения D существует единственная функция Бейкера – Ахиезера $\psi(z, \bar{z}, p)$, $p \in \Gamma$, такая что*

- (i) ψ мероморфна на $\Gamma \setminus P_{\pm}$ и имеет не более чем простые полюса в точках γ_s (если они различны);
- (ii) в окрестности точки P_{\pm} функция ψ имеет вид

$$\psi = \exp\left(\frac{1}{2}k_{\pm}(z + \bar{z} \pm z \mp \bar{z})\right) \times \left(1 + \sum_{s=1}^{\infty} \xi_s^{\pm}(z, \bar{z})k_{\pm}^{-s}\right), \quad k_{\pm} = k_{\pm}(p); \quad (4.11)$$

- (iii) ее значения в точках $p_{\pm}^{(i)}$ удовлетворяют уравнению

$$\psi(z, \bar{z}, p_{+}^{(i)}) = \psi(z, \bar{z}, p_{-}^{(i)}). \quad (4.12)$$

Напомним стандартные факты об многообразии Прима и тэта-функции Прима.

Существует базис a - и b -циклов на Γ с канонической матрицей пересечений:

$$a_i \cdot a_j = b_i \cdot b_j = 0,$$

$$a_i \cdot b_j = \delta_{ij},$$

на котором действие σ имеет вид

$$\begin{aligned} \sigma(a_i) &= a_{i+g_0}, \\ \sigma(b_i) &= b_{i+g_0}, \\ i &= 1, \dots, g_0, \end{aligned} \quad (4.13)$$

и

$$\begin{aligned} \sigma(a_i) &= -a_i, \\ \sigma(b_i) &= -b_i, \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$i = 2g_0 + 1, \dots, 2g_0 + n = g.$$

Рассмотрим базис голоморфных дифференциалов $d\omega_i$ на Γ , нормированных так, что

$$\oint_{a_j} d\omega_i = \delta_{ij}^j, \quad 1 \leq i, j, \leq g, \quad (4.15)$$

и определим базис нечетных дифференциалов

$$du_i = d\omega_i - d\omega_{i+g_0}, \quad i = 1, \dots, g_0, \quad (4.16)$$

$$du_i = 2d\omega_{i+g_0}, \quad i = g_0 + 1, \dots, g_0 + n, \quad (4.17)$$

$\sigma^*(du_j) = -du_j$. Они называются *нормированными голоморфными дифференциалами Прима*. Заметим, что при $n > 0$ число $g_0 + n$ этих дифференциалов больше, чем половина рода g кривой Γ . Обозначим вектор нормированных дифференциалов Прима через

$$d\mathbf{u} = (du_j)_{j=1}^{g_0+n}. \quad (4.18)$$

Матрица $\mathbf{\Pi} \in \text{Mat}_{(g_0+n) \times (g_0+n)}(\mathbb{C})$ b -периодов дифференциалов Прима

$$\Pi_{kj} = \oint_{b_k} du_j, \quad 1 \leq k, j \leq g_0 + n, \quad (4.19)$$

симметрична, имеет положительно-определенную мнимую часть и определяет тэта-функцию Прима

$$\begin{aligned} \theta(\mathbf{z}) &= \theta(\mathbf{z}|\mathbf{\Pi}) := \\ &= \sum_{\mathbf{m} \in \mathbb{Z}^{g_0+n}} \exp(2\pi i(\mathbf{z}, \mathbf{m}) + \pi i(\mathbf{\Pi}\mathbf{m}, \mathbf{m})), \end{aligned} \quad (4.20)$$

где для $\mathbf{z} \in \mathbb{C}^{g_0+n}$

$$(\mathbf{z}, \mathbf{m}) = m_1 z_1 + \dots + m_{g_0+n} z_{g_0+n}. \quad (4.21)$$

Тэта-функция имеет следующие свойства монодромии:

для

$$\mathbf{m}, \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^{g_0+n} \quad (4.22)$$

выполняется

$$\begin{aligned} \theta(\mathbf{z} + \mathbf{m} + \mathbf{\Pi}\mathbf{n}|\mathbf{\Pi}) &= \\ &= \theta(\mathbf{z}|\mathbf{\Pi}) \exp(-2\pi i(\mathbf{z}, \mathbf{n}) - \pi i(\mathbf{n}, \mathbf{\Pi}\mathbf{n})). \end{aligned} \quad (4.23)$$

Лемма 4.2. (см. [14]) *Функция Бейкера – Ахиезера в Лемме 4.1 равна*

$$\begin{aligned} \psi(z, \bar{z}, p) &= \frac{\theta(\mathbf{A}(p) + z\mathbf{U}_+ + \bar{z}\mathbf{U}_- + \mathbf{Z})\theta(\mathbf{Z})}{\theta(z\mathbf{U}_+ + \bar{z}\mathbf{U}_- + \mathbf{Z})\theta(\mathbf{A}(p) + \mathbf{Z})} \times \\ &\times \exp(z\Omega_+(p) + \bar{z}\Omega_-(p)). \end{aligned} \quad (4.24)$$

Здесь

(i)

$$\mathbf{A}(p) = \int_{P_-}^p d\mathbf{u} \in \mathbb{C}^{g_0+n} / \mathbb{Z}^{g_0+n} \oplus \mathbf{\Pi}\mathbb{Z}^{g_0+n};$$

(ii)

$$\Omega_{\pm}(p) = \int_{P_{\mp}}^p d\Omega_{\pm},$$

где $d\Omega_{\pm}$ – единственный мероморфный дифференциал на Γ , нормированный условиями

$$\oint_{a_j} d\Omega_{\pm} = 0, \quad j = 1, \dots, g_0 + n, \quad (4.25)$$

с единственным полюсом (второго порядка) в P_{\pm} вида

$$d\Omega_{\pm} = (1 + O(k_{\pm}^{-2})) dk_{\pm}, \quad p \rightarrow P_{\pm}; \quad (4.26)$$

(iii) координаты векторов

$$\mathbf{U}_\pm = (U_\pm^j)_{j=1}^g \in \mathbb{C}^g$$

равны

$$U_\pm^j = \frac{1}{2\pi i} \oint_{b_j} d\Omega_\pm, \quad j = 1, \dots, g_0 + n; \quad (4.27)$$

(iv) вектор

$$\mathbf{Z} \in \mathbb{C}^{g_0+n} / \mathbb{Z}^{g_0+n} \oplus \mathbb{P}\mathbb{Z}^{g_0+n}$$

параметризует допустимые дивизоры,

$$\sum_{s=1}^{g+n} \mathbf{A}(\gamma_s) + \mathbf{Z} \in \mathbb{Z}^{g_0+n} \oplus \mathbb{P}\mathbb{Z}^{g_0+n}, \quad (4.28)$$

(напомним, что $d\Omega(\pi(\gamma_s)) = 0$).

Замечание 4.3. Определение абелева интеграла Ω_- нуждается в уточнении, поскольку дифференциал $d\Omega_-$ имеет полюс в точке P_- . Под интегралом $d\Omega_-$ мы подразумеваем выбор в окрестности P_- ветви $\Omega_- = k_- + O(k_-^{-1})$, а затем ее аналитическое продолжение вдоль пути. Предполагается, что пути в определении $\mathbf{A}(p)$ и $\Omega_\pm(p)$ одни и те же.

Теорема 4.4. (см. [14]) *Функция Бейкера – Ахиезера $\psi(z, \bar{z}, p)$, заданная формулой (4.24), удовлетворяет уравнению*

$$(\partial_z \partial_{\bar{z}} - u(z, \bar{z}))\psi(z, \bar{z}, p) = 0 \quad (4.29)$$

с потенциалом

$$u(z, \bar{z}) = \partial_{\bar{z}} \xi_1^+ = \partial_z \xi_1^- = 2\partial_z \partial_{\bar{z}} \ln \theta(zU^+ + \bar{z}U^- + \mathbf{Z}). \quad (4.30)$$

Таким образом, данные $(\Gamma, \sigma, P_\pm, k_\pm, \Omega)$ определяют потенциал $u(z, \bar{z})$ оператора Шредингера. В случае, когда этот потенциал периодичен, его ферми-кривая и кривая Γ совпадают, $C_u = \Gamma$.

5. УСЛОВИЯ САМОСОГЛАСОВАНИЯ

5.1. Самосогласованные потенциалы: появление функции E

Предположим, что на кривой Γ_0 существует мероморфная функция $E(q)$ с m простыми полюсами. Обозначим их через

$$q^{(j)} \in \Gamma_0, \quad j = 1, \dots, m,$$

а их прообразы на Γ — через

$$\{q_+^{(j)}, q_-^{(j)} = \sigma(q_+^{(j)})\} = \pi^{-1}(q^{(j)}).$$

Прообраз $\pi^* E$ функции E является четной относительно σ мероморфной функцией на Γ , которую мы будем также обозначать через E : $E \circ \sigma = E$. Введем «времена» T_n^\pm , разлагая E в точке P_\pm по локальной координате k_\pm^{-1} :

$$E(p) = E_\pm + \sum_{n=1}^{\infty} T_n^\pm k_\pm(p)^{-2n}, \quad p \rightarrow P_\pm. \quad (5.1)$$

Пусть $\psi(z, \bar{z}, p)$ — функция Бейкера – Ахиезера (4.24) на Γ . Определим $(N = n + 2m)$ -мерный вектор

$$x(z, \bar{z}) = \chi \oplus \psi \oplus \psi^\sigma,$$

$$\chi \in \mathbb{C}^n, \quad \psi \in \mathbb{C}^m, \quad \psi^\sigma \in \mathbb{C}^m,$$

следующим образом:

$$\begin{aligned} \chi(z, \bar{z}) &= \left(r_i \psi(z, \bar{z}, p_\pm^{(i)}) \right)_{i=1}^n, \\ \psi(z, \bar{z}) &= \left(r_j \psi(z, \bar{z}, q_+^{(j)}) \right)_{j=1}^m, \\ \psi^\sigma(z, \bar{z}) &= \left(r_j \psi(z, \bar{z}, q_-^{(j)}) \right)_{j=1}^m, \end{aligned} \quad (5.2)$$

где

$$\begin{aligned} r_i^2 &:= -\frac{E(p_+^{(i)}) - E(p_-^{(i)})}{E_+ - E_-} \operatorname{Res}_{p_+^{(i)}} d\Omega, \\ & \quad i = 1, \dots, n, \\ r_j^2 &:= -\frac{1}{2(E_+ - E_-)} \operatorname{Res}_{q^{(j)}} E d\Omega, \\ & \quad j = 1, \dots, m. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Замечание 5.1. Заметим, что первое из уравнений (5.3) может быть записано в виде

$$r_i^2 := -\frac{\operatorname{Res}_{p_+^{(i)}} E d\Omega + \operatorname{Res}_{p_-^{(i)}} E d\Omega}{E_+ - E_-}, \quad (5.4)$$

подчеркивающим роль дифференциала $E d\Omega$.

Теорема 5.2. *Вектор $x(z, \bar{z}) \in \mathbb{C}^N$ удовлетворяет уравнениям*

$$g(x, x) \equiv \sum_{i=1}^n \chi_i^2 + \sum_{j=1}^m \psi_j \psi_j^\sigma = 1, \quad (5.5)$$

$$g(\partial_z x, \partial_{\bar{z}} x) = -u(z, \bar{z}), \quad (5.6)$$

где u — потенциал соответствующего оператора Шредингера. Кроме того, для компонент $T_{zz}, T_{\bar{z}\bar{z}}$ классического тензора напряжений имеют место равенства

$$\begin{aligned} g(\partial_z x, \partial_z x) &= T_1^+, \\ g(\partial_{\bar{z}} x, \partial_{\bar{z}} x) &= T_1^-, \end{aligned} \quad (5.7)$$

а для токов высших спинов – равенства

$$\begin{aligned} g(\partial_z^2 x, \partial_{\bar{z}}^2 x) &= T_2^+ + T_1^+ v^+, \\ g(\partial_{\bar{z}}^2 x, \partial_z^2 x) &= T_2^- + T_1^- v^-, \end{aligned} \quad (5.8)$$

где

$$\partial_z v^+ = u_z, \quad \partial_{\bar{z}} v^- = u_{\bar{z}}. \quad (5.9)$$

Доказательство. Рассмотрим дифференциал

$$d\Omega^{[0,0]} := \psi\psi^\sigma E d\Omega, \quad (5.10)$$

где

$$\psi^\sigma(z, \bar{z}, p) = \psi(z, \bar{z}, \sigma(p)). \quad (5.11)$$

Так как, по предположению, локальные координаты k_{\pm}^{-1} в окрестностях точек P_{\pm} нечетны относительно σ , то экспоненциальные особенности первых двух множителей в (5.10) сокращают друг друга. Более того, из определения допустимых дивизоров следует, что полюса ψ и $\psi^\sigma = \sigma^*\psi$ сокращаются нулями $d\Omega$. Следовательно, дифференциал $d\Omega^{[0,0]}$ является четным относительно σ мероморфным дифференциалом на Γ с полюсами в точках, где $d\Omega$ или функция E имеют полюса, т. е. в точках

$$\Gamma^\sigma \cup \{q_{\pm}^{(j)} \mid j = 1, \dots, m\}. \quad (5.12)$$

Сумма вычетов $d\Omega^{[0,0]}$ равна нулю. Явно выписывая выражения для вычетов $d\Omega^{[0,0]}$, получим (5.5). Уравнение (5.6) является прямым следствием (5.5) и (4.29). Его можно получить непосредственно, рассматривая вычеты дифференциала

$$(\partial_z \psi \partial_{\bar{z}} \psi^\sigma + \partial_{\bar{z}} \psi \partial_z \psi^\sigma) E d\Omega.$$

Для доказательства (5.7) достаточно воспользоваться равенством нулю вычетов дифференциала

$$d\Omega^{[1,1]} = \partial_z \psi \partial_{\bar{z}} \psi^\sigma E d\Omega.$$

Уравнение (5.8) следует из рассмотрения вычетов дифференциала

$$d\Omega^{[2,2]} = (\partial_z^2 \psi)(\partial_{\bar{z}}^2 \psi^\sigma) E d\Omega.$$

□

5.2. Условия периодичности

Алгебро-геометрический потенциал $u(z, \bar{z})$ периодичен по обоим переменным тогда и только тогда,

когда дополнительно выполнены $g + n = 2(g_0 + n)$ условий:

$$\begin{aligned} \mathbf{U}^+ + \mathbf{U}^- &= \mathbf{m} + \mathbf{\Pi} \cdot \tilde{\mathbf{m}}, \quad \mathbf{m}, \tilde{\mathbf{m}} \in \mathbb{Z}^{g_0+n}, \\ \tau \mathbf{U}^+ + \bar{\tau} \mathbf{U}^- &= \mathbf{l} + \mathbf{\Pi} \cdot \tilde{\mathbf{l}}, \quad \mathbf{l}, \tilde{\mathbf{l}} \in \mathbb{Z}^{g_0+n}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Если эти условия выполнены, то кривая Γ отображается в $\mathcal{M} = \mathbb{C}^\times \times \mathbb{C}^\times$, (ср. (3.2)):

$$\begin{aligned} \mu : \Gamma &\rightarrow C_u \subset \mathcal{M}, \quad \mu : p \mapsto (a(p), b(p)), \\ a(p) &= \exp(\Omega_+(p) + \Omega_-(p) - 2\pi i(\mathbf{A}(p), \tilde{\mathbf{m}})), \\ b(p) &= \exp(\tau \Omega_+(p) + \bar{\tau} \Omega_-(p) - 2\pi i(\mathbf{A}(p), \tilde{\mathbf{l}})). \end{aligned} \quad (5.14)$$

Выражения (5.14) хорошо определены (однозначны на кривой), поскольку A -периоды дифференциалов $d\Omega_{\pm}$ нулевые, а дифференциалов $(d\mathbf{A}(p), \tilde{\mathbf{m}})$, $(d\mathbf{A}(p), \tilde{\mathbf{l}})$ – целочисленны. В то же время B -периоды дифференциалов

$$d\alpha := d\Omega_+(p) + d\Omega_-(p) - 2\pi i(d\mathbf{A}(p), \tilde{\mathbf{m}}), \quad (5.15)$$

$$d\beta := \tau d\Omega_+(p) + \bar{\tau} d\Omega_-(p) - 2\pi i(d\mathbf{A}(p), \tilde{\mathbf{l}}) \quad (5.16)$$

являются координатами векторов $2\pi i\tilde{\mathbf{m}}$ и $2\pi i\tilde{\mathbf{l}}$, соответственно.

Отметим, что в том случае, когда дифференциал $u(z, \bar{z})$ дважды периодичен, соответствующая функция Бейкера – Ахизера является блоховским решением уравнения Шредингера, т. е.

$$\psi(z + 1, \bar{z} + 1, p) = a(p)\psi(z, \bar{z}, p), \quad (5.17)$$

$$\psi(z + \tau, \bar{z} + \bar{\tau}, p) = b(p)\psi(z, \bar{z}, p). \quad (5.18)$$

Для доказательства этих равенств достаточно проверить, что их правые и левые части имеют одинаковые аналитические свойства на Γ .

Локально гладкая алгебраическая кривая рода g с инволюцией, имеющая $2n + 2$ неподвижных точек, однозначно определяется фактор-кривой и набором $2n + 2$ точек на ней. Следовательно, размерность пространства таких кривых равна $3g_0 + 2n - 1$. Векторы \mathbf{U}^{\pm} , определенные выше, зависят от выбора первого ростка локальных координат k_{\pm}^{-1} в окрестностях отмеченных точек P_{\pm} . Таким образом, общее число параметров равно $3g_0 + 2n + 1$. При фиксированных целочисленных векторах $\mathbf{l}, \tilde{\mathbf{l}}, \mathbf{m}, \tilde{\mathbf{m}}$ уравнения (5.13), число которых равно $2(g_0 + n)$, определяют (локально) подмногообразие размерности $g_0 + 1$, если оно непусто.

Множество $\mathcal{S}^{g_0, n}$ кривых Γ , удовлетворяющих условиям периодичности для некоторых целочисленных векторов $\mathbf{l}, \tilde{\mathbf{l}}, \mathbf{m}, \tilde{\mathbf{m}}$, является объединением связных компонент:

$$\mathcal{S}^{g_0, n} = \bigcup_I \mathcal{S}_I^{g_0, n}. \quad (5.19)$$

Локальные координаты на $\mathcal{S}^{g_0, n}$ могут быть определены аналогично тем, которые используются для кривых Зайберга – Виттена, а именно

$$\begin{aligned} A_0 &= \text{Res}_{P_+} \alpha d\beta, \\ A_i &= \oint_{a_i + a_{g_0+i}} \alpha d\beta, \\ i &= 1, \dots, g_0. \end{aligned} \tag{5.20}$$

Отметим, что, хотя абелев интеграл $\alpha(p)$ многозначен, выражения (5.20) хорошо определены. Действительно, сдвиг α на константу не меняет A_0 , так как вычеты $d\beta$ нулевые. Этот сдвиг не меняет и величины A_i , так как дифференциал $d\beta$ нечетен относительно σ , в то время как $a_i + a_{g_0+i}$ является четным циклом.

Из определения (4.16) дифференциалов Прима следует (ср. (5.14))

$$\begin{aligned} a(p_+^{(i)}) &= a(p_-^{(i)}), \\ b(p_+^{(i)}) &= b(p_-^{(i)}). \end{aligned} \tag{5.21}$$

При выполнении условий периодичности координаты вектора $x = \chi \oplus \psi \oplus \psi^\sigma$ имеют следующие свойства монодромии:

$$\begin{aligned} \chi_i(z + 1, \bar{z} + 1) &= a_i \chi_i(z, \bar{z}), \\ a_i^2 &= a^2(p_\pm^{(i)}) = 1, \\ \chi_i(z + \tau, \bar{z} + \bar{\tau}) &= b_i \chi_i(z, \bar{z}), \\ b_i^2 &= b^2(p_\pm^{(i)}) = 1, \end{aligned} \tag{5.22}$$

здесь $i = 1, \dots, n$, в то время как

$$\begin{aligned} \psi(z + 1, \bar{z} + 1) &= a \psi(z, \bar{z}), \\ \psi^\sigma(z + 1, \bar{z} + 1) &= \psi^\sigma(z, \bar{z}) a^{-1}, \\ \psi(z + \tau, \bar{z} + \bar{\tau}) &= b \psi(z, \bar{z}), \\ \psi^\sigma(z + \tau, \bar{z} + \bar{\tau}) &= \psi^\sigma(z, \bar{z}) b^{-1}, \end{aligned} \tag{5.23}$$

где

$$\begin{aligned} a^{\pm 1} &= \text{diag} \left(a(q_\pm^{(1)}), \dots, a(q_\pm^{(m)}) \right), \\ b^{\pm 1} &= \text{diag} \left(b(q_\pm^{(1)}), \dots, b(q_\pm^{(m)}) \right). \end{aligned} \tag{5.24}$$

5.3. Почему функция E существует?

Существование мероморфной функции E с определенными аналитическими свойствами на спектральной кривой Γ оператора $-\Delta + u$ приводит к тому, что потенциал u оператора может быть квадратичным образом выражен в терминах решений.

Целью настоящего раздела является доказательство того, что для случая гладких спектральных кривых существование функции E является не только достаточным, но и необходимым. Другими словами, доказательство того, что предложенное построение дает все решения рассматриваемой проблемы, для которых спектральная кривая является гладкой.

Напомним, что линейное уравнение (3.1) получается при вариации лагранжиана (2.15) по переменной x . Твистованные граничные условия накладывают ограничения на множитель Лагранжа $U = u(z, \bar{z})$: соответствующая ферми-кривая в пространстве \mathcal{M} блоховских множителей (известного также как пространство модулей плоских \mathbb{C}^\times -связностей) должна проходить через набор точек $M_j^\pm = (a_j^{\pm 1}, b_j^{\pm 1})$, определяемых параметрами твистов.

В отсутствие твистов ($a_i = b_i = 1$) это эквивалентно нетривиальному нелокальному условию того, что нуль является собственным значением оператора Шредингера кратности не менее N .

Зафиксируем параметры твистов:

$$\begin{aligned} a &= (a_j)_{j=1}^{n+m}, \\ b &= (b_j)_{j=1}^{n+m}, \end{aligned} \tag{5.25}$$

где

$$\begin{aligned} a_i^2 &= b_i^2 = 1, \\ i &= m + 1, \dots, n + m, \end{aligned} \tag{5.26}$$

и обозначим через $\mathcal{U}_{a,b} u(z, \bar{z})$ множество потенциалов, для которых сформулированное выше условие выполнено, т. е.

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{a,b} &:= \{ u \mid (a(q_j^\pm), b(q_j^\pm)) = \\ &= (a_j^{\pm 1}, b_j^{\pm 1}) \in \mathcal{C}_u, j = 1, \dots, n + m \}. \end{aligned} \tag{5.27}$$

Оно стратифицировано конечномерными многообразиями $\mathcal{U}_{a,b}^{n,g_0}$, открытые области которых образуют потенциалы, построенные выше, где g_0 — род фактор-кривой $\Gamma_0 := \Gamma/\sigma$, а $\#\Gamma^\sigma = 2(n + 1)$ — число неподвижных точек инволюции.

Размерность многообразия $\mathcal{U}_{a,b}^{n,g_0}$ равна

$$\dim \mathcal{U}_{a,b}^{n,g_0} = (g_0 + 1 - m) + (g_0 + n). \tag{5.28}$$

Первое слагаемое в правой части (5.28) — размерность многообразия спектральных кривых $\mathcal{S}^{g_0, n}$, проходящих через $2m$ нетривиальных параметра подкрутки $a_j^{\pm 1}, b_j^{\pm 1}, j = 1, \dots, m$. Второе слагаемое — это размерность соответствующего многообразия Прима.

Характеризация касательного пространства к бесконечномерному пространству $\mathcal{U}_{a,b}$ в пространстве всех потенциалов u операторов Шредингера на Σ дается следующей леммой.

Лемма 5.3. *Вариация $\delta u(z, \bar{z})$ принадлежит касательному пространству $T_u \mathcal{U}_{a,b}$ к потенциалу $u \in \mathcal{U}_{a,b}$ тогда и только тогда, когда выполнены уравнения*

$$\int_{\Sigma} \delta u(z, \bar{z}) \psi_j(z, \bar{z}) \psi_j^{\sigma}(z, \bar{z}) dz d\bar{z} = 0, \quad (5.29)$$

где

$$\begin{aligned} \psi_j(z, \bar{z}) &:= \psi(z, \bar{z}, q_+^{(j)}), \\ \psi_j^{\sigma}(z, \bar{z}) &:= \psi(z, \bar{z}, q_-^{(j)}). \end{aligned}$$

Доказательство. Варьируя уравнение (3.1), получим

$$(\partial\bar{\partial} - u)\delta\psi_j = \delta u \psi_j. \quad (5.30)$$

По предположению, вариация $\delta\psi_j$ имеет те же блоховские множители (a_j, b_j) , что и ψ_j . Умножая обе части (5.30) на двойственное решение ψ_j^{σ} уравнения (3.1), которое имеет блоховские множители (a_i^{-1}, b_i^{-1}) , и усредняя потом по Σ , мы получим (5.29). \square

Вариация лагранжиана по u дает уравнение

$$\int_{\Sigma} \delta u(z, \bar{z}) \left(1 - \sum_j \psi_j \psi_j^{\sigma} \right) dz d\bar{z} = 0. \quad (5.31)$$

Учитывая (5.29), мы приходим к выводу, что решения сигма-модели соответствуют критическим точкам функционала

$$\langle u \rangle := \int_{\Sigma} u(z, \bar{z}) dz d\bar{z}, \quad (5.32)$$

ограниченного на множество $\mathcal{U}_{a,b}$.

Теорема 5.4. *Потенциал $u(z, \bar{z}) \in \mathcal{U}_{a,b}$ с гладкой ферми-кривой $\mathcal{C}_u \in \mathcal{S}^{g_0, n}$ является критической точкой функционала (5.32), ограниченного на $\mathcal{U}_{a,b}$ тогда и только тогда, когда на фактор-кривой $\mathcal{C}_{u,0} = \mathcal{C}_u/\sigma$ существует мероморфная функция E с простыми полюсами в точках $q_j \in \mathcal{C}_{u,0}$, $j = 1, \dots, m$.*

Доказательство. Начнем с доказательства того, что функционал (5.32) совпадает с первой координатой A_0 на $\mathcal{S}^{g_0, n}$, определенной (5.20). Точнее,

$$\langle u \rangle = A_0 = \text{Res}_{P_+} \alpha d\beta. \quad (5.33)$$

Из (5.17) непосредственно следуют выражения для первых коэффициентов разложения дифференциалов $d\alpha$ и $d\beta$ в точке P_+ ,

$$\begin{aligned} d\alpha &= dk_+ \left(1 + \sum_{s=1}^{\infty} \alpha_s k_+^{-s-1} \right), \\ d\beta &= dk_+ \left(\tau + \sum_{s=1}^{\infty} \beta_s k_+^{-s-1} \right), \end{aligned} \quad (5.34)$$

в терминах первых коэффициентов разложения (4.11) функции Бейкера – Ахиезера

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \xi_1(z, \bar{z}) - \xi_1(z+1, \bar{z}+1), \\ \beta_1 &= \xi_1(z, \bar{z}) - \xi_1(z+\tau, \bar{z}+\bar{\tau}). \end{aligned} \quad (5.35)$$

По определению, коэффициенты α_1, β_1 не зависят от (z, \bar{z}) . Тогда из (5.35) следует равенство

$$\begin{aligned} A_0 = \tau\alpha_1 - \beta_1 &= \oint_{\partial\Sigma} \xi_1 dz = \\ &= \int_{\Sigma} \partial_{\bar{z}} \xi_1 dz \wedge d\bar{z}, \end{aligned} \quad (5.36)$$

из которого, в силу (4.30), следует (5.33).

Рассмотрим теперь дифференциал $\delta\alpha d\beta$. Поскольку периоды $d\alpha$ постоянны, этот дифференциал является однозначным четным мероморфным дифференциалом на ферми-кривой с не более чем простыми полюсами в отмеченных точках P_{\pm} . Из (5.20) следует, что он имеет вид

$$\delta\alpha d\beta = \delta A_0 \pi^*(d\Omega_{\pm}) + \sum_{i=1}^{g_0} \delta A_i \pi^*(dw_i), \quad (5.37)$$

где dw_i – нормированные голоморфные дифференциалы на $\mathcal{C}_u^{(0)} = \mathcal{C}_u/\sigma$, Ω_{\pm} – нормированный дифференциал третьего рода с простыми полюсами и вычетами ± 1 в отмеченных точках, а $\pi: \mathcal{C}_u \rightarrow \mathcal{C}_u^{(0)}$ проекция.

Предположим, что $u(z, \bar{z})$ является критической точкой функционала (5.32). Тогда из (5.33) и (5.37) следует, что $\delta\alpha d\beta$ является голоморфным дифференциалом на \mathcal{C}_u . Он равен нулю в точках q_j для всех вариаций касательных к многообразию спектральных кривых $\mathcal{S}_{a,b}^{g_0, n}$ потенциалов $u \in \mathcal{U}_{ab}^{g_0, n}$, так как при таких вариациях (a_j, b_j) остаются постоянными. Отсюда следует, что размерность пространства голоморфных дифференциалов на \mathcal{C}_u , равных нулю в m точках q_j , равна размерности $\mathcal{S}_{a,b}^{g_0, n}$, т.е. равна $g_0 + 1 - m$. Тогда из теоремы Римана – Роха следует, что размерность пространства функций, имеющих не более чем простые полюсы в точках q_j , равна

$$m + (g_0 + 1 - m) - g_0 + 1 = 2.$$

Это пространство всегда содержит константы. Следовательно, на C_u существует непостоянная функция E с полюсами в точках q^j . \square

5.4. Суперпотенциал и черты геометрии Зайберга – Виттена

Переформулируем доказанное выше утверждение в форме, аналогичной (1.9). Множества $S_I^{g_0, n}$ аналогичны компонентам \mathcal{U}_ρ в квантово-механическом случае. Функционал

$$\langle u \rangle = A_0 = \text{Res}_{P_+} \alpha d\beta$$

является аналогом суперпотенциала \mathcal{W} . Более того, деформируя контур вокруг P_+ таким образом, что он обходит разрезы и сингулярности $\alpha d\beta$, его можно сделать еще более похожим на (1.9).

5.5. Обсуждение: от $O(3)$ -модели к приводимым спектральным кривым

Приведенное выше построение дает решения подкрученной $O(N)$ -сигма-модели с $N = n + 2m$, где m — число полюсов мероморфной функции E на Γ_0 . По предположению, E не является постоянной, т. е. $m \geq 1$. При фиксированных $m > 1$ и n решения индексируются родом g_0 фактор-кривой и точкой I множества связных компонент соответствующих спектральных кривых (5.19). При этом мы получаем все решения для случая четных N и некоторые классы решений для нечетных N .

Случай $N = 3$ выделен. Для него имеется только одна возможность: $n = 1$ и $m = 1$. Равенство $m = 1$ означает что фактор-кривая является рациональной, т. е. $\Gamma_0 = \mathbb{C}P^1$, а значит, g_0 в этом случае принимает только одно значение, $g_0 = 0$. Поскольку $n = 1$, кривая Γ является двулистным накрытием Γ_0 с четырьмя точками ветвления. Значит, Γ является эллиптической кривой. Следовательно, соответствующие решения одномерны: они зависят только от линейной комбинации $Uz + \bar{U}\bar{z}$, где U, \bar{U} — константы.

Это наблюдение привело авторов к необходимости дальнейших обобщений конструкции Новикова – Веселова на случай приводимых спектральных кривых. Как показано в работе [7], такое обобщение позволяет построить для любого нечетного N аналоги инстантонных решений $O(3)$ -модели, для которых компоненты $T_{zz}, T_{\bar{z}\bar{z}}$ тензора энергии-импульса равны нулю. Точнее, в работе [7] доказывається, что построенные по приводимым спектральным кривым потенциалы оператора Шредингера удовлетворяют

условиям самосогласования для $O(2m + n)$ -модели с нечетным n и любым m . Более того, показано, что для соответствующих потенциалов задача выделения периодических решений эффективно решается в терминах спектральных кривых эллиптической системы Калоджеро – Мозера.

5.6. Ферми-кривые в $\mathbb{C}P^{N-1}$ -модели

Понятие комплексной ферми-кривой для периодического двумерного оператора Шредингера в магнитном поле (см. [11]) может быть введено аналогично потенциальному случаю, если поток магнитного поля нулевой, т. е. в случае тривального главного $U(1)$ -расслоения P или \mathbb{C}^\times -расслоения $P_{\mathbb{C}}$.

Пусть Γ — гладкая алгебраическая кривая рода g с фиксированными локальными координатами k_{\pm}^{-1} двух отмеченных точек P_{\pm} . Тогда для каждого неспециального эффективного дивизора $D = \gamma_1 + \dots + \gamma_g$ на Γ существует единственная функция Бейкера – Ахиезера $\psi(z, \bar{z}, p)$, такая что:

- (i) как функция $p \in \Gamma$ она мероморфна на Γ вне отмеченных точек P_{\pm} с дивизором полюсов D ;
- (ii) в окрестностях отмеченных точек она имеет вид (4.11), т. е.

$$\psi = \exp\left(\frac{1}{2}k_{\pm}(z + \bar{z} \pm z \mp \bar{z})\right) \times \left(\sum_{s=0}^{\infty} \xi_s^{\pm}(z, \bar{z})k_{\pm}^{-s}\right),$$

$$k_{\pm} = k_{\pm}(p);$$

- (iii) она нормирована условием

$$\xi_0^+(z, \bar{z}) = 1. \tag{5.38}$$

Теорема 5.5. (см. [11]) *Определенная выше функция Бейкера – Ахиезера удовлетворяет уравнению*

$$(-\partial_z \partial_{\bar{z}} + A_z(z, \bar{z})\partial_{\bar{z}} + U(z, \bar{z}))\psi(z, \bar{z}, p) = 0, \tag{5.39}$$

где

$$\begin{aligned} A_z &= \partial_z \ln \xi_0^-, \\ U &= \partial_{\bar{z}} \xi_1^+. \end{aligned} \tag{5.40}$$

Замечание 5.6. Нормировка (5.38) функции Бейкера – Ахиезера соответствует выбору калибровки, при которой $A_{\bar{z}} = 0$.

5.6.1. Двойственная функция Бейкера – Ахиезера

Для эффективного неспециального дивизора D степени g определим двойственный дивизор \check{D} с помощью уравнения

$$D + \check{D} = \mathcal{K} + P_+ + P_-, \tag{5.41}$$

где \mathcal{K} — канонический класс. Другими словами, для неспециального дивизора D степени g существует единственный мероморфный дифференциал $d\Omega$ с простыми полюсами в точках P_{\pm} , вычеты в которых равны ∓ 1 , такой что $d\Omega(\gamma_s) = 0$. Общее число нулей $d\Omega$ равно $2g$. Точки γ_s^+ — это дополнительные нули $d\Omega$.

По определению, двойственная функция Бейкера – Ахиезера — это единственная функция $\psi^\sigma(z, \bar{z}, p)$, такая что:

(i) как функция $p \in \Gamma$ она мероморфна на Γ вне отмеченных точек P_{\pm} с дивизором полюсов \check{D} ;

(ii) в окрестностях отмеченных точек она имеет вид

$$\psi^\sigma = \exp\left(-\frac{1}{2}k_{\pm}(z + \bar{z} \pm z \mp \bar{z})\right) \times \left(\sum_{s=0}^{\infty} \check{\xi}_s^{\pm}(z, \bar{z})k_{\pm}^{-s}\right), \quad k_{\pm} = k_{\pm}(p); \tag{5.42}$$

(iii) она нормирована условием

$$\check{\xi}_0^+(z, \bar{z}) = 1. \tag{5.43}$$

Аргументы, аналогичные использованным в работе [11], доказывают, что двойственная функция Бейкера – Ахиезера удовлетворяет уравнению

$$(-\partial_z \partial_{\bar{z}} + \check{A}_z(z, \bar{z})\partial_{\bar{z}} + \check{U}(z, \bar{z})) \psi^\sigma(z, \bar{z}, p) = 0, \tag{5.44}$$

где

$$\begin{aligned} \check{A}_z &= \partial_z \ln \check{\xi}_0^-, \\ \check{U} &= -\partial_{\bar{z}} \check{\xi}_1^+. \end{aligned} \tag{5.45}$$

Из определения двойственной функции Бейкера – Ахиезера следует, что дифференциал $\psi \check{\psi} d\Omega$ мероморфен на Γ с простыми полюсами в точках P_{\pm} и с вычетами

$$\text{Res}_{P_+} \psi \check{\psi} d\Omega = -1, \quad \text{Res}_{P_-} \psi \check{\psi} d\Omega = \check{\xi}_0^- \check{\xi}_0^-. \tag{5.46}$$

Из того, что сумма вычетов мероморфного дифференциала равна нулю, следует

$$\check{\xi}_0^- = (\check{\xi}_0^-)^{-1}. \tag{5.47}$$

Аналогично доказываются равенства

$$\begin{aligned} (\xi_1^+ + \check{\xi}_1^+) &= -\text{Res}_{P_+} (\partial_z \psi) \psi^\sigma d\Omega = \\ &= \text{Res}_{P_-} (\partial_z \psi) \psi^\sigma d\Omega = \\ &= (\partial_z \check{\xi}_0^-) \check{\xi}_0^-. \end{aligned} \tag{5.48}$$

Следствием уравнений (5.44), (5.47) и (5.48) является то, что двойственная функция Бейкера – Ахиезера является решением формально сопряженного уравнения

$$\begin{aligned} (-\partial_z \partial_{\bar{z}} - A_z(z, \bar{z})\partial_{\bar{z}} + U(z, \bar{z})\partial_z A_z(z, \bar{z})) \times \\ \times \check{\psi}(z, \bar{z}, p) = 0. \end{aligned} \tag{5.49}$$

5.6.2. Условия самосогласования для $\mathbb{C}\mathbb{P}^{N-1}$ -модели

Пусть $E(p)$ — мероморфная функция на Γ с простыми полюсами в точках $q_i, i = 1, \dots, N$. Тогда $\psi \psi^\sigma E d\Omega$ является мероморфным дифференциалом на Γ с полюсами в точках P_{\pm} и q_i . Сумма его вычетов равна нулю. Отсюда следует равенство

$$1 = \sum_{i=1}^N r_i^2 \psi_i \psi_i^\sigma, \tag{5.50}$$

в котором

$$\begin{aligned} \psi_i &= \psi(z, \bar{z}, q_i), \\ \psi_i^\sigma &= \psi^\sigma(z, \bar{z}, q_i) \end{aligned} \tag{5.51}$$

и

$$\begin{aligned} r_i^2 &= \frac{1}{E_+ - E_-} \text{Res}_{q_i} E d\Omega, \\ E_{\pm} &= E(P_{\pm}). \end{aligned} \tag{5.52}$$

Дополнительно предположим, что дифференциал dE равен нулю в точках P_{\pm} , т.е. в окрестностях отмеченных точек:

$$dE(P_{\pm}) = 0 \Rightarrow E = E_{\pm} + O(k_{\pm}^2). \tag{5.53}$$

Тогда дифференциал $(\partial_z \psi) \psi^\sigma E d\Omega$ голоморфен в точке P_+ , а его вычет в точке P_- равен

$$\begin{aligned} \text{Res}_{P_-} (E - E_+) (\partial_z \psi) \psi^\sigma d\Omega = \\ = (E_- - E_+) A_z(z, \bar{z}). \end{aligned} \tag{5.54}$$

Следовательно,

$$\sum_i r_i^2 (\partial_z \psi_i) \psi_i^\sigma = A_z. \tag{5.55}$$

Аналогично, из равенства

$$\text{Res}_{P_{\pm}} (E - E_-) \psi \partial_{\bar{z}} \psi^+ d\Omega = 0 \tag{5.56}$$

следует, что

$$0 = \sum_i r_i^2 \psi_i (\partial_{\bar{z}} \psi_i^\sigma) = -\sum_i r_i^2 (\partial_{\bar{z}} \psi_i) \psi_i^\sigma. \tag{5.57}$$

5.6.3. Условия вещественности

Предположим, что кривая Γ является вещественной, т. е. на ней имеется антиголоморфная инволюция $\tau : \Gamma \rightarrow \Gamma$. Предположим, что эта антиинволюция переставляет отмеченные точки, $\tau(P_{\pm}) = P_{\mp}$, и что локальные координаты в окрестностях этих точек сопряжены относительно τ , т. е.

$$k_{\pm}(\tau(p)) = -\bar{k}_{\mp}(p).$$

Если дивизор D вещественен, $\tau(D) = D$, то из единственности функции Бейкера – Ахиезера следует равенство

$$\psi^{\sigma}(p) = (\bar{\xi}_0^-)^{-1} \bar{\psi}(\tau(p)). \tag{5.58}$$

Из уравнений (5.58) и (5.47) следует

$$\xi_0^- = \overline{\xi_0^-}. \tag{5.59}$$

Дифференциал $d\Omega$ удовлетворяет уравнению

$$d\Omega(\tau(p)) = -\overline{d\Omega}(\tau(p)). \tag{5.60}$$

Предположим, что точки q_i инвариантны относительно τ , т. е. $q_i = \tau(q_i)$. Тогда без ограничения общности можно считать, что выполнено равенство

$$E(p) = -\bar{E}(\tau(p)). \tag{5.61}$$

Тогда константы r_i^2 в (5.50) являются вещественными, $r_i^2 = \bar{r}_i^2$. При этом данные можно выбрать так, чтобы выполнялось

$$c^2 := (\xi_0^-)^2 > 0, \quad r_i^2 > 0.$$

После этого мы получим, что функции

$$n_i = c^{-1} r_i \psi_i \tag{5.62}$$

удовлетворяют уравнению

$$(-\partial_z \partial_{\bar{z}} - (\partial_{\bar{z}} \log c) \partial_z + (\partial_z \log c) \partial_{\bar{z}} + V) \times n_i = 0 \tag{5.63}$$

и условиям самосогласования

$$\sum_{i=1}^N n_i \bar{n}_i = 1, \tag{5.64}$$

а также (ср. (2.31))

$$A_z = - \sum_{i=1}^N \bar{n}_i (\partial_z n_i) = -\partial_z \log c, \tag{5.65}$$

$$A_{\bar{z}} = - \sum_{i=1}^N n_i (\partial_{\bar{z}} n_i) = \partial_{\bar{z}} \log c, \tag{5.66}$$

т. е. являются решением $\mathbb{C}\mathbb{P}^{N-1}$ -модели, если выполнены условия периодичности. В уравнении (5.63) V отличается от потенциала U , определенного выше, сдвигом на $A_z A_{\bar{z}}$.

Замечание 5.7. Явная тэта-функциональная формула для ψ тождественна (4.24) после замены тэта-функции Прима на тэта-функцию Римана, отвечающую матрице \mathbf{T} b -периодов нормированных голоморфных дифференциалов на Γ .

Условия периодичности для Γ даются теми же уравнениями (5.13).

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ И НАПРАВЛЕНИЕ БУДУЩИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

В настоящей работе мы построили широкий класс решений $O(N)$ -модели для четных N и для $\mathbb{C}\mathbb{P}^{N-1}$ -модели с общими твистованными граничными условиями на Σ с произвольной метрикой. Каждая критическая точка порождает полубесконечную клетку в комплексифицированном пространстве $\mathcal{F}^{\mathbb{C}}$ конфигурационных полей модели, так называемый наперсток Лефшеца. Последний зависит от неголоморфной части данных, таких как выбор эрмитовой метрики на $\mathcal{F}^{\mathbb{C}}$.

Основным инструментом нашего построения является аналитическая комплексная ферми-кривая \mathcal{C}_u , которая параметризует блоховские решения двумерного оператора Шредингера $-\Delta + u$. Линейные поля сигма-модели принадлежат ядру этого оператора, в то время как твисты модели определяют набор точек M_1, \dots, M_N в пространстве модулей \mathcal{M} плоских \mathbb{C}^{\times} -связностей на Σ . Данные монодромии (аналог отображения Римана – Гильберта) отображают ферми-кривую в \mathcal{M} так, что ее образ проходит через точки M_j .

Мы показали, что дважды периодические решения уравнений сигма-модели соответствуют линейному отображению Σ в многообразии Прима ферми-кривой \mathcal{C}_u . Это является прямым аналогом результата, полученного в работе [1] для квантово-

механической модели, кратко описанного во Введении.

Мы также нашли, что симплектическая геометрия \mathcal{M} любопытным образом отражается в структуре пространства решений. Как и в квантово-механическом случае (1.9), решения отвечают критическим точкам суперпотенциала, который в двумерном случае может быть выражен в терминах периодов дифференциала $\alpha d\beta$ типа Зайберга – Виттена, индуцированного симплектической формой Атьи – Ботта $d\alpha \wedge d\beta$ на \mathcal{M} .

Явная связь ферми-кривых с кривыми Зайберга – Виттена остается загадкой. Следует подчеркнуть, что для некоторых сигма-моделей решения могут быть построены с помощью аналитических кривых разными способами: с использованием твисторных кривых, возникающих из представлений нулевой кривизны [15–17], с использованием спектральных кривых Хитчина [18] и, наконец, с помощью ферми-кривых. Взаимосвязи этих кривых представляют собой такую же загадку, как и в привычной ситуации монополей: при изучении последних в $\mathbb{R}^2 \times S^1$ возникают два типа кривых: кривая, кодирующая данные рассеяния [19], и спектральная кривая, которая в действительности является кривой Зайберга – Виттена для квивера $\mathcal{N} = 2$ калибровочной четырехмерной теории [20]. Несмотря на некоторый прогресс в попытках найти связи между этими кривыми [21], общая картина остается неясной.

Планируемое авторами продолжение работы содержит несколько естественных направлений. Во-первых, это обобщение конструкции на случай $O(N)$ -модели с нечетным N , в котором ферми-кривая является (сингулярной) приводимой [7]. Как оказалось, в этом случае трансцендентные уравнения периодичности (5.13) допускают явное решение в терминах спектральных кривых эллиптической системы Калоджеро – Мозера, которая тесно связана с теорией Зайберга – Виттена [20, 22], с теорией солитонов [23, 24], с теорией системы Хитчина и калибровочными теориями [2, 25].

Как ожидается, наперстки Лефшеца должны стать инструментом для вычисления функционального интеграла. Первым шагом в этом направлении должен стать анализ определителя оператора второй вариации действия. Для случая $O(N)$ -модели это сводится к исследованию детерминанта оператора Шредингера $-\Delta + U$. Комплекснозначность потенциала означает, что и спектр оператора комплексен, что приводит к сложностям анализа направлений градиентного потока, траектории которого

порождают наперсток, выходящий из критической точки.

Представляется естественной модификация классического действия (2.14), учитывающая вклады петель, т.е. однопетлевое эффективное действие. Критические точки эффективного действия могут быть представлены в форме условий самосогласования потенциала оператора Шредингера, включающие в себя решения не только из ядра оператора, но и те, которые связаны со всем спектром оператора. Привычный $1/N$ -анализ $O(N)$ - и $\mathbb{C}\mathbb{P}^{N-1}$ -моделей в бесконечном объеме [26, 27] предсказывает нарушение конформной инвариантности, возникновение массовой щели, восстановление глобальной симметрии. Было бы интересно проверить эти предсказания с помощью более тщательного анализа функционального интеграла. В частности, ответить на вопрос, является ли массовая щель универсальной или зависит от выбора наперстка или линейной комбинации наперстков? Нетривиальность этой проблемы видна в анализе, проделанном в работах [28–30], хотя и с другой геометрией мирового листа Σ .

Как уже было сказано выше, алгебро-геометрические потенциалы U , являясь нелинейным обобщением тригонометрических полиномов, плотны в пространстве всех периодических потенциалов. Однако имеющиеся у авторов аргументы указывают на то, что построения настоящей работы и их обобщения в работе [7] дают *все* решения задачи. Мы надеемся, что их представление в виде критических точек суперпотенциала \mathcal{W} откроет возможность вычисления интегралов по наперсткам Лефшеца. В квантово-механическом случае намотки вдоль 1-циклов в абелевом многообразии, являющемся комплексным тором Лиувилля, могут быть качественно представлены как газ инстантонов и антиинстантонов (представляющих намотки вдоль B), одетых пертурбативными осцилляциями (намотками вдоль A циклов). Справедливость этого приближения контролируется малостью параметра $e^{-\beta\omega_0}$, где ω_0 — частота классических осцилляций вблизи минимума потенциала, а $\beta \rightarrow \infty$ — мнимое время. В случае сигма-модели имеется бесконечное число частот ω_0 , которые, в силу конформной инвариантности классической теории, стремятся к нулю. Это и есть проблема роста инстантонов, разрушающая (см. [31, 32]) приближение инстантонного газа в сигма-моделях и четырехмерных калибровочных теориях [33]. Существует ли феноменологическая картина наших решений?

ПРИЛОЖЕНИЕ

Обобщенные системы Неймана

Решения уравнений (2.36) с четным N могут быть построены, если заметить, что функция вспомогательной переменной z (имеющей смысл $U(1)$ -тока)

$$\mathcal{J}(z) = \frac{1}{2} \left(\dot{f}^\sigma \frac{1}{z + \theta} f - f^\sigma \frac{1}{z + \theta} \dot{f} \right) + i\tau_1 f^\sigma \frac{\theta}{z + \theta} f \quad (\text{A.1})$$

сохраняется для всех z :

$$\dot{\mathcal{J}}(z) = 0.$$

Введем

$$\begin{aligned} \tilde{A}(w) &= \dot{f}^\sigma \frac{1}{w - \theta^2} f, \\ \tilde{B}(w) &= -f^\sigma \frac{1}{w - \theta^2} \dot{f}, \\ \tilde{C}(w) &= \dot{f}^\sigma \frac{1}{w - \theta^2} \dot{f}, \\ \tilde{D}(w) &= -f^\sigma \frac{1}{w - \theta^2} \dot{f}, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

где $w = z^2$. Ключевым является утверждение, что спектральная кривая оператора Лакса

$$L(w) = \begin{pmatrix} A(w) & B(w) \\ C(w) & D(w) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.3})$$

где

$$\begin{aligned} A &= \tilde{A} + i\tau_1 \tilde{B}_+, \\ D &= \tilde{D} + i\tau_1 \tilde{B}_+, \\ C &= \tilde{C} + 2i\tau_1 \mathcal{J}_+ + \tau \bar{\tau}, \\ B &= \tilde{B}, \\ \tilde{B}_+ &= f^\sigma \frac{\theta}{w - \theta^2} f, \\ \mathcal{J}_+(w) &= \frac{\mathcal{J}(z) + \mathcal{J}(-z)}{2}, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

также является интегралом движения:

$$\frac{\partial}{\partial y} \text{Det}(k - L(w)) = 0. \quad (\text{A.5})$$

ЛИТЕРАТУРА

1. N. Nekrasov, *Tying up Instantons with Anti-Instantons*, doi:10.1142/9789813233867_0018; arXiv:1802.04202 [hep-th].
2. N. Nekrasov, *Commun. Math. Phys.* **180**, 587 (1996); doi:10.1007/BF02099624; arXiv:[hep-th/9503157].
3. A. Hanany and K. Hori, *Nucl. Phys. B* **513**, 119 (1998); doi:10.1016/S0550-3213(97)00754-2; arXiv:hep-th/9707192 [hep-th].
4. L. Dixon, J. Harvey, C. Vafa, and E. Witten, *Nucl. Phys. B* **261**, 678 (1985); *Nucl. Phys. B* **274**, 285 (1986).
5. C. Neumann, *De Problemate Quodam Mechanica, Quod ad Primam Integralium Ultraellipticorum Classem Revocatur*, *Journal für die reine und angewandte Mathematik* **56** (1859).
6. D. Mumford, *Tata Lectures on Theta*, Birkhauser, Boston–Basel–Berlin (1983).
7. I. Krichever and N. Nekrasov, *Towards Lefschets thimbles in sigma models, II*, to appear.
8. I. Krichever, *Funct. Anal. Appl.* **20**, 42 (1986).
9. I. Krichever, *Funct. Anal. Appl.* **28**, 21 (1994).
10. I. Krichever, *Uspekhi Mat. Nauk* **44**, 121 (1989).
11. B. A. Dubrovin, I. M. Krichever, and S. P. Novikov, *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **229**, 15 (1976).
12. A. P. Veselov and S. P. Novikov, *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, **279**, 20 (1984).
13. A. P. Veselov and S. P. Novikov, *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, **279**, 784 (1984).
14. A. Il'ina, I. Krichever, and N. Nekrasov, *Funct. Anal. Appl.* **53**, 23 (2019); arXiv:1903.01778v2 [math-ph].
15. V. Mikhailov and V. Zakharov, *JETP* **74**, 1953 (1978).
16. N. Hitchin, *J. Diff. Geom.* **31**, 672 (1990).
17. K. Pohlmeyer, *Comm. Math. Phys.* **46**, 207 (1976).
18. N. Hitchin, *Duke Math. J.* **54**, 91 (1987).
19. N. Hitchin, *Comm. Math. Phys.* **83**, 579 (1982).
20. N. Nekrasov and V. Pestun, *Seiberg-Witten Geometry of Four Dimensional $\mathcal{N} = 2$ Quiver Gauge Theories*, arXiv:1211.2240 [hep-th].
21. S. A. Cherkis, *SIGMA* **3**, 043 (2007); doi:10.3842/SIGMA.2007.043; arXiv:hep-th/0703108 [hep-th].

22. E. D'Hoker and D. Phong, Nucl. Phys. B **513**, 405 (1998).
23. I. Krichever, Funct. Anal. Appl. **14**, 45 (1980).
24. A. Treibich, Duke Math. J. **59**, 611 (1989); J. L. Verdier, *New Elliptic Solitons*, in Algebraic Analysis 2, Special Volume Dedicated to Prof. M. Sato on his 60th birthday, Academic Press, New York (1988).
25. A. Gorsky and N. Nekrasov, *Elliptic Calogero-Moser System from Two Dimensional Current Algebra*, arXiv:hep-th/9401021.
26. A. D'Adda, M. Luscher, and P. Di Vecchia, Nucl. Phys. B **146**, 63 (1978); doi:10.1016/0550-3213(78)90432-7.
27. E. Witten, Nucl. Phys. B **149**, 285 (1979); doi:10.1016/0550-3213(79)90243-8.
28. A. Milekhin, Phys. Rev. D **95**, 085021 (2017); doi:10.1103/PhysRevD.95.085021; arXiv:1612.02075 [hep-th].
29. A. Gorsky, A. Pikalov, and A. Vainshtein, arXiv:1811.05449.
30. S. Bolognesi, S. B. Gudnason, K. Konishi, and K. Ohashi, JHEP **12**, 044 (2019); doi:10.1007/JHEP12(2019)044; arXiv:1905.10555 [hep-th].
31. A. Belavin and A. Polyakov, JETP Lett. **22**, 245 (1975).
32. A. M. Polyakov, Contemp. Concepts Phys. **3**, 1 (1987).
33. S. R. Coleman, Subnucl. Ser. **15**, 805 (1979).

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

Редакция ЖЭТФ принимает статьи как на русском, так и на английском языках. С 1 сентября 2016 г. по требованию МАИК статьи, поступившие в редакцию на английском языке, будут переводиться на русский язык для русскоязычной версии журнала.

Редакция рекомендует направлять статьи в электронном виде по электронной почте или загружать их в режиме «on-line» через сайт журнала <http://jetp.ac.ru/>

Издательство требует от авторов при публикации статьи заключения договора о передаче авторских прав. Заполненные и подписанные договоры (форма договоров отправляется авторам **ВМЕСТЕ С КОРРЕКТУРОЙ**) могут быть представлены лично или по электронной почте в отсканированном виде (PDF файлы).

По всем вопросам можно обращаться в редакцию.

Адрес: 117334, Москва, ул. Косыгина, д. 2, Редакция ЖЭТФ

E-mail: jetp@kapitza.ras.ru Телефон: +7 (499) 137 56 22

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

Редакция ЖЭТФ просит авторов при направлении статей в печать руководствоваться приведенными ниже правилами.

1. В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

2. Статьи должны быть изложены с предельной краткостью, совместимой с ясностью изложения, и окончательно обработаны. Следует избегать повторения данных таблиц или графиков в тексте статьи, а также представления численных результатов в виде таблиц и графиков одновременно. Не следует злоупотреблять введением новых аббревиатур в дополнение к общепринятым, таким как ЯМР, УФ и т. д.

3. К статье необходимо прилагать короткую аннотацию, в которой должны быть четко сформулированы цель и результаты работ (аннотация и раздел «Выводы» не должны дублировать друг друга).

4. Редакция принимает статьи:

а) по электронной почте по адресу JETP@kapitza.ras.ru;

б) в «on-line» режиме на веб-странице журнала (www.jetp.ac.ru);

в) по почте или непосредственно в редакции (статья должна быть представлена в двух экземплярах, электронный вариант также необходим).

В электронном варианте текст должен быть представлен в формате \LaTeX или Word, рисунки — в формате PostScript (*.ps) или EncapsulatedPostScript (*.eps), каждый рисунок отдельным файлом (желательно также представить рисунки в том формате, в котором они готовились). В том случае, если статья посылается по электронной почте, текст должен быть представлен дополнительно в формате ps или pdf.

5. Статьи должны быть напечатаны шрифтом 12 пунктов в одну колонку через полтора интервала, на одной стороне листа, с полями с левой стороны

листа не уже 4 см; рукописные вставки не допускаются. В обозначениях и индексах (в тексте и на рисунках) не должно быть русских букв. Например, следует писать P_{opt} , а не $P_{\text{опт}}$. Все сколько-нибудь громоздкие формулы должны выноситься на отдельные строки. Векторные величины должны быть выделены прямым полужирным шрифтом.

Все страницы рукописи должны быть пронумерованы. Таблицы, аннотация, литература, подписи к рисункам должны быть напечатаны на отдельных страницах.

6. Подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье. Цитируемая литература должна даваться не в виде подстрочных примечаний, а общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой в прямых скобках (например, [1]). Литература дается в порядке упоминания в статье. Указываются инициалы и фамилии авторов (всех авторов, если число авторов меньше четырех, и троих и др., если число авторов больше четырех). Порядок оформления литературы виден из следующих примеров:

1. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1984), с. 1.
2. А. М. Сергеев, Р. И. Чернова, А. Я. Сергиенко, *ФТТ* **30**, 835 (1988).
3. R. Brewer, J. M. Faber, C. N. Malleson et al., *Phys. Rev. A* **18**, 1632 (1978).
4. A. N. Stirling and D. Watson, in *Progress in Low Temperature Physics*, ed. by D. F. Brewer, North Holland, Amsterdam (1986), Vol. 10, p. 683.
5. К. Д. Громов, М. Э. Ландсберг, в сб. *Тез. докл. X Всесоюзн. конф. по физике низких температур* (Ташкент, 1986), Наука, Москва (1987), с. 434.
6. M. P. Elliot, V. Rumford, and A. A. Smith, Preprint TH 4302-CERN (1988).

7. Л. Н. Шалимова, А. С. Крюков, Препринт ОИЯИ № Р-16-22 (1987).
 8. Н. В. Васильев, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук, МГУ, Москва (1985).
 9. A. Fang and C. Howald, E-print archives, 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*