

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД

МОСКВА

ТОМ 161, ВЫПУСК 2

ФЕВРАЛЬ 2022

РАН

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

АТОМЫ, МОЛЕКУЛЫ, ОПТИКА

- Генерация высших гармоник в треугольных квантовых графеновых точках
..... Авчян Б. Р., Казарян А. Г., Саргсян К. А., Седракян Х. В. 155
- Q-распределение для одноатомного лазера, работающего в «классическом» режиме
..... Ларионов Н. В. 166

ЯДРА, ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ, ГРАВИТАЦИЯ И АСТРОФИЗИКА

- Выход γ -квантов от реакций ядерного синтеза в мюонных молекулах $pt\mu$ и $pd\mu$... Адамчак А.,
Баранов В. А., Богданова Л. Н., Вольных В. П., Вихлянцев О. П., Герштейн С. С.,
Грицай К. И., Демин Д. Л., Дугинов В. Н., Конин А. Д., Максимкин И. П., Му-
сяев Р. К., Руденко А. И., Файфман М. П., Фильчагин С. В., Юхимчук А. А. 177
- Differentiable programming for particle physics simulations Grinis R. 184
- Сингулярные функции спинорного поля в КЭД с сильным внешним полем
..... Бреев А. И., Гаврилов С. П., Гитман Д. М. 189

ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ЖИДКОСТИ

- Оптомеханическая лазерная генерация и доменные стенки, обусловленные экситон-фононным вза-
имодействием Юлин А. В., Пошакинский А. В., Поддубный А. Н. 206

© Российская академия наук, 2022

© Редколлегия журнала ЖЭТФ (составитель), 2022

Молекулярно-динамическое исследование зависимости температуры плавления наночастиц Ti, Ti ₃ Al, TiAl и TiAl ₃ от их диаметра в вакууме и в жидком алюминии	221
..... Полетаев Г. М., Ситников А. А., Яковлев В. И., Филимонов В. Ю.	
Исследование процесса интеркаляции кобальта под буферный слой углерода на монокристалле SiC (0001)	227
..... Фильнов С. О., Рыбкина А. А., Тарасов А. В., Ерыженков А. В., Елисеев И. А., Давыдов В. Ю., Шикин А. М., Рыбкин А. Г.	

ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

Новый класс фазовых переходов в водороде и дейтерии при наличии химических реакций ионизации и диссоциации	238
..... Хомкин А. Л., Шумихин А. С.	
Спин-волновые возбуждения в гетероструктурах NiFe/Cu/IrMn с варьируемой толщиной разделительного слоя Cu	245
..... Бахметьев М. В., Губанов В. А., Садовников А. В., Моргунов Р. Б.	

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Усреднение термоэлектрических сред: непрерывность термоэлектрического потенциала	253
..... Старков А. С., Старков И. А.	
Активационный прыжковый транспорт в нематических проводящих аэрогелях	266
..... Цебро В. И., Николаев Е. Г., Луганский Л. Б., Кутузов М. И., Хмельницкий Р. А., Тонких А. А., Харьковский А. И.	

СТАТИСТИЧЕСКАЯ И НЕЛИНЕЙНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА «МЯГКОЙ» МАТЕРИИ

Проблема повышения рабочей частоты в черенковских плазменных источниках электромагнитного излучения	281
..... Карташов И. Н., Кузелев М. В.	
К теории омических потерь в LC-системах	296
..... Балагуров Б. Я.	

ГЕНЕРАЦИЯ ВЫСШИХ ГАРМОНИК В ТРЕУГОЛЬНЫХ КВАНТОВЫХ ГРАФЕНОВЫХ ТОЧКАХ

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

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

Поступила в редакцию 26 августа 2021 г.,
после переработки 9 октября 2021 г.
Принята к публикации 11 октября 2021 г.

Генерация высших гармоник в плоских квантовых графеновых точках, инициированная интенсивным когерентным излучением, исследована с помощью динамической теории усредненного поля Хартри–Фока. Развита микроскопическая теория, описывающая экстремальный нелинейно-оптический отклик плоских квантовых графеновых точек. Численно решена замкнутая система дифференциальных уравнений для одночастичной матрицы плотности при многофотонном взаимодействии графеновых квантовых точек и сильного лазерного поля. Полученные решения указывают на важность типа ребер и поперечного размера, а также значимость ширины запрещенной зоны и величины лазерного поля в процессе генерации высших гармоник в треугольной квантовой графеновой точке.

DOI: 10.31857/S0044451022020018

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее десятилетие растет интерес к распространению генерации высших гармоник (ГВГ) на двумерные кристаллы и наноструктуры, такие как полуметаллический графен [1] и полупроводниковые дихалькогениды переходных металлов [2]. Роль графена как эффективного нелинейно-оптического материала обсуждалась во многих теоретических [3–22], а также экспериментальных [23, 24] исследованиях, которые рассматривают различные экстремальные нелинейные оптические эффекты, в частности ГВГ, происходящие в сильных когерентных полях излучения в многофотонном режиме при возбуждении таких наноструктур [25, 26]. С другой стороны, помимо замечательных и уникальных электронных и оптических свойств графена, отсутствие запрещенной зоны, как у всех полуметаллов, сильно ограничивает его применимость, в отличие, например, от двухслойного графена [27–32].

Проблема нулевой энергетической щели была решена путем уменьшения поперечного размера графена [33]. В результате размерного квантования открывается энергетическая щель. Полуметалличе-

ский графен конечных размеров становится полупроводником. Среди углеродных наноструктур особый интерес как нелинейная среда представляют графеновые ленты (наноленты) [33, 34], графеноподобные квантовые точки, такие как замкнуто-выпуклые фуллерены различной базовой симметрии [21, 22] и графеновые квантовые точки (ГКТ) различного латерального размера. Графеновую наноструктуру можно охарактеризовать по тому, сохраняется ли симметрия подрешетки. ГКТ имеет энергетическую щель, которой можно управлять с помощью ее поперечного размера, формы и типа кромки [33, 35]. Для ГКТ возможны два типа ребер: «кресло» и «зигзаг», а наличие или отсутствие симметрии подрешетки играет важную роль в определении электронных свойств графеновых наноструктур [33]. Поведение ГКТ количественно различно для структур с зигзагообразными и креслообразными краями, что связано с краевыми состояниями, присутствующими в системах с зигзагообразными краями [36]. Итак, представляет интерес исследовать процесс ГВГ в ГКТ с разными ребрами. Такая наноструктура демонстрирует оптические свойства, принципиально отличные от свойств графена [37–39]. В то же время носители в ГКТ обладают не менее выдающимися транспортными свойствами, чем графен [3].

* E-mail: amarkos@ysu.am

Важным преимуществом ГКТ перед графеновыми нанолентами [40] является ограничение квази-частиц в пространстве. Последнее может иметь решающее значение для эффективности ГВГ, поскольку ограничение предотвращает распространение электронного волнового пакета в одном дополнительном измерении и, следовательно, может увеличить выход ГВГ [41].

В настоящей работе исследуется ГВГ в треугольной ГКТ, вызванная интенсивным когерентным излучением. Замкнутая система дифференциальных уравнений для одночастичной матрицы плотности при многофотонном взаимодействии ГКТ и сильного лазерного поля решается численно в рамках микроскопической теории, описывающей экстремальный нелинейно-оптический отклик ГКТ. Кулоновское электрон-электронное взаимодействие (ЭЭВ) рассматривается в приближении Хаббарда. Энергетическая щель ГКТ контролируется ее поперечным размером, формой и типом кромки. Полученные решения указывают на значимость латерального размера для процесса ГВГ в треугольных ГКТ с креслообразным и зигзагообразным краями. Таким образом, мы теоретически исследовали влияние квантового ограничения на ГВГ в ГКТ путем систематического изменения латерального размера модельной точки. Обратите внимание, что рассматриваемые квантовые точки экспериментально [33] доступны.

Работа организована следующим образом. В разд. 2 представлена система уравнений для одночастичной матрицы плотности. В разд. 3 мы рассматриваем многофотонное возбуждение и генерацию гармоник в треугольной ГКТ с различными типами краев и с разными поперечными размерами. Наконец, заключение приведено в разд. 4.

2. ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ УСРЕДНЕННОГО ПОЛЯ ХАРТРИ–ФОКА ДЛЯ ГЕНЕРАЦИИ ВЫСШИХ ГАРМОНИК В ГКТ

Предположим расположенную в плоскости xy плоскую ГКТ, ограниченную по осям x и y , которая взаимодействует с плоской квазимонохроматической электромагнитной (ЭМ) волной. Будем считать, что ЭМ-волна распространяется перпендикулярно плоскости xy . Мы считаем ГКТ нейтральными. Они будут описаны с использованием эмпирической модели сильной связи (СС) [42], применение которой к ГКТ обсуждалось в работе [33]. Гамильтониан СС может описывать системы конечного раз-

мера, ограничиваясь матричными элементами туннелирования между атомами внутри ГКТ. Полный гамильтониан имеет вид

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{H}_{int}. \quad (1)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \widehat{H}_0 = & - \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \\ & + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - \frac{n_i}{2} \right) \left(c_{i\bar{\sigma}}^\dagger c_{i\bar{\sigma}} - \frac{n_i}{2} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

— свободный гамильтониан ГКТ для модели СС, $c_{i\sigma}^\dagger$ — оператор рождения электрона с поляризацией спина σ в узле i , а $\langle i, j \rangle$ указывает на суммирование по ближайшим соседним узлам с переданной энергией t_{ij} , U — энергия ЭЭВ, n_i — полная электронная плотность для узла i .

Гамильтониан СС описывает системы конечного размера, ограничивая матричные элементы t_{ij} туннелирования между атомами внутри квантовой точки. Ненулевые матричные элементы гамильтониана СС, заданные первым членом в выражении (2), соответствуют матричному элементу туннелирования t_{ij} между энергетическими состояниями в соседних узлах. Второй член в (2) представляет собой гамильтониан кулоновского ЭЭВ (\widehat{H}_{ee}) в приближении Хаббарда, где игнорируются все элементы матрицы кулоновского рассеяния, за исключением членов локального взаимодействия (порядка U) между электронами со спином вверх и вниз, занимающими одну и ту же позицию i (величина $\bar{\sigma}$ противоположна по поляризации спину σ). Операторы $c_{i\sigma}^\dagger$, $c_{i\sigma}$ удовлетворяют правилам антикоммутации

$$\{c_{i\sigma} c_{j\sigma}\} = \{c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}^\dagger\} = 0, \quad \{c_{i\sigma} c_{j\bar{\sigma}}^\dagger\} = \delta_{ij} \delta_{\sigma\bar{\sigma}},$$

которые гарантируют антисимметрию многочастичных состояний.

Мы предполагаем, что до взаимодействия $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle = n_i$. В расчетах взаимодействие между светом и материей описывается в калибровке длины через скалярный потенциал

$$\widehat{H}_{int} = e \sum_{i\sigma} \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{E}(t) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$$

с элементарным зарядом e , радиус-вектором \mathbf{r}_i и напряженностью электрического поля $\mathbf{E}(t)$. В гамильтониане мы пренебрегаем колебаниями решетки. Интеграл перехода t_{ij} между ближайшими соседними атомами ГКТ может быть определен экспериментально и равен $t_{ij} = 2.7$ эВ [3]. Принимается, что поле волны есть

$$\begin{aligned} E_x(t) &= f(t) E_0 \cos \omega t \cos \theta, \\ E_y(t) &= f(t) E_0 \cos \omega t \sin \theta \end{aligned} \quad (3)$$

с частотой ω , огибающей импульса $f(t) = \sin^2(\pi t/T)$, углом θ между напряженностью электрического поля волны осью x . Длительность импульса T равна 20 периодам волны: $T = 40\pi/\omega$. Из уравнения Гейзенберга

$$i\hbar \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} = [\hat{L}, \hat{H}]$$

можно получить эволюционные уравнения для одночастичной матрицы плотности $\rho_{ij}^{(\sigma)} = \langle c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle$. Кроме того, мы примем, что система релаксирует с вероятностью γ к равновесному распределению $\rho_{0ij}^{(\sigma)}$. Чтобы получить замкнутую систему уравнений для одночастичной матрицы плотности $\rho_{ij}^{(\sigma)} = \langle c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle$, ЭЭВ будет рассматриваться в приближении Хартри–Фока:

$$\hat{H}_{ee}^{HF} \simeq \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} \left(\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle - \frac{n_i}{2} \right) \left(c_{i\bar{\sigma}}^\dagger c_{i\bar{\sigma}} - \frac{n_i}{2} \right). \quad (4)$$

Таким образом, получаем следующее уравнение для матрицы плотности:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho_{ij}^{(\sigma)}}{\partial t} &= \sum_k \left(t_{kj} \rho_{ik}^{(\sigma)} - t_{ik} \rho_{kj}^{(\sigma)} \right) + \\ &+ U \left(\rho_{ii}^{(\bar{\sigma})} - \rho_{jj}^{(\bar{\sigma})} \right) \rho_{ij}^{(\sigma)} + \mathbf{eE}(t) \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \rho_{ij}^{(\sigma)} - \\ &- i\hbar\gamma \left(\rho_{ij}^{(\sigma)} - \rho_{0ij}^{(\sigma)} \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Мы численно диагонализуем гамильтониан сильной связи \hat{H}_0 . Для статической системы гамильтониан Хартри–Фока обращается в нуль, $\hat{H}_{ee}^{HF} \simeq 0$. Следует отметить, что ЭЭВ в пределе Хартри–Фока входит в эмпирический интеграл перехода между ближайшими соседними атомами, t_{ij} , который выбирается близким к экспериментальным значениям. Итак, локальное ЭЭВ в приближении Хартри–Фока актуально в квантовой динамике, инициированной полем лазера накачки и, как мы увидим ниже, значительно изменяет спектр ГВГ. С помощью численной диагонализации мы находим собственные состояния $\psi_\mu(i)$ и собственные энергии ε_μ ($\mu = 0, 1, \dots, N-1$). Результаты численной диагонализации показаны ниже на рис. 3, 4. Без туннелирования все уровни энергии были вырожденными. Мы видим, что туннелирование сняло вырождение и привело к образованию зоны валентных состояний ниже уровня Ферми, $\varepsilon_\mu = 0$, зоны состояний проводимости над уровнем Ферми и щель на уровне

Ферми (см. также работу [33]). Квантовая динамика сильного поля периодически возбуждаемой ГКТ регулируется замкнутой системой дифференциальных уравнений (5), которая должна быть решена с соответствующими начальными условиями. Построим исходную матрицу плотности $\rho_{0ij}^{(\sigma)}$ через заполнение электронных состояний в валентной зоне согласно распределению Ферми–Дирака. Поскольку запрещенная зона достаточно велика, мы предполагаем, что распределение Ферми–Дирака при нулевой температуре имеет вид

$$\rho_{0ij}^{(\sigma)} = \sum_{\mu=N/2}^{N-1} \psi_\mu^*(j) \psi_\mu(i).$$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ЭФФЕКТИВНОСТИ ГВГ В ТРЕУГОЛЬНЫХ ГКТ

Спектр ГВГ вычисляется с помощью преобразования Фурье $\mathbf{a}(\Omega)$ дипольного ускорения $\mathbf{a}(t) = d^2 \mathbf{d}/dt^2$. Дипольный момент определяется как $\mathbf{d}(t) = \langle \sum_{i\sigma} \mathbf{r}_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle$. Для точности мы нормируем ускорение диполя на коэффициент $a_0 = \bar{\omega}^2 \bar{d}$, где $\bar{\omega} = 1$ эВ/ \hbar и $\bar{d} = 1$ Å. Мощность, излучаемая на данной частоте, пропорциональна $|\mathbf{a}(\Omega)|^2$. Чтобы прояснить основные аспекты ГВГ в треугольной ГКТ, мы предполагаем, что частота возбуждающей волны накачки равна $\omega = 0.1$ эВ/ \hbar , что намного меньше типичного зазора $U \simeq 3$ эВ. Вероятность релаксации равна $\hbar\gamma = 50$ мэВ для всех численных расчетов. В большинстве расчетов предполагается, что волна (3) линейно поляризована вдоль оси x ($\theta = 0$). Ось x находится в плоскости рис. 1, 2 и направлена горизонтально вправо. Взаимодействие волна–частица будет характеризоваться работой электрического поля волны на отрезке между ближайшими атомами углерода: $\mathcal{W} = eE_0 a$. Нелинейные и многофотонные эффекты имеют место, когда величина \mathcal{W} становится сравнима или больше, чем энергия фотона $\hbar\omega$. В нашей модели гексагональные двумерные наноструктуры формируются из π -орбиталей атомов углерода. В результате мы пренебрегаем переходами на σ и между орбиталями π – σ . Эти орбитали отделены от σ -орбитали большой энергетической щелью (порядка 10 эВ) в несколько t [43]. Следовательно, мы будем рассматривать умеренно сильные волны накачки: $\hbar\omega \ll \mathcal{W} < t$. Для более сильных полей обязательно нужно учитывать другие орбитали атома.

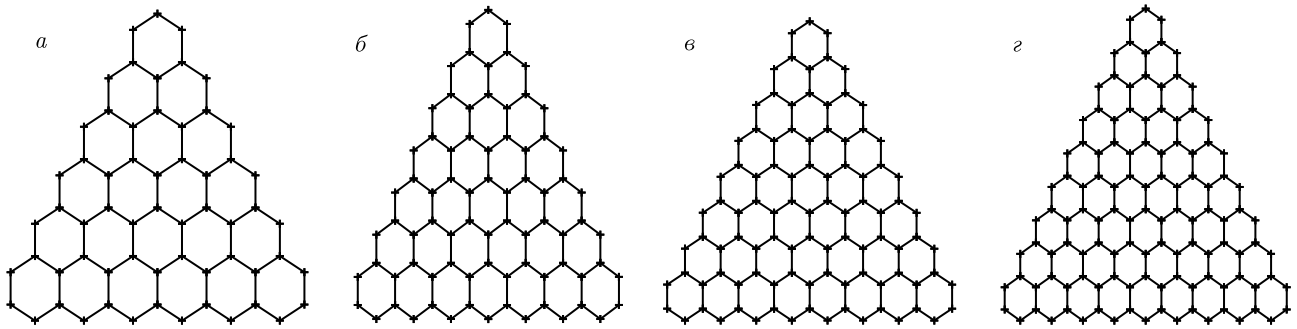


Рис. 1. Схема решетки треугольной ГКТ с зигзагообразными ребрами с $N = 61$ (а), 78 (б), 97 (в), 118 (г) атомами. Расстояние между ближайшими соседними атомами равно $a \simeq 1.42 \text{ \AA}$

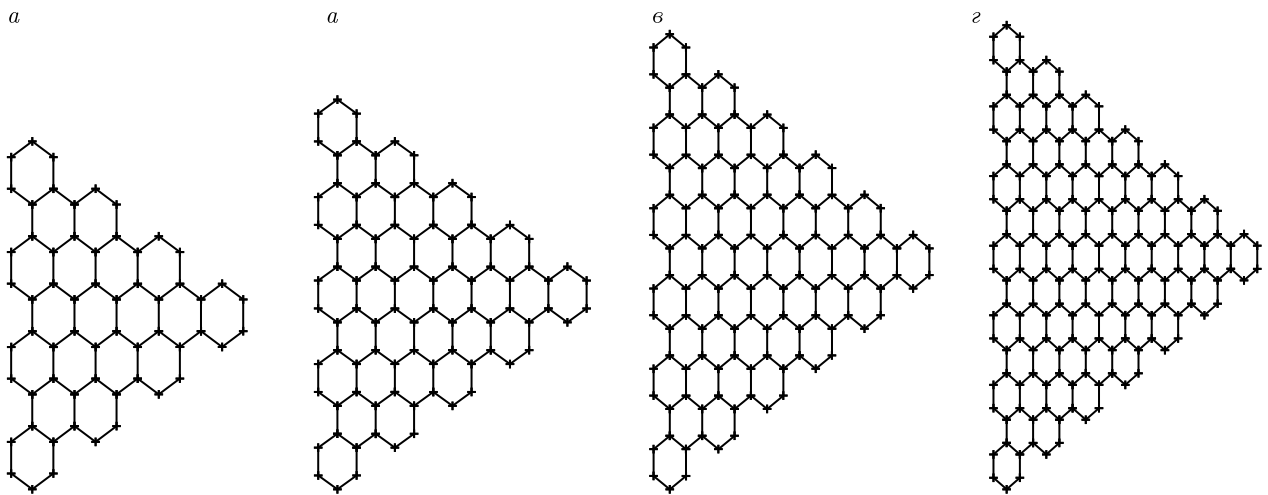


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, но для треугольной ГКТ с креслообразными краями. Число атомов $N = 60$ (а), 90 (б), 126 (в), 168 (г)

На рис. 1, 2 схематически изображена решетка графена, а на рис. 3, 4 показаны энергетические спектры СС в окрестности уровня Ферми, $\varepsilon_\mu = 0$, для треугольных ГКТ с зигзагообразными и креслообразными краями при разном числе атомов углерода. На рис. 1–4 видно, что с увеличением числа атомов решетки плотность собственных энергетических состояний увеличивается. Как будет видно позже, это увеличит вероятность многофотонного ГВГ.

Чтобы сравнить спектры излучения ГВГ в треугольных ГКТ с разными краями и разным числом атомов решетки, на рис. 5, 6 приведены все результаты для спектров, нормированных на число атомов N . На рис. 5 для компонент $|a_x(\Omega)|$ и $|a_y(\Omega)|$ берется сильная ЭМ-волна с амплитудой $E_0 = 0.3 \text{ В/\AA}$ и энергией ЭЭВ $U \simeq 3 \text{ эВ}$. Как показано на рис. 5, в сильном лазерном поле существенны многофотонные гармоники, а выходы ГВГ для ГКТ одинаково существенны как для креслообразных, так и для

зигзагообразных краев, особенно для больших N . В обоих случаях спектры ГВГ имеют структуру многоступенчатых плато, что связано с возбуждениями собственных энергетических состояний между незанятыми энергетическими уровнями и занятым уровнем [33]. ГКТ с креслообразными краями имеет осевую симметрию (см. рис. 2), и, в частности, в этом случае $|a_y| = 0$ (поэтому на рис. 5 кривая $|a_y|$ отсутствует), в то время как в случае зигзагообразных ребер обе компоненты, $|a_x|$ и $|a_y|$, существенны (рис. 5). Кроме того, в спектре ГВГ в ГКТ с креслообразными краями видны только нечетные гармоники, как в обычном графене [1]. Однако для зигзагообразных краев из-за отсутствия инверсионной симметрии в спектре излучения ГВГ присутствуют и нечетные, и четные гармоники. Чтобы это показать наглядно, на рис. 6 отдельно приведены результаты для ГВГ для первых тридцати гармоник при приблизительно одинаковом числе ($N \simeq 60$) атомов треугольной ГКТ с разными краями.

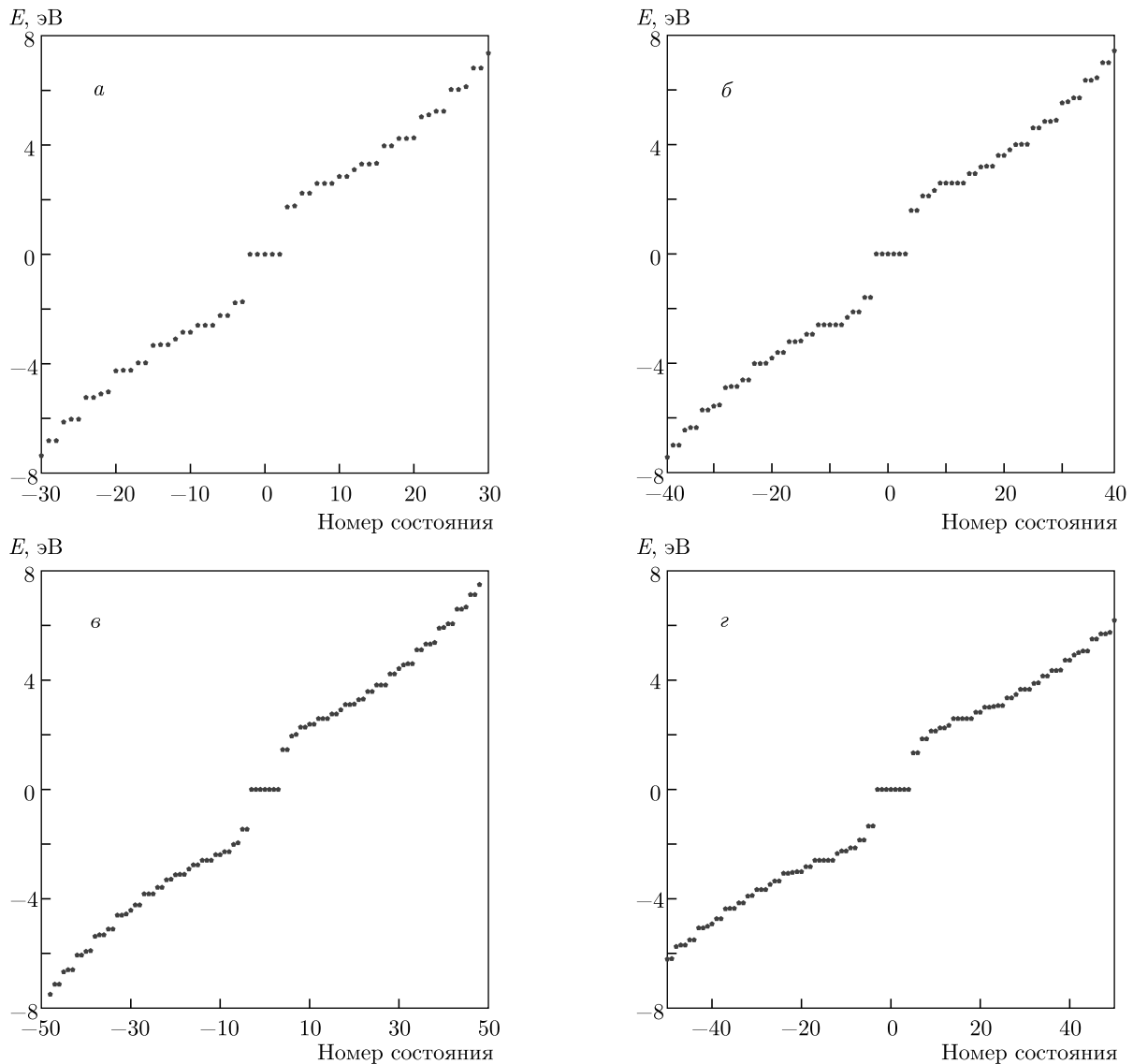


Рис. 3. Собственные энергии в треугольной ГКТ с зигзагообразными ребрами с числом атомов $N = 61$ (а), 78 (б), 97 (в), 118 (г)

Далее мы рассматриваем спектры ГВГ в зависимости от интенсивности волны накачки. На рис. 7 представлены спектры ГВГ в зависимости от амплитуды ЭМ-поля и номеров гармоник при фиксированной энергии ЭЭВ $U \approx 3$ эВ. Для сравнения мы исследуем ГКТ с приблизительно одинаковым числом атомов углерода, но с разными краями: креслообразными и зигзагообразными. Как показано на рис. 7, вероятность ГВГ возрастает с увеличением числа атомов N и с появлением новых энергетических состояний (также см. рис. 1–4). Номер места отсечки гармоник, когда зависимость на-

чинает резко убывать, линейно возрастает с увеличением напряженности поля. Затем, по достижении гармоники отсечки n_{cut} , соответствующей переходу из самого низкого занятого энергетического уровня на самый высокий незанятый энергетический уровень, скорость ГВГ насыщается (ступенчатая огибающая желтого цвета). Место отсечки гармоник видно на рис. 5: $n_{cut} \approx 160$. Отметим, что линейная зависимость гармоник отсечки от напряженности поля присуща ГВГ на дискретных уровнях или кристаллам с линейной дисперсией энергии. Как и в случае атомов, для ГКТ при фиксирован-

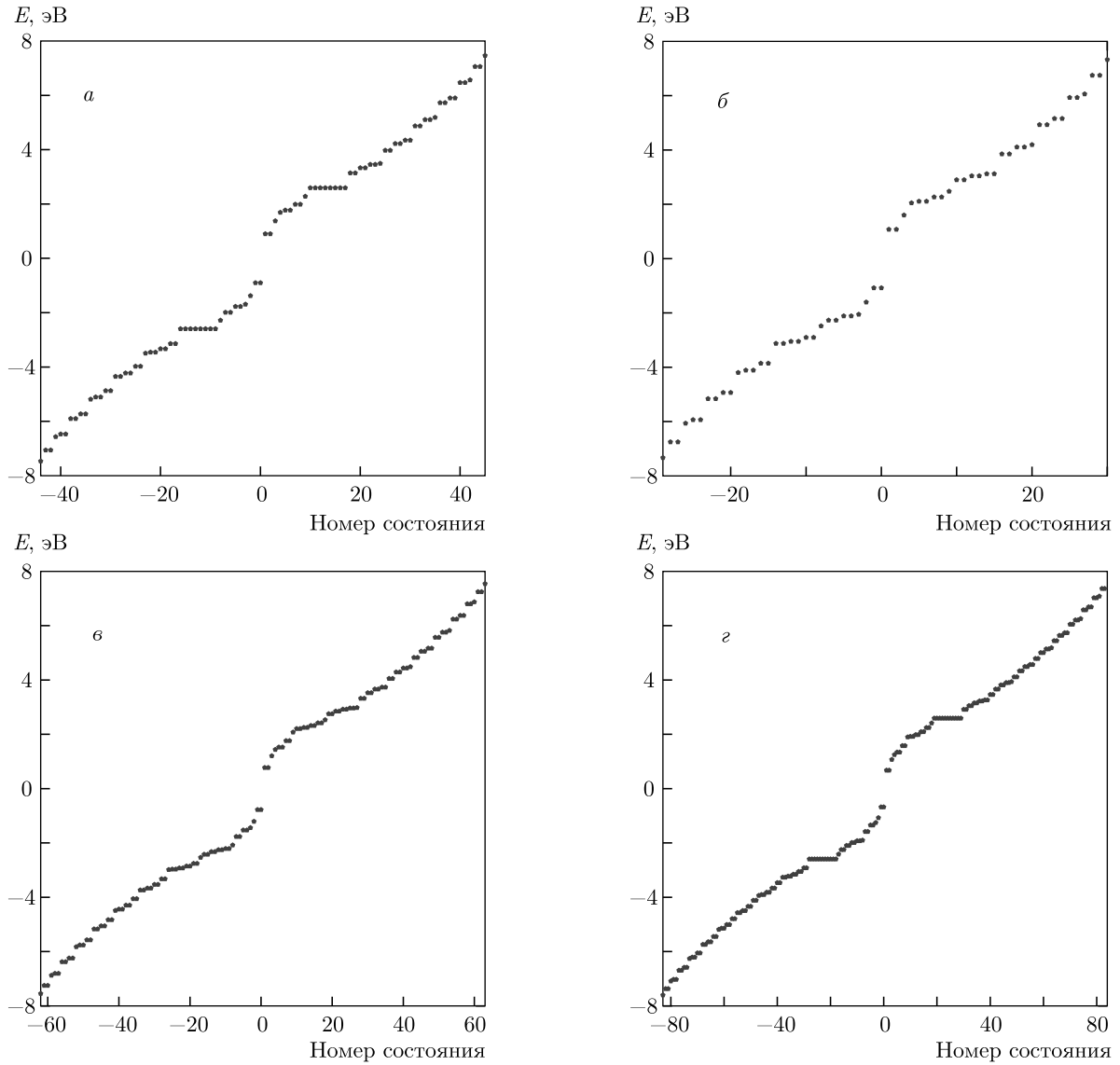


Рис. 4. То же, что и на рис. 3, но для треугольной ГКТ с креслообразными краями. Число атомов $N = 60$ (а), 90 (б), 126 (в), 168 (г)

ной энергии фотона с увеличением электрической напряженности волны накачки энергия обрезания гармоники ($\hbar\omega_{cut}$) увеличивается.

Кроме того, как было показано в работе [29], локальное ЭЭВ подавляет флуктуацию заряда и снижает поглощенную энергию. Также ожидается подавление выхода ГВГ из-за кулоновского ЭЭВ. Последнее показано на рис. 8, где приведены спектры ГВГ в режиме сильного ЭМ-поля в зависимости от номера гармоники и энергии ЭЭВ для разных краев ГКТ и числа атомов углерода. Как видно на рис. 8, для небольшого числа N атомов ГКТ

с увеличением энергии ЭЭВ скорость ГВГ в целом подавляется (поэтому на рис. 8 приведена зависимость для средних гармоник с номерами меньше чем 40). Последнее не имеет места для больших N , когда увеличивается плотность энергетических состояний (рис. 8в,г). Спектр ГВГ перестает зависеть от кулоновского ЭЭВ. Такое свойство присуще обычному графену [1], неограниченному в пространстве.

Мы также исследовали зависимость спектров ГВГ от ориентации напряженности ЭМ-волны. На рис. 9 представлены графики зависимости спектров при ГВГ от порядка гармоник и ориентации поля

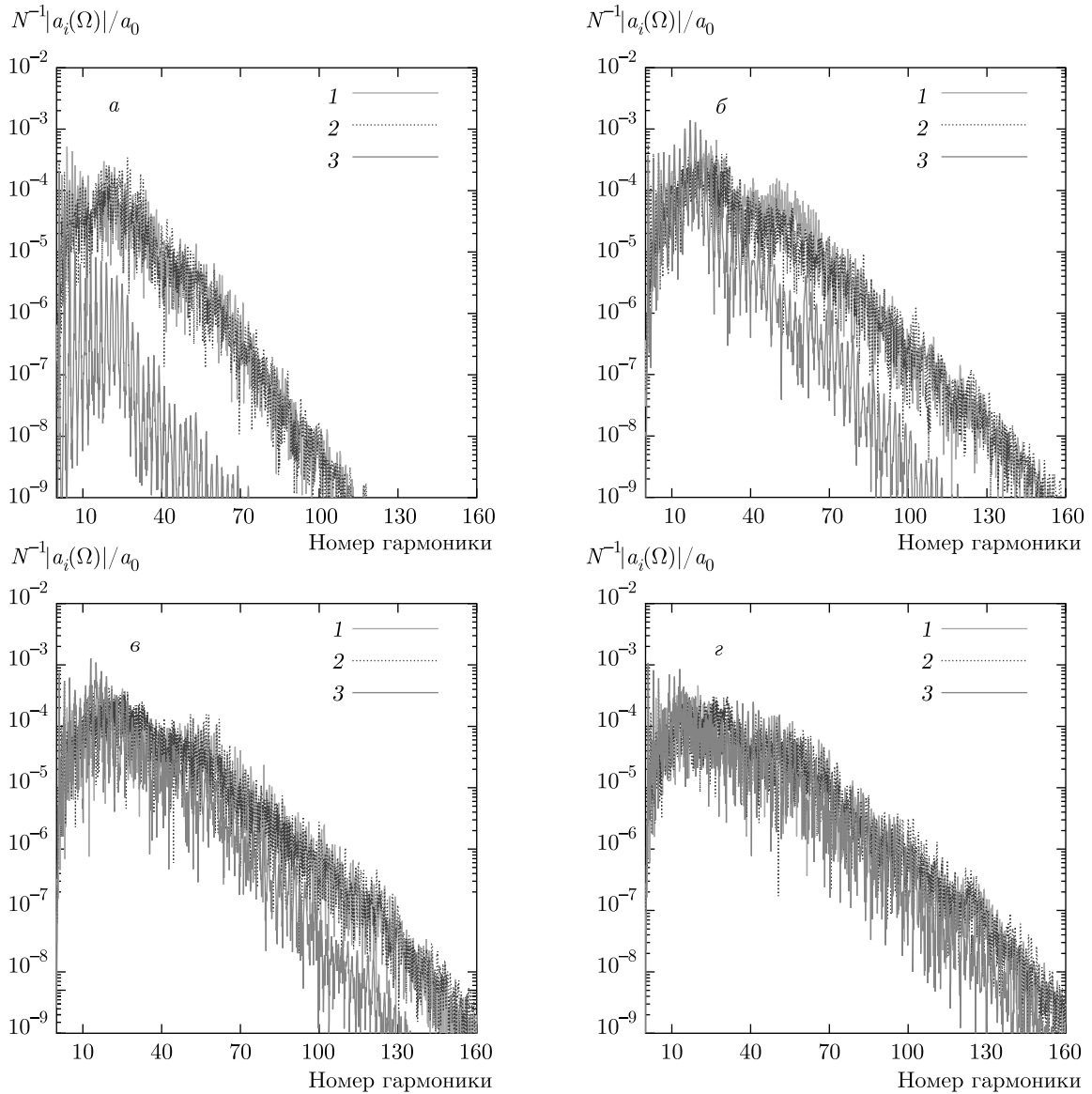


Рис. 5. (В цвете онлайн) Скорость излучения ГВГ, выраженная через преобразование Фурье дипольного ускорения $N^{-1}|a_i(\Omega)|/a_0$, в логарифмическом масштабе в зависимости от номера гармоники волны накачки для треугольной ГКТ. Приведены компоненты $|a_x|$ в треугольной ГКТ с зигзагообразными (1) и креслообразными (3) краями, а также компоненты $|a_y|$ в ГКТ с зигзагообразными (2) краями. Число атомов $N = 61$ (а), 97 (б), 118 (в), 141 (г) для случаев 1, 2 и $N = 60$ (а), 90 (б), 126 (в), 168 (г) для случая 3. ЭМ-волна линейно поляризована по оси x . Частота волны $\omega = 0.1$ эВ/ \hbar , напряженность поля $E_0 = 0.3$ В/Å. Спектры показаны для умеренной (типичной) энергии ЭЭВ $U = 3$ эВ. Вероятность релаксации $\hbar\gamma = 50$ мэВ

волны накачки по отношению к оси x фиксированной амплитуды ($E_0 = 0.3$ В/Å) и частоты при умеренной энергии ЭЭВ $U \simeq 3$ эВ. Как видно на рис. 9, ориентация волны накачки под разными углами к оси x приводит к разным спектрам гармоник. Это связано с тем, что у треугольной ГКТ нет инверсной

симметрии (см. рис. 1–4). Как показано на рис. 9а,б для углов $0 < \theta < \pi/2$ скорость средних гармоник (максимумы для номеров $n \simeq 10$ –40) увеличивается, а высшие гармоники подавляются. Однако на рис. 9в,г видно, что с увеличением плотности энергетических состояний эта закономерность наруша-

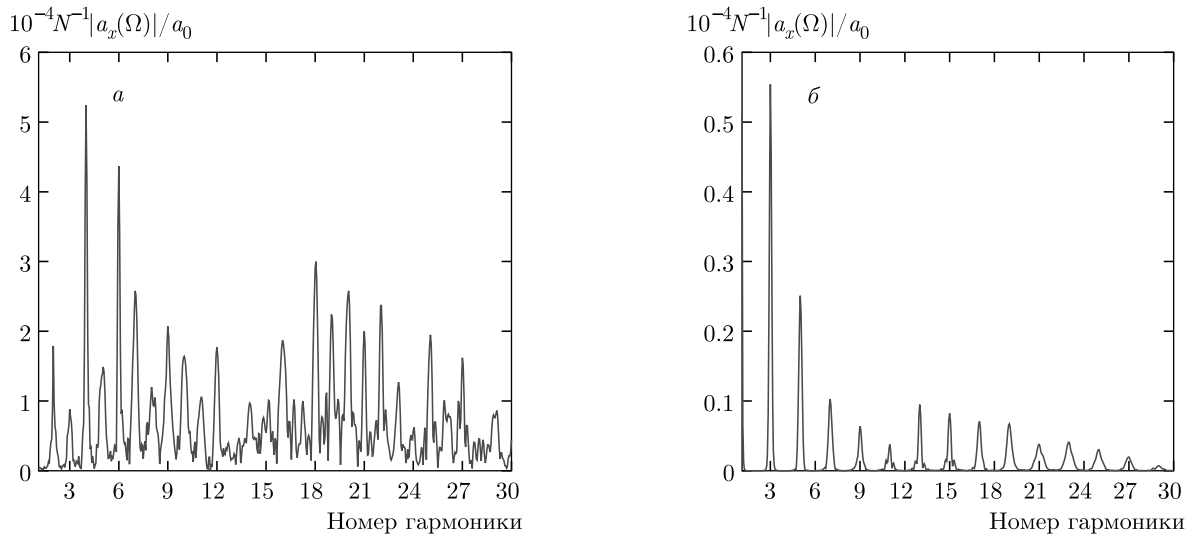


Рис. 6. То же, что и на рис. 5, но вне логарифмического масштаба: показаны гармоники (четные и нечетные) в треугольной ГКТ с зигзагообразными краями для $N = 60$ (а) и гармоники (только нечетные) в ГКТ с креслообразными краями для $N = 61$ (б)

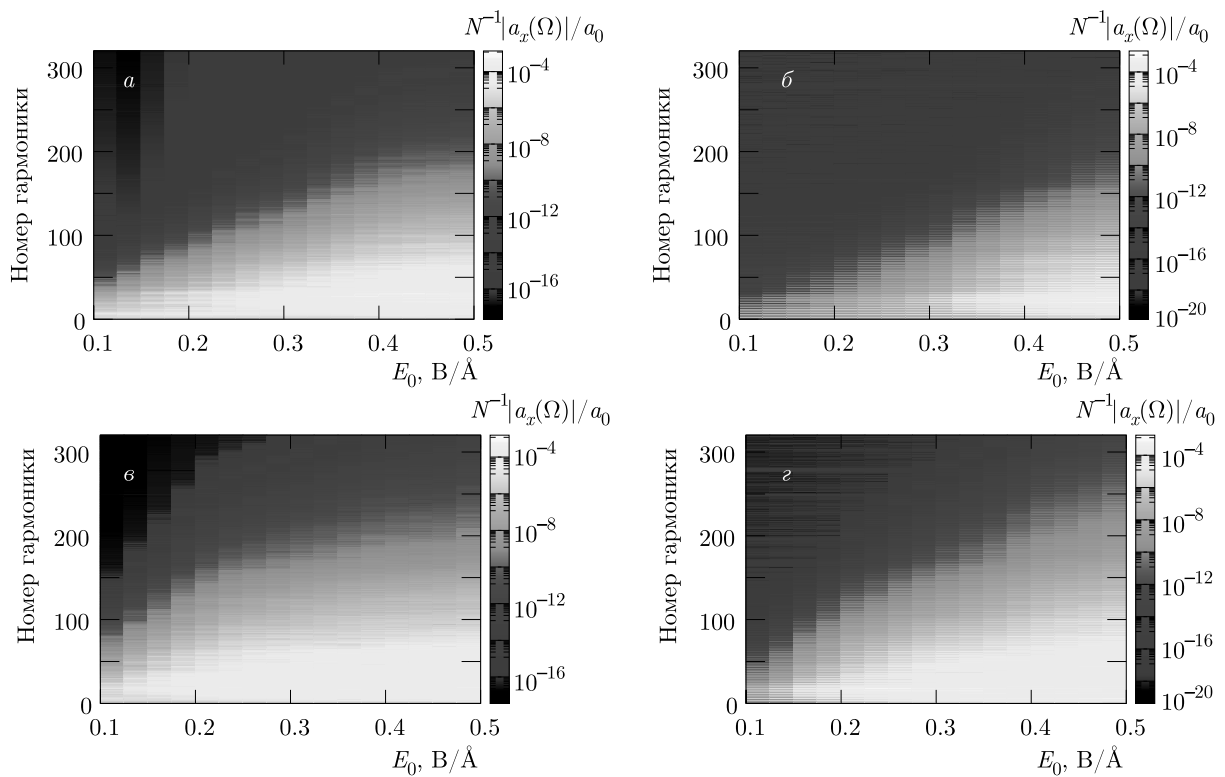


Рис. 7. (В цвете онлайн) Скорость испускания ГВГ, выраженная через преобразование Фурье дипольного ускорения $N^{-1}|a_x(\Omega)|/a_0$ в режиме сильного поля, в логарифмическом масштабе в зависимости от амплитуды ЭМ-поля и номера гармоники для треугольной ГКТ с разными ребрами и числом атомов углерода $N = 61$ (а), 118 (в) для треугольной ГКТ с зигзагообразными краями и $N = 60$ (б), 126 (г) для треугольной ГКТ с креслообразными краями. ЭМ-волна линейно поляризована по оси x . Частота волны $\omega = 0.1$ эВ/ \hbar , энергия ЭВ $U = 3$ эВ, вероятность релаксации $\hbar\gamma = 50$ мэВ

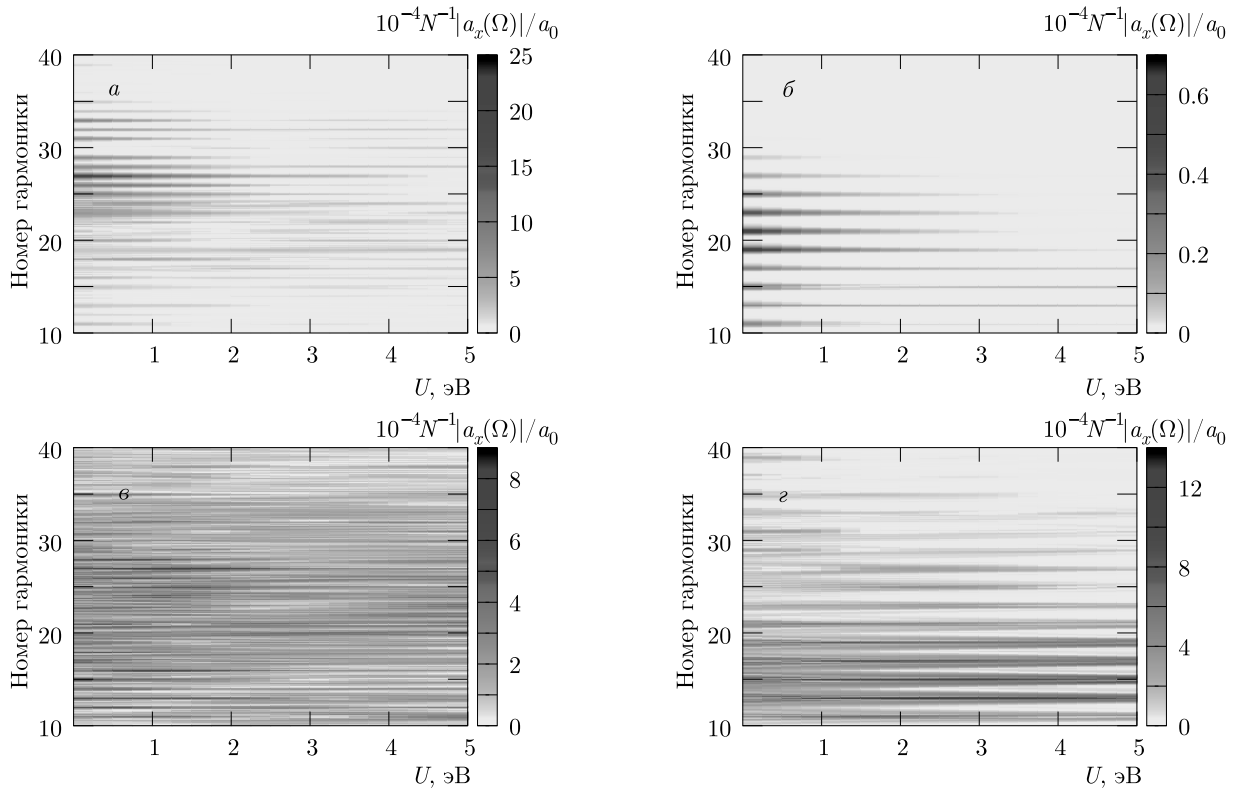


Рис. 8. (В цвете онлайн) То же, что и на рис. 7, но вне логарифмического масштаба в зависимости от энергии ЭВ и порядка гармоник при фиксированной напряженности электромагнитного поля $E_0 = 0.3 \text{ В/Å}$. ЭМ-волна линейно поляризована вдоль оси x

ется и спектр ГВГ перестает зависеть от ориентации силы ЭМ-волны. Этим ГКТ становится похожа на неограниченный в пространстве графен [1].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы исследовали влияние интенсивного когерентного излучения на ГКТ. Была разработана микроскопическая теория для описания экстремального нелинейно-оптического отклика треугольной ГКТ. Численно решена замкнутая система дифференциальных уравнений для одночастичной матрицы плотности при многофотонном взаимодействии ГКТ с сильным лазерным полем. Полученные решения указывают на важность типа кромки и поперечного размера, а также на значимость ширины запрещенной зоны и величины лазерного поля для процесса ГВГ в плоских ГКТ. Номер гармоники отсечки линейно возрастает с увеличением напряженности поля. Как и в случае ГВГ на атомах, для ГКТ с увеличением силы волны накачки при фиксированной энергии фотона энергия обрезания гармоники

($\hbar\omega_{n_{cut}}$) увеличивается линейно. Из-за отсутствия или наличия симметрии подрешетки у треугольной ГКТ с зигзагообразными краями в процессе генерации в поле ЭМ-волны появляются гармоники как нечетного, так и четного порядка, а при креслообразных краях существенны только нечетные гармоники.

Мы также исследовали зависимость спектров ГВГ от ориентации напряженности волны накачки. Как показывают численные результаты, из-за различной симметрии подрешеток одинаковые углы дают разные парциальные выходы в спектрах ГВГ для треугольных ГКТ с креслообразными и зигзагообразными краями. К тому же скорость средних гармоник для малого числа атомов увеличивается, а высшие гармоники подавляются, что не имеет места с увеличением плотности энергетических состояний. Кроме того, с ростом плотности энергетических состояний нарушается правило, согласно которому в случае небольшого числа атомов ГКТ с увеличением энергии ЭВ скорость ГВГ в целом подавляется. Таким образом, с увеличением средней плотности

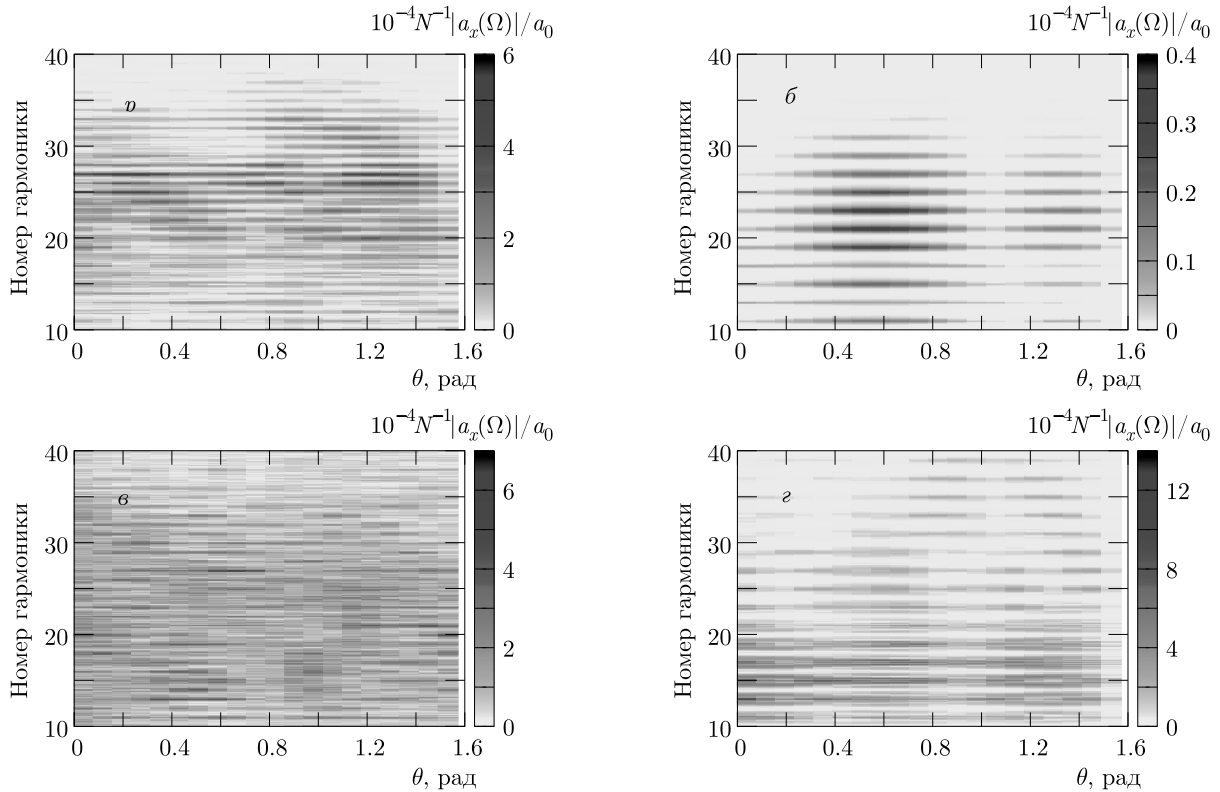


Рис. 9. (В цвете онлайн) Скорость испускания ГВГ, выраженная через преобразование Фурье дипольного ускорения $N^{-1}|a_x(\Omega)|/a_0$, в зависимости от порядка гармоник и угла θ между вектором напряженности ЭМ-поля и осью x при $N = 61$ (а), 118 (в) в треугольной ГКТ с зигзагообразными краями, $N = 60$ (б), 126 (г) в треугольной ГКТ с креслообразными краями. Частота волны $\omega = 0.1$ эВ/ \hbar , напряженность поля $E_0 = 0.3$ В/Å, энергия ЭВВ $U = 3$ эВ, вероятность релаксации $\hbar\gamma = 50$ мэВ

собственных состояний ГКТ ведет себя как неограниченный в пространстве графен.

Итак, мы исследовали размер и форму ГКТ, используя ограничение квазичастиц в пространстве. Полученные результаты показывают, что ГКТ могут служить эффективной средой для генерации четных и нечетных гармоник высшего порядка при взаимодействии с лазерным полем умеренной интенсивности за счет ограничения квазичастиц в ГКТ. Кроме того, вероятность ГВГ возрастает с увеличением числа атомов ГКТ или с появлением новых энергетических состояний. Это потенциальный способ увеличения выхода и энергии фотонов в процессе ГВГ в графеноподобных квантовых точках.

Благодарности. Авторы глубоко признательны Г. К. Аветисяну и Г. Ф. Мкртчяну за постоянные обсуждения и ценные рекомендации.

Финансирование. Работа поддержана Комитетом науки Республики Армения в рамках исследовательского проекта 20TTWS-1C010.

ЛИТЕРАТУРА

1. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., *Science* **306**(5696), 666 (2004).
2. H. Liu, Y. Li, Y. S. You et al., *Nature Phys.* **13**, 262 (2017).
3. A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres et al., *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
4. S. A. Mikhailov and K. Ziegler, *J. Phys. Condens. Matter* **20**, 384204 (2008).
5. H. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, K. V. Sedrakian et al., *J. Nanophoton.* **6**, 061702 (2012).
6. H. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, K. G. Batrakov et al., *Phys. Rev. B* **88**, 165411 (2013).

7. I. Al-Naib, J. E. Sipe, and M. M. Dignam, *New J. Phys.* **17**, 113018 (2015).
8. L. A. Chizhova, F. Libisch, and J. Burgdorfer, *Phys. Rev. B* **94**, 075412 (2016).
9. L. A. Chizhova, F. Libisch, and J. Burgdorfer, *Phys. Rev. B* **95**, 085436 (2017).
10. H. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, G. F. Mkrtchian, and Kh. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **11**, 016004 (2017).
11. D. Dimitrovski, L. B. Madsen, and T. G. Pedersen, *Phys. Rev. B* **95**, 035405 (2017).
12. H. K. Avetissian and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **97**, 115454 (2018).
13. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, B. R. Avchyan, and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **100**, 035434 (2019).
14. H. K. Avetissian and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **99**, 085432 (2019).
15. A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, and Kh. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **13**, 036010 (2019).
16. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan et al., *J. Nanophoton.* **14**, 026004 (2020).
17. A. G. Ghazaryan, H. H. Matevosyan, and Kh. V. Sedrakian, *J. Nanophoton.* **14**, 046009 (2020).
18. H. K. Avetissian, *Relativistic Nonlinear Electrodynamics, The QED Vacuum and Matter in Superstrong Radiation Fields*, Springer, Berlin (2016).
19. Б. Р. Авчян, А. Г. Казарян, К. А. Саргсян, Х. В. Седракиян, *ЖЭТФ* **159**, 1003 (2021).
20. А. Г. Казарян, *ЖЭТФ* **159**, 952 (2021).
21. G. P. Zhang and Y. H. Bai, *Phys. Rev. B* **101**, 081412(R) (2020).
22. H. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, and G. F. Mkrtchian, *Phys. Rev. B* **104**, 125436 (2021).
23. P. Bowlan, E. Martinez-Moreno, K. Reimann et al., *Phys. Rev. B* **89**, 041408(R) (2014).
24. N. Yoshikawa, T. Tamaya, and K. Tanaka, *Science* **356**, 736 (2017).
25. H. K. Avetissian, A. K. Avetissian, G. F. Mkrtchian, and Kh. V. Sedrakian, *Phys. Rev. B* **85**, 115443 (2012).
26. A. K. Avetissian, A. G. Ghazaryan, Kh. V. Sedrakian, and B. R. Avchyan, *J. Nanophotonics* **12**, 016006 (2018).
27. E. V. Castro, K. S. Novoselov, S. V. Morozov et al., *Phys. Rev. Lett.* **99**, 216802 (2007).
28. J. B. Oostinga, H. B. Heersche, X. Liu et al., *Nature Mater.* **7**, 151 (2008).
29. Y. B. Zhang, T.-T. Tang, C. Girit et al., *Nature* **459**, 820 (2009).
30. F. Guinea, A. H. C. Neto, and N. M. R. Peres, *Phys. Rev. B* **73**, 245426 (2006).
31. M. Koshino and T. Ando, *Phys. Rev. B* **73**, 245403 (2006).
32. A. Varleta, M. Mucha-Kruczynski, D. Bischoff et al., *Synthetic Metals* **210**, 19 (2015).
33. A. D. Guclu, P. Potasz, M. Korkusinski, and P. Hawrylak, *Graphene Quantum Dots*, Springer, Berlin (2014).
34. H. K. Avetissian, B. R. Avchyan, G. F. Mkrtchian, and K. A. Sargsyan, *J. Nanophoton.* **14**, 026018 (2020).
35. A. D. Guclu, P. Potasz, and P. Hawrylak, in *Future Trends in Microelectronics: Frontiers and Innovations*, ed. by S. Luryi, J. Xu, and A. Zaslavsky, Wiley, New York (2013).
36. A. D. Guclu, P. Potasz, and P. Hawrylak, *Phys. Rev. B* **82**, 155445 (2010).
37. A. D. Guclu, P. Potasz, O. Voznyy et al., *Phys. Rev. Lett.* **103**, 246805 (2009).
38. O. Voznyy, A.D. Guclu, P. Potasz, and P. Hawrylak, *Phys. Rev. B* **83**, 165417 (2011).
39. W. L. Wang, S. Meng, and E. Kaxiras, *Nano Lett.* **8**, 241 (2008).
40. M. Y. Han, B. Ozyilmaz, Y. Zhang, and Ph. Kim, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 206805 (2007).
41. M. Lewenstein, Ph. Balcou, M. Y. Ivanov et al., *Phys. Rev. A* **49**, 2117 (1994).
42. P. R. Wallace, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).
43. S. Reich, C. Thomson, and J. Maultzsch, *Carbon Nanotubes, Basic Concepts and Physical Properties*, Wiley-VCH (2004).

Q-РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ДЛЯ ОДНОАТОМНОГО ЛАЗЕРА, РАБОТАЮЩЕГО В «КЛАССИЧЕСКОМ» РЕЖИМЕ

*Н. В. Ларионов**

*Санкт-Петербургский государственный морской технический университет
190121, Санкт-Петербург, Россия*

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

Поступила в редакцию 5 октября 2021 г.,
после переработки 5 октября 2021 г.
Принята к публикации 11 октября 2021 г.

Теоретически исследуется модель одноатомного лазера с некогерентной накачкой. В стационарном случае из уравнения для оператора плотности системы выводится линейное однородное дифференциальное уравнение для усредненной по фазе Q -функции Хусими. В режиме, при котором связь поля с атомом во много раз сильнее, чем связь поля с резервуаром, обеспечивающим его распад, найдено асимптотическое решение этого уравнения. Это решение позволяет описать некоторые статистические особенности одноатомного лазера, в частности, слабую субпуассоновскую статистику фотонов.

DOI: 10.31857/S004445102202002X

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время источники неклассических состояний света востребованы в таких областях физики, как квантовая информатика, квантовые коммуникации, квантовая криптография и квантовые стандарты частоты [1–5]. Проводятся различные исследования, направленные на создание таких источников. В частности, есть работы, в которых для получения определенных состояний света, а также для создания различных элементов квантовых устройств предлагается использовать системы, состоящие всего из одного или нескольких квантовых излучателей [6–9]. Свойства одиночного излучателя отображаются на состоянии электромагнитного поля, что позволяет получить, к примеру, субпуассоновский свет [10].

Одной из фундаментальных моделей квантовой оптики является модель одноатомного лазера. Данной модели посвящено множество как теоретических [11–27], так и экспериментальных [28–30] работ. Различные эффекты, обнаруженные в этих ра-

ботах, в основном связаны с сильным проявлением ферми-статистики одиночного излучателя: эффект самотушения, сжатие амплитудной компоненты поля, субпуассоновская статистика фотонов, генерация без инверсии и др.

Существенный вклад в понимание физики одноатомного лазера был сделан группой ученых из Института физики НАН Беларуси, возглавляемой С. Я. Килином (см. [11, 15–18, 20, 27] и ссылки в них). Один из теоретических подходов, используемых этой группой, основан на анализе уравнения для оператора плотности системы, записанного для таких квазивероятностных распределений, как P -функция Глаубера и Q -функция Хусими, позволяющих находить нормально и антинормально упорядоченные корреляционные функции полевых операторов соответственно.

В работе [21] для случая стационарного режима работы одноатомного лазера с некогерентной накачкой было получено линейное однородное дифференциальное уравнение второго порядка для усредненной по фазе P -функции. В предельном случае, когда связь поля с атомом во много раз сильнее, чем связь поля с резервуаром, обеспечивающим его затухание (так называемый «классический» режим — режим, в котором для одноатомного лазера возможно су-

* E-mail: larionov.nickolay@gmail.com

ществование порога генерации [19]), было получено приближенное решение этого уравнения. Последнее, являющееся порождающим решением в проблеме малого параметра у старшей производной (сингулярно возмущенная задача, см., к примеру, [31]), для определенных значений параметров лазера дает хорошее согласие с численными расчетами и, более того, содержит в себе некоторые предельные решения, полученные ранее в [15, 16]. Дальнейший анализ этого уравнения позволил получить приближенное выражение для P -функции, которая, в отличие от предыдущих решений, демонстрирует существенно неклассическое поведение — становится отрицательно определенной [22].

В силу специфики P -функции, которая может быть отрицательной и/или неограниченной, анализ упомянутого уравнения и его приближенных решений сталкивается с определенными трудностями. В частности, здесь возникает проблема искусственного ограничения области определения P -функции (см., к примеру, [15, 21]). В связи с этим возникает естественное желание получить аналогичное уравнение, но для «хорошего» квазивероятностного распределения. В качестве последнего в представленной статье было выбрано квазивероятностное распределение Q , которое является неотрицательно определенным и ограниченным.

Статья имеет следующую структуру. В разд. 2 для одноатомного лазера с некогерентной накачкой, генерирующего в стационарном режиме, выводится однородное дифференциальное уравнение для усредненной по фазе Q -функции. Раздел 3 посвящен анализу выведенного уравнения в случае «классического» режима работы лазера. Находится асимптотическое решение этого уравнения, которое сравнивается с соответствующим решением для P -функции [21]. В разд. 4 с помощью найденного решения исследуется статистика фотонов в моде резонатора. Основное внимание уделено области значений параметров лазера, для которых ранее была предсказана слабая субпуассоновская статистика [19]. В разд. 5 для определенных значений параметра накачки лазера найденное асимптотическое решение приводится к простому гауссовому виду. Этот гауссов вид решения позволяет легко найти связь с ранее разработанной теорией, основанной на линеаризации уравнений Гейзенберга – Ланжевена по малым флуктуациям вблизи сильного «классического» решения [19]. В Заключение подводятся итоги проведенного исследования.

2. МОДЕЛЬ ОДНОАТОМНОГО ЛАЗЕРА. УРАВНЕНИЕ ДЛЯ УСРЕДНЕННОЙ ПО ФАЗЕ Q -ФУНКЦИИ

Рассматриваемая модель одноатомного лазера представлена одиночным двухуровневым атомом, взаимодействующим с затухающей модой резонатора. Некогерентная накачка атома с нижнего уровня $|1\rangle$ на верхний уровень $|2\rangle$ осуществляется со скоростью $\Gamma/2$. Спонтанный распад атома с верхнего уровня $|2\rangle$ на нижний $|1\rangle$ происходит со скоростью $\gamma/2$. Константа взаимодействия атома с модой резонатора обозначена как g . Затухание моды резонатора происходит со скоростью $\kappa/2$.

Уравнение для оператора плотности $\hat{\rho}$ одноатомного лазера имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = & -\frac{i}{\hbar} [\hat{V}, \hat{\rho}] + \frac{\kappa}{2} (2 \hat{a} \hat{\rho} \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{a}^\dagger \hat{a}) + \\ & + \frac{\gamma}{2} (2 \hat{\sigma} \hat{\rho} \hat{\sigma}^\dagger - \hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma}) + \\ & + \frac{\Gamma}{2} (2 \hat{\sigma}^\dagger \hat{\rho} \hat{\sigma} - \hat{\sigma} \hat{\sigma}^\dagger \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{\sigma} \hat{\sigma}^\dagger), \end{aligned} \quad (1)$$

где \hat{a}^\dagger, \hat{a} — операторы соответственно рождения и уничтожения фотонов в моде резонатора; $\hat{\sigma}^\dagger = |2\rangle\langle 1|$, $\hat{\sigma} = |1\rangle\langle 2|$ — операторы атомных переходов; $\hat{V} = i\hbar g (\hat{a}^\dagger \hat{\sigma} - \hat{\sigma}^\dagger \hat{a})$ — оператор взаимодействия атома с модой резонатора, \hbar — приведенная постоянная Планка. Физический смысл каждого слагаемого в правой части (1) определяется соответствующей скоростной константой.

Будем рассматривать диагональное представление антинормально упорядоченного оператора плотности $\hat{\rho}(z, z^*)$, которое определяется следующим образом:

$$\hat{\rho} = \int \hat{\rho}(z, z^*) |z\rangle\langle z| d^2z, \quad (2)$$

где $|z\rangle$ — когерентное состояние поля, $d^2z \equiv d\text{Re}[z]d\text{Im}[z]$ и $\text{Re}[z]$, $\text{Im}[z]$ — действительная и мнимая части комплексного числа z . Используя известные правила перехода [32]

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger \hat{\rho} & \rightarrow z^* \hat{\rho}(z, z^*), \\ \hat{a} \hat{\rho} & \rightarrow \left(z + \frac{\partial}{\partial z^*} \right) \hat{\rho}(z, z^*), \\ \hat{\rho} \hat{a} & \rightarrow z \hat{\rho}(z, z^*), \\ \hat{\rho} \hat{a}^\dagger & \rightarrow \left(z^* + \frac{\partial}{\partial z} \right) \hat{\rho}(z, z^*) \end{aligned} \quad (3)$$

и вводя функции

$$\begin{aligned} \rho_{ik}(z, z^*) & = \langle i | \hat{\rho}(z, z^*) | k \rangle, \quad i, k = 1, 2, \\ D(z, z^*) & = \rho_{22}(z, z^*) - \rho_{11}(z, z^*) \end{aligned}$$

и Q -функцию

$$Q(z, z^*) = \rho_{11}(z, z^*) + \rho_{22}(z, z^*),$$

из уравнения (1) можно легко получить систему дифференциальных уравнений в частных производных:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\kappa}{2} \left(zQ + \frac{\partial Q}{\partial z^*} \right) - g\rho_{21} \right] + \\ &+ \frac{\partial}{\partial z^*} \left[\frac{\kappa}{2} \left(z^*Q + \frac{\partial Q}{\partial z} \right) - g\rho_{12} \right], \\ \frac{\partial D}{\partial t} &= (\Gamma - \gamma)Q - (\Gamma + \gamma)D + \\ &+ \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\kappa}{2} zD - g\rho_{21} \right] + \frac{\partial}{\partial z^*} \left[\frac{\kappa}{2} z^*D - g\rho_{12} \right] - \\ &- 2g \left[z^* \rho_{21} + z \rho_{12} \right] + \kappa \frac{\partial^2 D}{\partial z \partial z^*}, \\ \frac{\partial \rho_{21}}{\partial t} &= -\frac{\Gamma + \gamma}{2} \rho_{21} + \frac{\kappa}{2} \left[\frac{\partial}{\partial z} z \rho_{21} + \frac{\partial}{\partial z^*} z^* \rho_{21} \right] + \\ &+ g \left[zD + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z^*} (D - Q) \right] + \kappa \frac{\partial^2 \rho_{21}}{\partial z \partial z^*}. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь и далее, для того чтобы избежать громоздкость выражений, у квазивероятностей опущены скобки с комплексными аргументами z, z^* .

Физический смысл дополнительных функций ρ_{21} и D следует из их средних значений:

$$\langle D \rangle = \langle \rho_{22} \rangle - \langle \rho_{11} \rangle \equiv \langle \hat{\sigma}_z \rangle = \int D d^2z$$

— атомная инверсия,

$$\langle \rho_{21} \rangle = \langle \rho_{12} \rangle^* \equiv \langle \hat{\sigma} \rangle = \int \rho_{21} d^2z$$

— среднее значение атомной поляризации.

Первое уравнение в системе (4) можно переписать в виде уравнения неразрывности

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \text{div } \mathbf{J} = q, \quad (5)$$

где определены дивергенция $\text{div} = (\partial/\partial z, \partial/\partial z^*)$ и вектор тока квазивероятности $\mathbf{J} = (J, J^*)$, $J = -\kappa/2(z + \partial/\partial z^*)Q$. Источник $q = -g(\partial\rho_{21}/\partial z + \partial\rho_{12}/\partial z^*)$ также может быть записан через дивергенцию некоторого вектора.

Перейдем к новым полярным координатам (I, φ) , таким что $z = \sqrt{I}e^{i\varphi}$, и определим усредненные по фазе φ квазивероятностные распределения как

$$\begin{aligned} Q(I) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} Q(I, \varphi) d\varphi, \\ D(I) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} D(I, \varphi) d\varphi, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\rho_{12}(I) = \rho_{21}^*(I) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi} \rho_{12}(I, \varphi) d\varphi.$$

Тогда в стационарном случае из уравнения неразрывности (5) можно получить следующую связь между $Q(I)$ и суммой когерентностей $\rho_\Sigma(I) = \rho_{21}(I) + \rho_{12}(I)$:

$$\rho_\Sigma(I) = \frac{\kappa}{g} \sqrt{I} \left[Q(I) + \frac{dQ(I)}{dI} \right]. \quad (7)$$

Из двух последних уравнений системы (4) в стационарном случае имеем

$$\begin{aligned} (\Gamma - \gamma)Q(I) - (\Gamma + \gamma)D(I) - 2g\sqrt{I}\rho_\Sigma(I) &= \\ = \frac{d}{dI} \left[g\sqrt{I}\rho_\Sigma(I) - \kappa ID(I) - \kappa I \frac{dD(I)}{dI} \right], \\ (\Gamma + \gamma)\rho_\Sigma(I) + \frac{\kappa}{2I}\rho_\Sigma(I) - \\ - 2g\sqrt{I} \left[2D(I) + \frac{d}{dI} (D(I) - Q(I)) \right] &= \\ = 2\kappa \frac{d}{dI} I \left[\rho_\Sigma(I) + \frac{d\rho_\Sigma(I)}{dI} \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

Используя (7), можно исключить из системы (8) функцию $\rho_\Sigma(I)$ и получить систему двух дифференциальных уравнений относительно неизвестных функций $Q(I)$ и $D(I)$.

Наша задача состоит в получении одного дифференциального уравнения для функции $Q(I)$. Но первое уравнение в системе (8) (говорим о системе (8), подразумевая, что $\rho_\Sigma(I)$ исключена из нее при помощи (7)) является дифференциальным уравнением второго порядка относительно функции $D(I)$, а второе — первого порядка относительно той же функции $D(I)$. Поэтому, для того чтобы исключить из (8) $D(I)$, $dD(I)/dI$ и $d^2D(I)/dI^2$, нужно добавить к этой системе еще одно уравнение, которое содержало бы вторую производную функции $D(I)$. Это уравнение можно получить, продифференцировав второе уравнение в системе (8).

Опуская промежуточные элементарные вычисления, выпишем окончательный результат:

$$\sum_{\nu=0}^5 p_\nu(I) Q^{(\nu)}(I) = 0, \quad (9)$$

$$\begin{aligned}
p_5(I) &= b_{02}I^2 + b_{03}I^3, \\
p_4(I) &= b_{11}I + b_{12}I^2 + b_{13}I^3, \\
p_3(I) &= b_{20} + b_{21}I + b_{22}I^2 + b_{23}I^3, \\
p_2(I) &= b_{30} + b_{31}I + b_{32}I^2 + b_{33}I^3, \\
p_1(I) &= b_{40} + b_{41}I + b_{42}I^2, \\
p_0(I) &= b_{50} + b_{51}I + b_{52}I^2,
\end{aligned}$$

где введено обозначение $Q^{(\nu)}(I) \equiv d^\nu Q(I)/dI^\nu$ и коэффициенты $b_{ik} = b_{ik}(\Gamma, \gamma, \kappa, g)$ выписаны в Приложении.

Таким образом, искомое уравнение для усредненной по фазе Q -функции является однородным дифференциальным уравнением пятого порядка с полиномиальными коэффициентами. Напомним, что соответствующее уравнение для усредненной по фазе P -функции является уравнением второго порядка [21].

3. ФУНКЦИЯ $Q(I)$ ДЛЯ ОДНОАТОМНОГО ЛАЗЕРА, РАБОТАЮЩЕГО В «КЛАССИЧЕСКОМ» РЕЖИМЕ

Далее, как и в работах [19, 21], будем использовать следующие три безразмерных параметра: безразмерный параметр накачки $r = \Gamma/\gamma$, безразмерный коэффициент насыщения $I_s = \gamma/\kappa$ и безразмерную константу связи (кооперативный параметр) $c = 4g^2/\gamma\kappa$.

Как упоминалось выше, в статье [21] для рассматриваемого одноатомного лазера было выведено уравнение для усредненной по фазе P -функции $P(I)$. Это уравнение представляет собой однородное дифференциальное уравнение второго порядка с полиномиальными коэффициентами. В «классическом» режиме, когда произведение $cI_s \gg 1$ (т. е. $g/\kappa \gg 1$), в этом уравнении можно выделить малый параметр $\lambda \approx 1/cI_s$, стоящий при старшей производной. Используя теорию возмущений, авторы статьи [21] нашли порождающее решение $P_0(I)$ этого уравнения (формула (50) в [21]), являющееся решением дифференциального уравнения первого порядка.

В случае «хорошего» резонатора $I_s \gg 1$ функция $P_0(I)$ хорошо описывает статистические свойства одноатомного лазера. В частности, с ее помощью можно описать некоторые результаты, получающиеся из решения системы уравнений Гейзенберга – Ланжевена путем их линеаризации по малым флуктуациям вблизи сильного «классического» решения [19, 21] (далее «линейная» теория). Выпишем результаты этой «линейной» теории:

$$\begin{aligned}
I_0(r, I_s, c) &= \frac{I_s}{2} \left[(r-1) - \frac{(r+1)^2}{c} \right], \\
Q_f^{lin}(r, c) &= \frac{2c^2 - c(r-5)(r+1) + 3(r+1)^3}{2c^2 \left[(r-1) - \frac{(r+1)^2}{c} \right]}. \quad (10)
\end{aligned}$$

Здесь $I_0 \approx \langle \hat{n} \rangle \equiv \langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle$ – классическая внутрирезонаторная интенсивность (сильное «классическое» решение), а $Q_f^{lin} \approx Q_f = (\langle \hat{n}^2 \rangle - \langle \hat{n} \rangle^2) / \langle \hat{n} \rangle - 1$ – Q -параметр Манделя для поля (верхний индекс «lin» указывает на то, что это результат «линейной» теории).

Формулы (10) имеют смысл для $c > 8$ и для $r \in (r_{th}, r_q)$, где r_{th} – пороговое значение параметра накачки и r_q – значение параметра накачки, при котором происходит эффект самотушения. Явные выражения для r_{th}, r_q получаются из уравнения $I_0 = 0$:

$$r_{th} = r_m - \frac{c}{2} \sqrt{1 - \frac{8}{c}}, \quad r_q = r_m + \frac{c}{2} \sqrt{1 - \frac{8}{c}}, \quad (11)$$

где $r_m = c/2 - 1$ значение накачки, когда интенсивность I_0 достигает своего максимума $I_m = I_s(c/8 - 1)$.

Результаты (10) предсказывают незначительную субпуассоновскую статистику фотонов в моде резонатора [21]. При $c \approx 200$ и выше и для значений параметра накачки, близких к $r = c/5$, Q -параметр Манделя Q_f^{lin} становится отрицательным и при $c \rightarrow \infty$ принимает значение равно -0.05 . P -функция в этой области значений параметров демонстрирует неклассическое поведение [22] – становится отрицательно определенной и неограниченной, а у приближенного решения $P_0(I)$ появляется существенно особая точка, близкая к I_0 , не позволяющая подтвердить результаты «линейной» теории.

Отметим, что для рассматриваемой модели одноатомного лазера выявленное минимальное значение Q -параметра Манделя равно -0.15 [13, 24]. Такая субпуассоновская статистика связана с эффектом антигруппировки фотонов, который лучше всего проявляется в режиме малого числа фотонов в моде резонатора $rI_s \approx 1$ ($\Gamma \approx \kappa$) [24]. Однако в рассматриваемом нами «классическом» режиме, т. е. в режиме, когда существуют решения (10), этот эффект ослаблен присутствием большого числа фотонов, некогерентно накопленных в моде и обладающих относительно большим стохастическим временем жизни.

Теперь перейдем к выделению малого параметра $\lambda \approx 1/cI_s$ в уравнении (9) и попробуем получить соответствующее порождающее решение для Q -функции. Будем действовать так же, как и в работе [21].

Для этого перепишем полиномы $p_\nu(I)$, выделив в них корни:

$$\begin{aligned} p_5(I) &= b_{03}I^2(I - I_{00}), \\ p_4(I) &= b_{13}I(I - I_{11})(I - I_{12}), \\ p_3(I) &= b_{23}(I - I_{21})(I - I_{22})(I - I_{23}), \\ p_2(I) &= b_{33}(I - I_{31})(I - I_{32})(I - I_{33}), \\ p_1(I) &= b_{42}(I - I_{-4})(I - I_{+4}), \\ p_0(I) &= b_{52}(I - I_{-5})(I - I_{+5}), \end{aligned} \quad (12)$$

где в последних двух полиномах обозначения корней аналогичны обозначениям в работе [21].

Коэффициенты при двух последних полиномах $b_{42}, b_{52} \sim cI_s$, а коэффициенты при всех остальных полиномах порядка единицы. Поэтому в режиме $cI_s \gg 1$ заменим уравнение (9) на приближенное уравнение первого порядка

$$b_{42}(I - I_{-4})(I - I_{+4})Q^{(1)}(I) + b_{52}(I - I_{-5})(I - I_{+5})Q(I) = 0. \quad (13)$$

Решение этого уравнения имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} Q_0(I) &= N_0 \left(1 - \frac{I}{I_{-4}}\right)^{f_1} \times \\ &\times \left| \left(1 - \frac{I}{I_{+4}}\right) \right|^{f_2} \exp\left(-\frac{b_{52}}{b_{42}}I\right), \quad (14) \\ f_1 &= -\frac{b_{52}}{b_{42}} \frac{(I_{-4} - I_{-5})(I_{-4} - I_{+5})}{I_{-4} - I_{+4}}, \\ f_2 &= \frac{b_{52}}{b_{42}} \frac{(I_{+4} - I_{-5})(I_{+4} - I_{+5})}{I_{-4} - I_{+4}}, \end{aligned}$$

где N_0 — нормировочная константа, а нижний индекс «0» у функции указывает на то, что это решение является порождающим в задаче с малым параметром.

Найденное решение (14) по своей структуре практически полностью совпадает с соответствующим порождающим решением $P_0(I)$ для P -функции (см. формулу (50) в [21]). Однако у решения (14) есть некоторые преимущества, связанные с тем, что Q -функция неотрицательно определена и ограничена. Так, экспонента в (14), в связи с положительностью отношения $b_{52}/b_{42} > 0$, убывает при возрастании аргумента I . Напротив, функция $P_0(I)$, найденная в [21], экспоненциально возрастает при $I \rightarrow \infty$, что явилось одной из причин искусственного ограничения ее области определения.

Первая скобка $(1 - I/I_{-4})$ в правой части (14) всегда положительна, так как корень $I_{-4} < 0$. Вторая скобка $(1 - I/I_{+4})$ становится отрицательной

для $I > I_{+4}$ (корень $I_{+4} > 0$), а следовательно, $Q_0(I)$ принимает комплексное значение, что недопустимо для Q -функции. Однако для случая «хорошего» резонатора, $I_s \gg 1$, значение корня I_{+4} близко к тем значениям переменной I , для которых Q -функция — пренебрежимо малая величина. Для случая «плохого» резонатора, $I_s \sim 1$, $I_s \ll 1$, значение корня I_{+4} находится в области значений переменной I , где Q -функция не является малой. Если же ограничивать область определения функции $Q_0(I)$ отрезком $[0, I_{+4}]$, как это было сделано для функции $P_0(I)$ в [21], то это может приводить к нефизическим результатам. Поэтому скобка $(1 - I/I_{+4})$ в (14) взята под знак модуля.

Отметим несколько особенностей решения (14), которые есть и у функции $P_0(I)$. Корень I_{-5} практически полностью повторяет решение для классической внутрирезонаторной интенсивности (10), т. е. $I_{-5} \approx I_0$. В случае «хорошего» резонатора, вблизи максимума классического решения I_0 , выполняется приближенное равенство $I_{+4} \approx I_{+5}$.

Анализ уравнения (9) показывает, что решение (14) не может быть использовано для описания работы лазера в случае, когда параметр накачки много меньше порогового значения r_{th} . В этом случае, учитывая, что основные изменения Q -функции происходят в области малых значений переменной I , можно рассмотреть уравнение, получающееся из (9) путем пренебрежения в полиномах всеми степенями переменной I , т. е.

$$b_{20}Q^{(3)}(I) + b_{30}Q^{(2)}(I) + b_{40}Q^{(1)}(I) + b_{50}Q(I) = 0. \quad (15)$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$Q(I) = N_0 \exp(I/a), \quad (16)$$

где константа $a < 0$ является действительным корнем полиномиального уравнения

$$b_{20}x^3 + b_{30}x^2 + b_{40}x + b_{50} = 0.$$

Эта константа при $r \rightarrow 0, \infty$ стремится к минус единице, т. е. в этих предельных случаях Q -функция описывает вакуумное состояние моды:

$$Q(I) = e^I/\pi.$$

Таким образом, решение (16) описывает тепловое излучение со средним числом фотонов равным $\langle \hat{n} \rangle = -(a + 1)$.

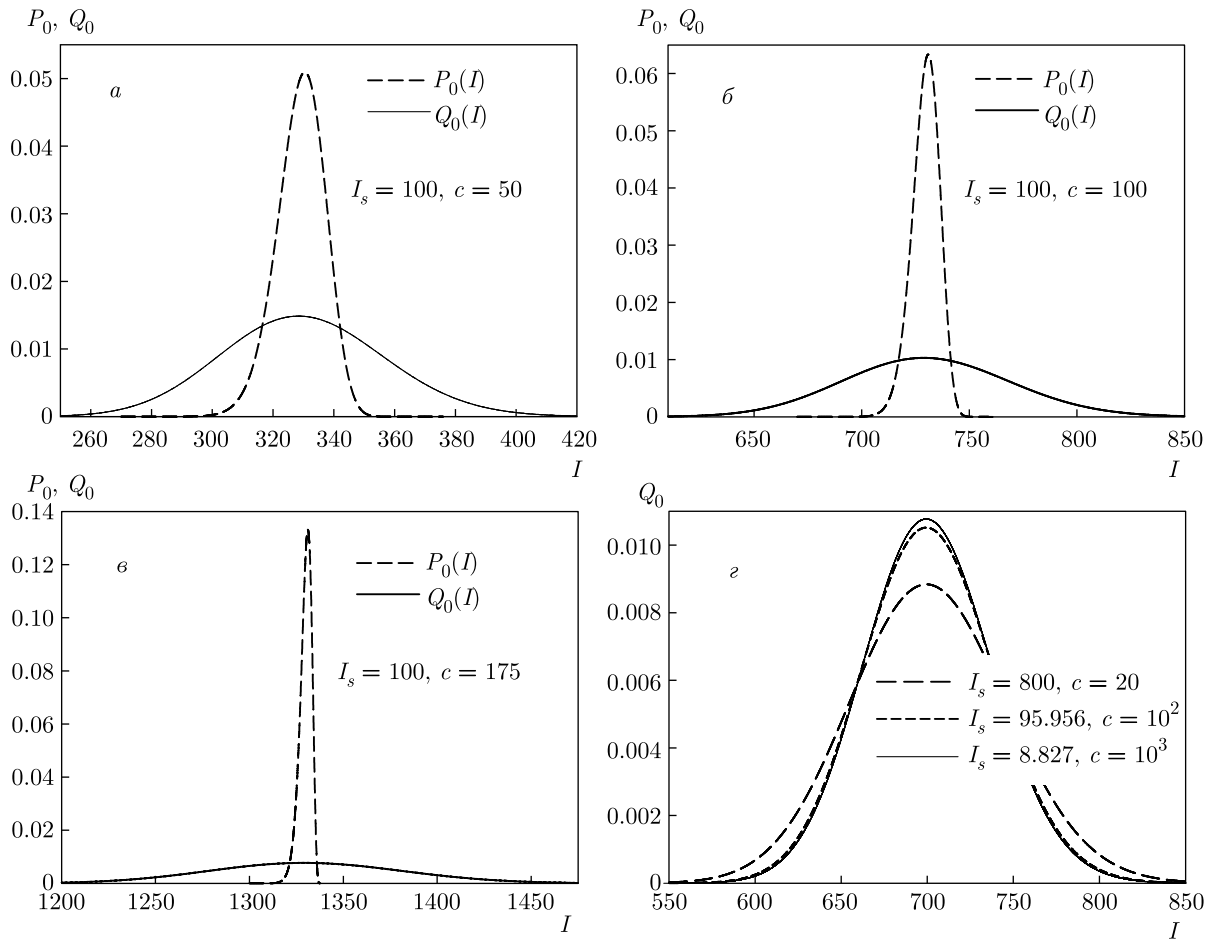


Рис. 1. Сравнение поведения функций $P_0(I)$ [21] и $Q_0(I)$ (14): а) $I_s = 100, c = 50$; б) $I_s = 100, c = 100$; в) $I_s = 100, c = 175$. г) Поведение функции $Q_0(I)$ (14) при переходе в режим сильной связи

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

На рис. 1 сравнивается поведение функций $P_0(I)$ [21] и $Q_0(I)$ (14) при переходе в режим, близкий к режиму сильной связи $c \gg I_s$ (т.е. $g \gg \gamma$ — связь атома с полем во много раз сильнее, чем связь атома с резервуаром, обеспечивающим его спонтанный распад вне моды резонатора). Для всех графиков $r = c/5$, т.е. выбрано значение параметра накачки, при котором Q-параметр Мандела Q_f^{lin} (10) принимает минимальное значение. Видно, что увеличение константы связи c при фиксированном I_s приводит к все более узкому и выраженному пику для функции $P_0(I)$. При $c = 175$ заметна несимметричность этой функции, связанная с ограниченностью ее области определения. Для $c \approx 200$ у функции $P_0(I)$ появляется особенность (аналогичная особенность наблюдалась в [24, 25]), которая не позволяет вычислить интересные средние величины. При дальнейшем увеличении константы связи c эта особенность ух-

одит за область определения функции $P_0(I)$, но вычисление средних дает неправдоподобные результаты. Функция $Q_0(I)$, как и следовало ожидать, не имеет никаких особенностей и позволяет легко вычислять интересные средние величины.

В табл. 1 для значений параметров лазера, соответствующих рис. 1а,б,в, представлены результаты «линейной» теории (10) (в таблице обозначены как Lin) и результаты, полученные с помощью функций $P_0(I)$ и $Q_0(I)$. Видно хорошее согласие между различными подходами.

На рис. 1г, все также для $r = c/5$, представлено поведение функции $Q_0(I)$ при переходе в режим сильной связи. При этом параметры c, I_s подобраны так, чтобы классическая внутрирезонаторная интенсивность была равна $I_0 = 700$. В табл. 2 приведены соответствующие значения $\langle \hat{n} \rangle$ и Q_f .

В табл. 2 только первые два верхних блока соответствуют графикам на рис. 1г. Нижний блок относится к режиму сильной связи и «плохого» ре-

Таблица 1

Рис. 1а	$I_s = 100, c = 50$
Lin	$I_0 = 329, Q_f^{lin} = 0.19$
P_0	$\langle \hat{n} \rangle = 329.1, Q_f = 0.19$
Q_0	$\langle \hat{n} \rangle = 329.1, Q_f = 0.19$
Рис. 1б	$I_s = 100, c = 100$
Lin	$I_0 = 729.5, Q_f^{lin} = 0.056$
P_0	$\langle \hat{n} \rangle = 729.6, Q_f = 0.056$
Q_0	$\langle \hat{n} \rangle = 729.6, Q_f = 0.057$
Рис. 1в	$I_s = 100, c = 175$
Lin	$I_0 = 1329.7, Q_f^{lin} = 0.0075$
P_0	$\langle \hat{n} \rangle = 1329.8, Q_f = 0.008$
Q_0	$\langle \hat{n} \rangle = 1329.8, Q_f = 0.0084$

Таблица 2

Рис. 1г	$I_s = 95.95, c = 10^2$
Lin	$I_0 = 700, Q_f^{lin} = 0.056$
P_0	$\langle \hat{n} \rangle = 700.1, Q_f = 0.056$
Q_0	$\langle \hat{n} \rangle = 700.1, Q_f = 0.057$
Рис. 1з	$I_s = 8.83, c = 10^3$
Lin	$I_0 = 700, Q_f^{lin} = -0.04$
P_0	$\langle \hat{n} \rangle = \text{UnPh}, Q_f = \text{UnPh}$
Q_0	$\langle \hat{n} \rangle = 700.1, Q_f = -0.039$
	$I_s = 0.87, c = 10^4$
Lin	$I_0 = 700, Q_f^{lin} = -0.049$
P_0	$\langle \hat{n} \rangle = \text{UnPh}, Q_f = \text{UnPh}$
Q_0	$\langle \hat{n} \rangle = 700.1, Q_f = -0.047$

зонатора, $I_s = 0.87$ (график не приведен, так как он практически совпадает с графиком для случая $c = 10^3$). Из приведенных значений видно, что найденная Q -функция $Q_0(I)$ (14) хорошо описывает слабую субпуассоновскую статистику, предсказанную «линейной» теорией. Случай «плохого» резонатора и случаи $c \approx 200, c > 200$ функция $P_0(I)$ описать не может (аббревиатура UnPh в табл. 2 означает нефизический результат, Unphysical result).

На рис. 2 сравниваются результаты «линейной» теории с результатами, полученными с помощью решений (14), (16). Для случая «хорошего» резонатора, $I_s \gg 1$, и для значений параметра накачки, лежащих между r_{th} и r_q (рис. 2а,б,в), оба подхода полностью согласуются друг с другом. Характерный пороговый пик для Q -параметра Манделя [19] и пик, обусловленный эффектом «запирания» атома в возбужденном состоянии, хорошо описывается найденной функцией (14). Для значений параметра накачки, лежащих много ниже классического порога r_{th} , решение (14) дает нефизический результат для Q -параметра Манделя. Для получения результатов в этом случае использовано решение (16) (синяя пунктирная кривая).

На рис. 2б рассматривается переход в режим сильной связи, когда возникает слабая субпуассоновская статистика фотонов, предсказанная «линейной» теорией. Как видно из рисунка, найденная функция $Q_0(I)$ (14) полностью описывает этот квантовый эффект.

Режим «плохого» резонатора $I_s \sim 1$ рассмотрен на рис. 2г. Графики для Q -параметра Манделя Q_f^{lin} (10), в силу его естественной зависимости только от параметров r, c , полностью совпадают с графиками на рис. 2б. Из сравнения с численными расчетами видно, что результаты, полученные с помощью «линейной» теории (10), лучше описывают переход в субпуассоновский режим. Для «плохого» резонатора функция $Q_0(I)$ (14) дает только качественный результат. Однако в пределе $c \rightarrow \infty$ результаты, полученные с помощью функции $Q_0(I)$ (14), совпадут с результатами «линейной» теории.

5. АППРОКСИМАЦИЯ ФУНКЦИИ $Q_0(I)$ ГАУССОВЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ

Рассмотрим режим «хорошего» резонатора, $I_s \gg 1$, и значения параметра накачки, близкие к r_m (10), (11). Учтем, что в рассматриваемом случае $I_{+4} \approx I_{+5}$ и $I_{-5} \approx I_0$. Отсюда $f_1 \approx (b_{52}/b_{42})(I_0 - I_{-4})$, $f_2 \approx 0$ и (14) можно переписать следующим образом:

$$Q_0(I) = N_0 \left(1 + \frac{\Delta I}{I_0 - I_{-4}} \right)^{(b_{52}/b_{42})(I_0 - I_{-4})} \times \exp \left(-\frac{b_{52}}{b_{42}} \Delta I \right), \quad (17)$$

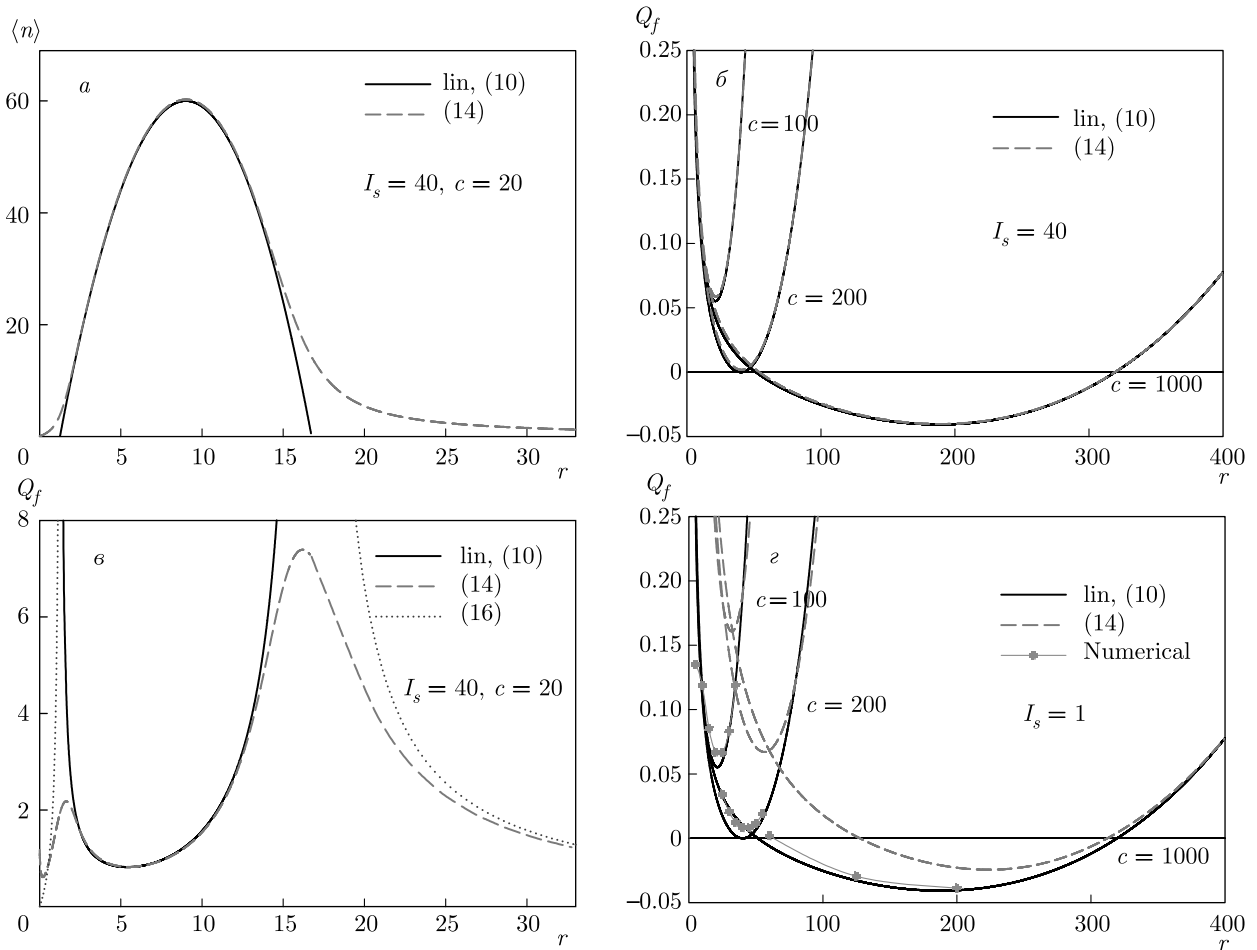


Рис. 2. (В цвете онлайн) Сравнение результатов «линейной» теории (10) с результатами, полученными с помощью функции $Q_0(I)$ (14). *а, в*) Зависимости среднего числа фотонов $\langle n(r) \rangle$ и Q -параметра Манделя $Q_f(r)$ от параметра накачки r ; $I_s = 40, c = 20$. *б, г*) Зависимости Q -параметра Манделя $Q_f(r)$ от параметра накачки r . Переход в режим сильной связи: *б*) «хороший» резонатор, $I_s = 40$; *г*) «плохой» резонатор, $I_s = 1$. Зеленые точки — численный расчет

где $\Delta I = I - I_0$ и $I_0 - I_{-4} \gg 1$. Функция (17) имеет максимум, соответствующий значениям I , близким к классическому решению I_0 , т.е. для $\Delta I \approx 0$. Тогда в области значений переменной I , для которых (17) не является пренебрежимо малой, т.е. для I , не слишком удаленных от значения I_0 , можно сделать следующее разложение предэкспоненциального множителя:

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{\Delta I}{I_0 - I_{-4}}\right)^{-(I_0 - I_{-4})} &= \\ &= \exp\left[-(I_0 - I_{-4}) \ln\left(1 + \frac{\Delta I}{I_0 - I_{-4}}\right)\right] \approx \\ &\approx \exp\left[-\Delta I + \frac{(\Delta I)^2}{2(I_0 - I_{-4})}\right]. \end{aligned} \tag{18}$$

Подставляя (18) в (17) видим, что Q -функция принимает вид гауссовой функции:

$$Q_0(I) = N_0 \exp\left[-\frac{(\Delta I)^2}{2\sigma^2}\right], \tag{19}$$

где дисперсия $\sigma^2 = (I_0 - I_{-4}) b_{42}/b_{52}$ определяется решениями (10),

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \pi \int_0^\infty I^2 Q_0(I) dI - \left(\pi \int_0^\infty I Q_0(I) dI\right)^2 = \\ &= 1 + I_0 (2 + Q_f^{lin}). \end{aligned} \tag{20}$$

Таким образом, как это следует из (20), решение (19) описывает слабую субпуассоновскую статистику фотонов в режиме резонатора. В самом деле, по определению Q -параметра Манделя имеем

$$Q_f = \frac{\pi \int_0^\infty I^2 Q(I) dI - \left(\pi \int_0^\infty I Q(I) dI \right)^2 - \pi \int_0^\infty I Q(I) dI}{\pi \int_0^\infty I Q(I) dI - 1} - 1 \approx \frac{\sigma^2 - I_0 - 1}{I_0} - 1 = Q_f^{lin}. \quad (21)$$

Отметим, что для функции $P_0(I)$ в работе [21] также было получено гауссово выражение, типа (19). Однако дисперсия σ^2 в этом случае была равна произведению $I_0 Q_f^{lin}$, которое для субпуассоновской статистики фотонов становилось отрицательным, что делало функцию $P_0(I)$ неограниченной.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе на основе уравнения для усредненной по фазе Q -функции (9) исследовался стационарный режим работы одноатомного лазера с некогерентной накачкой. В «классическом» режиме ($g/\kappa \gg 1$) получено приближенное решение этого уравнения (14), (16). Это решение описывает основные особенности одноатомного лазера, в частности, позволяет описать слабую субпуассоновскую статистику фотонов в моде резонатора, ранее обнаруженную с помощью подхода, основанного на линеаризации уравнений Гейзенберга – Ланжевена вблизи сильного классического решения (10) [19, 21].

Подытоживая, можно сказать, что анализ стационарного режима работы одноатомного лазера с некогерентной накачкой может быть сведен к анализу одного линейного однородного дифференциального уравнения. Так, в случае P -функции это уравнение (41) в [21], а для Q -функции – уравнение (9) данной статьи. В рассмотренном здесь и в работе

[21] предельном случае $g/\kappa \gg 1$ в упомянутых дифференциальных уравнениях появляется малый параметр, который относительно легко позволяет найти приближенные решения этих уравнений.

В конце отметим, что уравнение (9) также анализировалось в работе [25], где рассматривался частный случай $\Gamma \approx \kappa$, т.е. случай малого числа фотонов в моде резонатора. Для произвольных значений отношения g/κ анализ уравнения (9) был затруднителен. Только в предельном случае $g/\Gamma \approx g/\kappa \rightarrow \infty$ были найдены точные аналитические решения уравнения (9), одно из которых совпадает с решением (16). В случае малого числа фотонов более плодотворным оказался подход, основанный на анализе бесконечной системы алгебраических уравнений для различных моментов полевых операторов [33]. Возможно, именно этот подход для некоторых частных случаев позволит найти точные решения для средних величин, характеризующих одноатомный лазер [34].

Финансирование. Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2020-0024).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Коэффициенты b_{ik} из уравнения (9) равны

$$\begin{aligned} b_{02} &= -\frac{1}{2} [1 + I_s(r + 1)], & b_{03} &= 1; \\ b_{11} &= -3 [1 + I_s(r + 1)], \\ b_{12} &= \frac{1}{2} [7 - 3I_s(r + 1)], & b_{13} &= 3; \\ b_{20} &= -3 [1 + I_s(r + 1)], \\ b_{21} &= \frac{1}{4} [-21 - 26I_s(r + 1) + 3I_s^2(r + 1)^2], \\ b_{22} &= -3 [-4 + I_s(r + 1)], & b_{23} &= 3; \\ b_{30} &= \frac{1}{2} [-15 - 8I_s(r + 1) + 3I_s^2(r + 1)^2], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
b_{31} &= -\frac{1}{2}I_s \left[c(1 + I_s(r + 1)) - (r + 1)(-13 + 3I_s(r + 1)) \right], \\
b_{32} &= \frac{1}{2} [23 + I_s(2c - 7(r + 1))], \quad b_{33} = 1; \\
b_{40} &= \frac{1}{4} \left[-24 + I_s(r + 1 - 3c) - I_s^3(r + 1)(c + (r + 1)^2) + I_s^2(8(r + 1)^2 - c(3r + 4)) \right], \\
b_{41} &= \frac{1}{4} \left[15 - 2I_s(c + 10(r + 1)) + I_s^2(5(r + 1)^2 - 2c(2r + 1)) \right], \\
b_{42} &= \frac{1}{2} [7 + I_s(4c - 3(r + 1))]; \\
b_{50} &= \frac{1}{4} \left[-6 + I_s(5(r + 1) - 3c) + I_s^3(r + 1)(c(r - 1) - (r + 1)^2) + I_s^2(2(r + 1)^2 - 4c) \right], \\
b_{51} &= \frac{1}{2} [3 - 4I_s(r + 1) + I_s^2((r + 1)^2 - 2cr)], \quad b_{52} = cI_s.
\end{aligned} \tag{22}$$

ЛИТЕРАТУРА

1. I. R. Berchera and I. P. Degiovanni, *Metrologia* **56**, 024001 (2019).
2. V. D'ambrosio, N. Spagnolo, L. Del Re et al., *Nat. Commun.* **4**, 2432 (2013).
3. S. Pogorzalek, K. G. Fedorov, M. Xu et al., *Nat. Commun.* **10**, 2604 (2019).
4. К. С. Тихонов, А. Д. Манухова, С. Б. Королёв, Т. Ю. Голубева, Ю. М. Голубев, *Опт. и спектр.* **127**, 811 (2019).
5. J. Shi, G. Patera, D. V. Horoshko, and M. I. Kolobov, *J. Opt. Soc. Amer. B* **37**, 3741 (2020).
6. S. Ritter, C. Nolleke, C. Hahn et al., *Nature* **484**, 195 (2012).
7. С. О. Тарасов, С. Н. Андрианов, Н. М. Арсланов, С. А. Моисеев, *Изв. РАН, сер. физ.* **82**, 1148 (2018).
8. Е. Н. Попов, В. А. Решетов, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 846 (2020).
9. А. А. Sokolova, G. P. Fedorov, E. V. P'ichev, and O. V. Astafiev, *Phys. Rev. A* **103**, 013718 (2021).
10. Д. Ф. Смирнов, А. С. Трошин, *УФН* **153**, 233 (1987).
11. S. Ya. Kilin and T. B. Krinitskaya, *J. Opt. Soc. Amer. B* **8**, 2289 (1991).
12. Yi Mu and C. M. Savage, *Phys. Rev. A* **46**, 5944 (1992).
13. А. В. Козловский, А. Н. Ораевский, *ЖЭТФ* **115**, 1210 (1999).
14. B. Jones, S. Ghose, J. P. Clemens, P. R. Rice, and L. M. Pedrotti, *Phys. Rev. A* **60**, 3267 (1999).
15. Т. Б. Карлович, С. Я. Килин, *Опт. и спектр.* **91**, 374 (2001).
16. С. Я. Килин, Т. Б. Карлович, *ЖЭТФ* **122**, 933 (2002).
17. Т. Б. Карлович, С. Я. Килин, *Опт. и спектр.* **103**, 288 (2007).
18. Т. Б. Карлович, *Опт. и спектр.* **111**, 758 (2011).
19. N. V. Larionov and M. I. Kolobov, *Phys. Rev. A* **84**, 055801 (2011).
20. S. Ya. Kilin and A. V. Mikhalychev, *Phys. Rev. A* **85**, 063817 (2012).
21. N. V. Larionov and M. I. Kolobov, *Phys. Rev. A* **88**, 013843 (2013).
22. E. N. Popov and N. V. Larionov, *Proc. SPIE* **9917**, 99172X (2016), DOI:10.1117/12.2229228.
23. В. А. Бобрикова, Р. А. Хачатрян, К. А. Баранцев, Е. Н. Попов, *Опт. и спектр.* **127**, 976 (2019).

24. N. V. Larionov, *Proc. 2020 IEEE Int. Conf. on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech)*, 265 (2020), DOI: 10.1109/EExPolytech50912.2020.9243955.
25. N. V. Larionov, *J. Phys.: Conf. Ser.* **2103**, 012158 (2021), DOI: 10.1088/1742-6596/2103/1/012158.
26. B. Parvin, *Eur. Phys. J. Plus* **136**, 728 (2021).
27. D. B. Horoshko, Chang-Shui Yu, and S. Ya. Kilin, *J. Opt. Soc. Amer. B* **38**, 3088 (2021).
28. J. McKeever, A. Boca, A. D. Boozer, J. R. Buck, and H. J. Kimble, *Nature* **425**, 268 (2003).
29. M. Nomura, N. Kumagai, S. Iwamoto, Y. Ota, and Y. Arakawa, *Opt. Express* **17**, 15975 (2009).
30. F. Dubin, C. Russo, H. G. Barros A. Stute, C. Becher, P. O. Schmidt, and R. Blatt, *Nat. Phys.* **6**, 350 (2010).
31. А. Найфэ, *Введение в методы возмущений*, Мир, Москва (1984).
32. Л. Мандель, Э. Вольф, *Оптическая когерентность и квантовая оптика*, Физматлит, Москва (2000).
33. G. S. Agarwal and S. Dutta Gupta, *Phys. Rev. A* **42**, 1737 (1990).
34. Ф. М. Федоров, *Бесконечные системы линейных алгебраических уравнений и их приложения*, Наука, Новосибирск (2011).

ВЫХОД γ -КВАНТОВ ОТ РЕАКЦИЙ ЯДЕРНОГО СИНТЕЗА В МЮОННЫХ МОЛЕКУЛАХ $pt\mu$ И $pd\mu$

А. Адамчак^a, В. А. Баранов^b, Л. Н. Богданова^c, В. П. Вольных^b,
О. П. Вихлянцев^d, С. С. Герштейн^e, К. И. Грицай^b, Д. Л. Демин^{b*},
В. Н. Дугинов^b, А. Д. Конин^b, И. П. Максимкин^d, Р. К. Мусяев^d,
А. И. Руденко^b, М. П. Файфман^f, С. В. Фильчагин^d, А. А. Юхимчук^d

^a Институт ядерной физики Польской академии наук
31-342, Краков, Польша

^b Объединенный институт ядерных исследований
141980, Дубна, Московская обл., Россия

^c Институт теоретической и экспериментальной физики им. А. И. Алиханова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»
117218, Москва, Россия

^d Российский федеральный ядерный центр
«Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики»
607188, Саров, Нижегородская обл., Россия

^e Институт физики высоких энергий им. А. А. Логунова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»
142281, Протвино, Московская обл., Россия

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

Поступила в редакцию 18 июня 2021 г.,
после переработки 26 октября 2021 г.
Принята к публикации 27 октября 2021 г.

Измерен выход гамма-квантов от реакций ядерного синтеза, идущих из различных спиновых состояний мюонных молекул $pt\mu$ и $pd\mu$. Работа выполнена на установке «Тритон» в ЛЯП ОИЯИ с применением специально созданной жидкотриетивой мишени. Впервые наблюдались каналы реакции синтеза с выходом двойных γ -квантов: $pt\mu \rightarrow {}^4\text{He}\mu + \gamma + \gamma$, $pd\mu \rightarrow {}^3\text{He}\mu + \gamma + \gamma$. Полученные данные по выходу одиночных γ -квантов в канале реакции синтеза $pt\mu \rightarrow {}^4\text{He}\mu + \gamma$ хорошо согласуются с данными более ранних исследований. Экспериментально определен парциальный коэффициент прилипания мюона к ядру гелия в канале реакций pt - и pd -синтеза с выходом одного γ -кванта.

DOI: 10.31857/S0044451022020031

1. ВВЕДЕНИЕ

К настоящему времени мюонный катализ реакций синтеза в смеси изотопов водорода достаточно хорошо изучен как экспериментально, так и теоретически. Параметры μ -катализа для процессов tt -, dt -, dd - и pd -синтеза были измерены в различных

экспериментах. Исключением является только ядерная pt -реакция, протекающая в мюонной молекуле $pt\mu$.

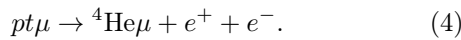
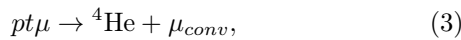
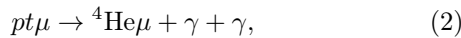
Эксперимент по изучению мюонного катализа в молекуле $pt\mu$ впервые был предложен в обзоре [1] и проведен в жидкой смеси изотопов водорода в конце 1980-х гг. на мюонном пучке PSI (Швейцария) международной коллаборацией ученых [2]. Измеренные в этом эксперименте скорости pt -синтеза в молекуле $pt\mu$ для канала с конверсией мюона существенно (до

* E-mail: demin@jinr.ru

300 раз) превышали расчеты теории. Это расхождение было одним из побудительных мотивов для выполнения нового эксперимента [3].

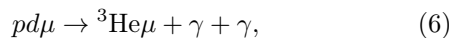
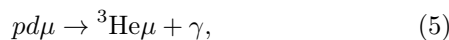
Для исследования были выбраны параметры жидководородной смеси, наиболее близкие к используемым в эксперименте [2]. Основные преимущества нашего эксперимента заключались в низком фоне γ -квантов, связанном с работой ускорителя, использовании двух гамма-детекторов и высокой эффективности регистрации продуктов мюонного катализа.

Проведено исследование следующих каналов синтеза в мюонной молекуле $pt\mu$ с выделением энергии синтеза $E \approx 19.8$ МэВ:



Суммарный спин $p + t$ ядер в мю-молекуле $pt\mu$ в начальном состоянии реакций (1)–(4) имеет [1] значения $I = 1^+$ или $I = 0^+$, а основное состояние ядра ${}^4\text{He}$ есть 0^+ , поэтому в конечное состояние возможен только М1-переход $1^+ \rightarrow 0^+$ в реакции (1) и Е0-переход $0^+ \rightarrow 0^+$ в реакциях (2)–(4).

Также изучались каналы ядерной pd -реакции с испусканием γ -квантов в молекуле $pd\mu$:



для которых энергия синтеза $E \approx 5.5$ МэВ. Переход в основное состояние $(1/2)^+$ ядра ${}^3\text{He}$ в реакции (5) является переходом М1 из pd -состояний с суммарным спином $I = (1/2)^+$ и $I = (3/2)^+$, а реакция (6) осуществляется посредством Е0-перехода из pd -состояния со спином $I = (1/2)^+$. Отметим, что каналы (1) и (3) наблюдались ранее в единственном эксперименте [2] по изучению реакций мюонного катализа в мюонной молекуле $pt\mu$. Реакции (2) и (4) не наблюдались, в том числе и в экспериментах на пучках. Только в ходе настоящих экспериментальных исследований удалось впервые обнаружить каналы реакции (2), (4) и (6). Также наблюдалась реакция (1) с освободившимся мюоном. В данной работе представлено исследование каналов реакции (1), (2) и (5), (6) с выходом γ -квантов.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

Эксперимент выполнялся на установке «Тригон» [4], расположенной на пучке отрицательных

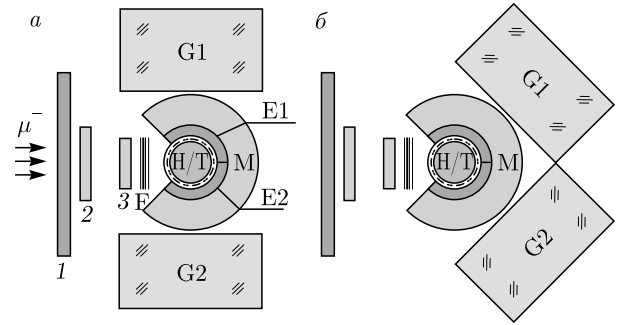


Рис. 1. Схема эксперимента: а) для экспозиций I, II, IV; б) для экспозиции III. 1, 2, 3 — счетчики пучка мюонов, F — медный замедлитель мюонов, Н/Т — мишень, Е1, Е2 — детекторы электронов, М — детектор мюонов, G1, G2 — детекторы γ -квантов

Таблица 1. Параметры экспериментальных экспозиций: c_t и c_d — содержание трития и дейтерия, α — угол между γ -детекторами, N_μ — число оставшихся в мишени мюонов

Эксп.	c_t , % [5]	c_d , %	α	N_μ
I	0.84 ± 0.01	0.023 ± 0.01	180°	10^7
II	0.10 ± 0.01	0.016 ± 0.01	180°	10^7
III	0.10 ± 0.01	0.016 ± 0.01	110°	10^7
IV	0	$0.011 \div 0.016$ [7]	180°	10^6

мюонов фазотрона Лаборатории ядерных проблем им. В. П. Джелепова ОИЯИ. Использовался пучок с импульсом 100 МэВ/с и интенсивностью 10^4 с $^{-1}$. Схема эксперимента представлена на рис. 1.

Для проведения эксперимента была изготовлена мишень с рабочим объемом 50 см 3 [5]. Мишень заполнялась жидким водородом при температуре 22 К с небольшим содержанием тяжелых изотопов водорода. Для регистрации γ -квантов использовались те же γ -детекторы G1 и G2 на основе кристаллов ВГО, которые применялись ранее в эксперименте [6]. Электроны от распада мюонов в мишени и e^+e^- -пары от реакции (4) регистрировались детекторами электронов Е1 и Е2. Конверсионные мюоны от реакции (3) регистрировались детектором мюонов М, толщина которого была выбрана из условия гарантированной остановки мюона конверсии в теле детектора. Методика эксперимента и обработки данных детально описана в работе [3].

При проведении эксперимента осуществлялась запись осциллограмм событий с детекторов G1, G2,

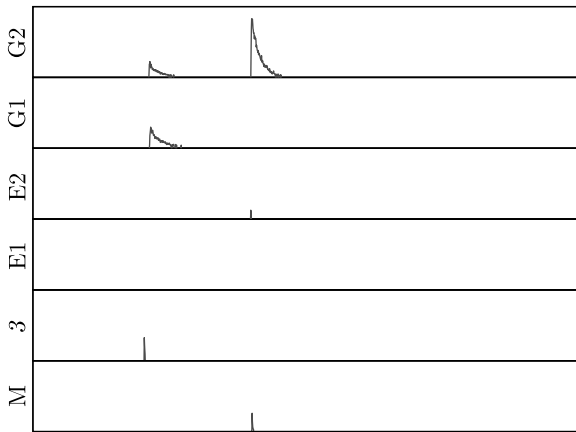


Рис. 2. Оциллограмма экспериментального события с выходом пары γ -квантов от реакции (2). Изображены сигналы с детекторов в соответствии с обозначениями на рис. 1. Масштаб рисунка по времени — 20 мкс

E1, E2, M и счетчика 3 пучка мюонов. Было выполнено четыре экспериментальные экспозиции: три с тритием (две концентрации трития при разных углах расположения γ -детекторов) и одна с водородом. Во всех экспозициях содержание дейтерия в водороде внутри мишени было близко к природной концентрации дейтерия. Параметры экспозиций, в том числе содержание дейтерия, обобщены в табл. 1.

3. НАБЛЮДЕНИЕ ДВОЙНЫХ γ -КВАНТОВ

На рис. 2 в качестве примера изображена оциллограмма впервые наблюдаемого экспериментального события мюонного катализа, соответствующего реакции (2).

Первый по времени сигнал — остановка мюона в мишени (сигнал в счетчике 3), вторая группа сигналов (G1, G2) — регистрация γ -квантов одновременно в двух γ -детекторах, третья группа сигналов (M, E2, G2) — регистрация одного и того же электрона от распада мюона в мишени ($\mu^- \rightarrow e^- + \nu_\mu + \bar{\nu}_e$). Для реакции (6) оциллограмма события подобна, отличие заключается в сумме энергий двух γ -квантов.

Суммарный по двум γ -детекторам энергетический спектр показан на рис. 3: гистограмма на рис. 3а — спектр, соответствующий реакциям (2) и (6), наблюдался в экспозициях II+III, на рис. 3б — спектр, отвечающий только реакции (6), поскольку в экспозиции IV не было трития.

Суммарный энергетический спектр для экспозиций I и II (подобный спектру на рис. 3а) содержит γ -кванты как от реакции (2) (пик 19.8 МэВ), так

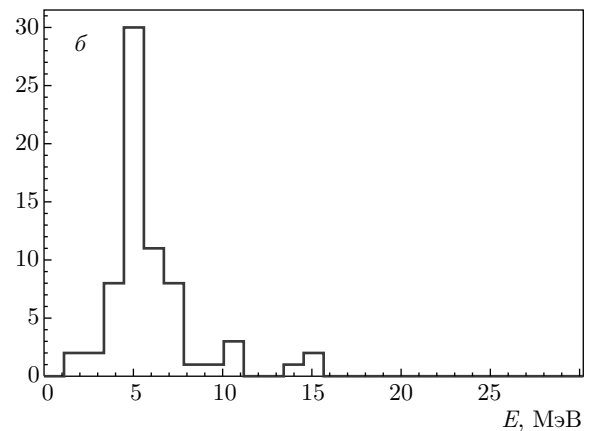
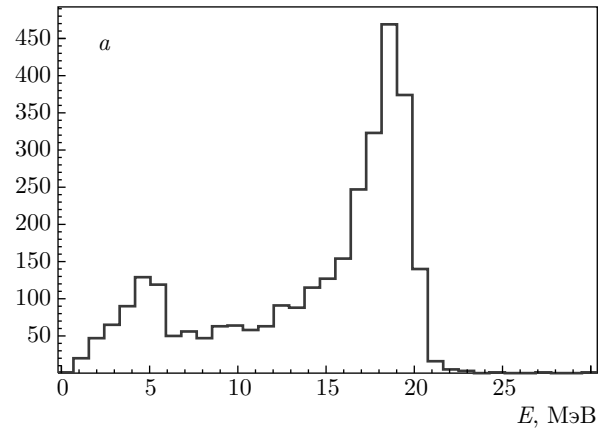


Рис. 3. Суммарный экспериментальный энергетический спектр двойных γ -квантов: а) экспозиции II+III, б) экспозиция IV

и от реакции (6) (пик 5.5 МэВ), которая протекала благодаря наличию в водороде примеси природного дейтерия. Последнее обстоятельство позволило определить процентные отношения $Y_{pd}^0(2\gamma)/Y_{pt}^0(2\gamma)$ выходов двойных γ -квантов в каналах реакций (6) и (2):

$$\frac{Y_{pd}^0(2\gamma)}{Y_{pt}^0(2\gamma)} = \begin{cases} 7.6\% & \text{для экспозиции I,} \\ 13.4\% & \text{для экспозиции II.} \end{cases} \quad (7)$$

Здесь учтен расчет эффективностей регистрации, составивших величины 0.94% и 1.43% для каналов реакций соответственно (6) и (2). Ошибка в определении процентного отношения выходов не превышает 15%. Экспозиция III была исключена из рассмотрения по причине большого вклада перерасеяния γ -квантов от реакции (5), в силу взаимного расположения детекторов G1 и G2. Кроме того, из-за недостаточной статистики не удалось определить скорость ядерного перехода в реакции (6).

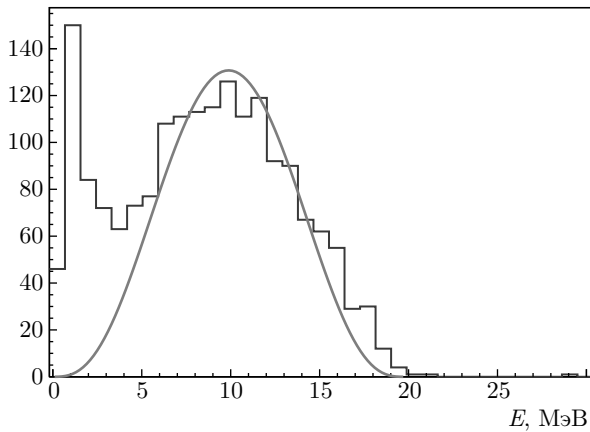


Рис. 4. Экспериментальный (гистограмма) и модельный (сплошная линия) спектры энергии одного из двух γ -квантов от реакции (2) (экспозиция III)

Экспериментальный спектр энергии одного γ -кванта от реакции (2) (энергетический спектр зарегистрированных γ -квантов в одном из γ -детекторов G1 или G2 при наличии сигнала в другом) и соответствующий ему модельный теоретический спектр изображены на рис. 4. Они находятся в хорошем качественном согласии даже при том, что крылья экспериментального распределения содержат события с перерассеянием (составившие наибольший вклад в экспозиции III, когда γ -детекторы были приближены друг к другу). Для определения скорости ядерного перехода в реакции (2) отбирались γ -кванты из центральной области этого спектра с целью уменьшения систематической ошибки. Пик в районе 1 МэВ обусловлен перерассеянием одиночных γ -квантов из одного γ -детектора в другой (из G1 в G2 и наоборот).

Спектр, изображенный на рис. 4 сплошной линией, представляет собой теоретическое распределение, которое следует из предположения о двухфотонном $E0$ -переходе между уровнями ядерной ${}^4\text{He}^*$ -системы при ее девозбуждении в основное состояние. Механизм такого монополярного перехода $0 \rightarrow 0$ хорошо известен в атомной физике, например, двухфотонный переход $2S^{1/2} \rightarrow 1S^{1/2}$ в атоме водорода, который играет важную роль в эволюции горячей Вселенной. Соответствующее распределение фотона по энергиям имеет [8] вид $\sim E_\omega^3 (E - E_\omega)^3$, где E_ω — энергия одного γ -кванта из пары, а E — энергия перехода (в нашем случае $E \approx 19.8$ МэВ), причем максимум распределения отвечает значению энергии $E/2$.

С целью исследования зависимости выхода γ -квантов от угла их вылета в реакции (2) прове-

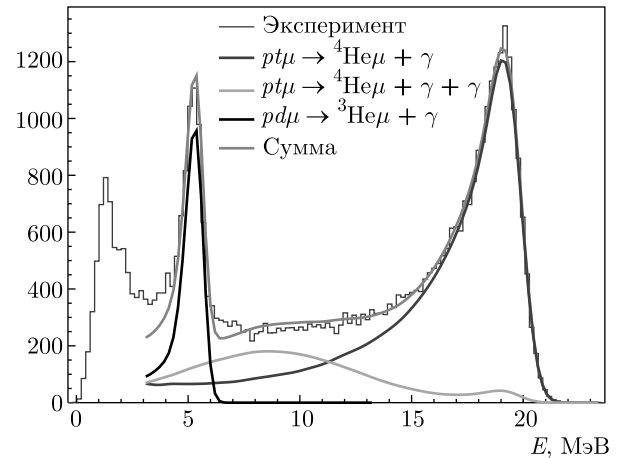


Рис. 5. (В цвете онлайн) Энергетический спектр одиночных γ -квантов для экспозиции I: гистограмма — экспериментальный спектр; синяя, зеленая, черная линии — результат моделирования отклика γ -детектора для каналов реакций (1), (2), (5) соответственно, красная линия — суммарный моделированный отклик

дены экспозиции II и III с разным расположением γ -детекторов относительно мишени. Существенной зависимости выхода γ -квантов от угла вылета в реакции (2) обнаружено не было.

4. НАБЛЮДЕНИЕ ОДИНОЧНЫХ γ -КВАНТОВ

Обнаружение новых каналов синтеза с выходом двух γ -квантов (2) и (6) способствовало выяснению причины искажения экспериментальных спектров в предыдущем исследовании [2]: имея в распоряжении всего один γ -детектор, экспериментаторы не могли отделить канал с двойными γ -квантами и регистрировали их как относящиеся к каналу реакции (1) с выходом одиночного γ -кванта. На примере рис. 5 видно, как искажается экспериментальный энергетический спектр одиночных γ -квантов, если регистрировать только один γ -квант из пары от канала реакции (2) при их относительно высоком выходе. Но в действительности такой экспериментальный спектр одиночных γ -квантов состоит из

- γ -квантов от каналов реакций (1), (2), (5);
- γ -квантов от каскадного излучения мюонов, перехваченных более тяжелыми атомами стенок мишени, куда диффундируют мезоатомы $d\mu$ и $t\mu$ (пик 1.6 МэВ);
- γ -квантов от реакций радиационного захвата нейтрона ядром водорода в мишени (пик 2.2 МэВ);

Таблица 2. Эффективность регистрации ϵ и экспериментальный относительный выход $Y^0(\gamma)/\sum Y^0(\gamma)$ в каналах реакций для экспозиций I и II. Ошибка в определении относительных выходов не превышает 5%

Канал реакции	ϵ	$Y^0(\gamma)/\sum Y^0(\gamma)$	
		I	II
$pt\mu \rightarrow {}^4\text{He}\mu + \gamma$	11.7%	67.3%	28.7%
$pt\mu \rightarrow {}^4\text{He}\mu + 2\gamma$ (учтен один из пары)	18.2%	14.3%	7.4%
$pd\mu \rightarrow {}^3\text{He}\mu + \gamma$	10.2%	18.4%	63.9%

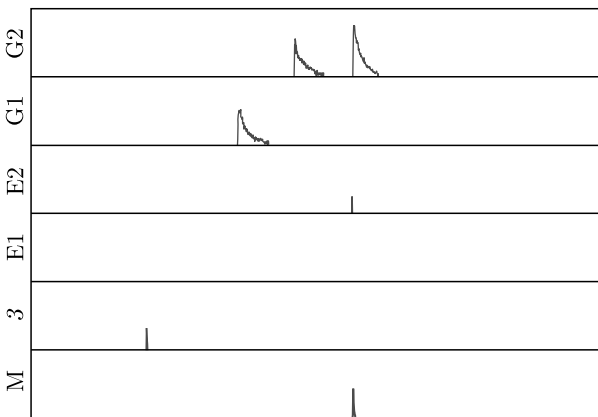


Рис. 6. Оциллограмма экспериментального события с выходом двух последовательных γ -квантов. Масштаб рисунка по времени — 20 мкс

— типичного отклика кристалла ВГО на быстрые нейтроны [9].

Отметим, что источником коррелированного по времени нейтронного фона являются реакции синтеза в мюонных молекулах $dd\mu$ и $dt\mu$. Несмотря на малую концентрацию тяжелых изотопов водорода в мишени, благодаря высокой скорости образования мюонных молекул $dd\mu$ и $dt\mu$, испускаются нейтроны, которые заметно искажают левое крыло экспериментального спектра одиночных γ -квантов.

Относительные выходы (табл. 2) для каналов реакций (1), (2) и (5) были определены в результате фитирования экспериментального спектра функцией суммарного моделированного отклика детектора с учетом расчетных эффективностей. Расчет эффективностей регистрации ϵ проводился методом Монте-Карло с использованием программы GEANT4.

Таблица 3. Абсолютные выходы Y^0 , скорости реакций λ и парциальный коэффициент прилипания ω_s

Канал реакции	Величина	Значение	Эксп.
$pt\mu \rightarrow {}^4\text{He}\mu + \gamma$	λ_{pt}^γ , мкс ⁻¹	0.078(4)	I
	$Y^0(\gamma)$, %	3.28(5)	I
	$Y^0(\gamma)$, %	2.47(5)	II
	$Y^0(\gamma)$, %	2.55(25)	III
	ω_s , %	0.991(1)	I
$pt\mu \rightarrow {}^4\text{He}\mu + 2\gamma$	$\lambda_{pt}^{2\gamma}$, мкс ⁻¹	0.15(6)	I
	$\lambda_{pt}^{2\gamma}$, мкс ⁻¹	0.14(5)	II, III
	$Y^0(2\gamma)$, %	1.61(6)	I
	$Y^0(2\gamma)$, %	1.44(6)	II
	$Y^0(2\gamma)$, %	1.51(16)	III
$pd\mu \rightarrow {}^3\text{He}\mu + \gamma$	λ_{pd}^γ , мкс ⁻¹	0.25(4)	IV
	$Y^0(\gamma)$, %	15.3(2.3)	IV
	ω_s , %	0.994(1)	IV
$pd\mu \rightarrow {}^3\text{He}\mu + 2\gamma$	$Y^0(2\gamma)$, %	0.5(0.1)	IV

В каждой экспозиции с тритием удалось зарегистрировать несколько десятков последовательных одиночных γ -квантов. Пример осциллограммы такого события (см. обозначения на рис. 1) приведен на рис. 6.

Подобные события наблюдались также в экспозиции IV. Это позволило оценить парциальный (отнесенный к выходу в канале реакции с одиночным γ -квантом) коэффициент ω_s прилипания мюона к радиогенному гелию [10] при синтезе в мюонных молекулах $pt\mu$ и $pd\mu$ методом регистрации последовательных событий мюонного катализа [11].

5. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ

В табл. 3 представлены результаты обработки данных эксперимента, проведенной по методике, детально описанной в работе [3]. Основные систематические ошибки возникали при выделении одиночных γ -квантов на фоне двойных и в обратном случае.

Абсолютные выходы $Y^0(y)$ продуктов y реакций вычислялись по формуле $Y^0(y) = N_y/[N_\mu\epsilon(y)f_t]$, где N_y — число зарегистрированных продуктов реакции, N_μ — число мюонов, остановившихся в мишени, $\epsilon(y)$ — эффективность регистрации, $f_t = 0.668$ —

временной фактор, возникающий из налагаемого условия $0.5 \leq t(y) - t(e) \leq 4.5$, где $t(y)$ и $t(e)$ — времена (в мкс) регистрации продукта реакции и электрона от распада мюона соответственно. В качестве числа мюонов, остановившихся в мишени, принималось число зарегистрированных электронов при условии $t(e) - t(\mu) \geq 0.5$ мкс, где $t(\mu)$ — время останова мюона в мишени. Эффективность регистрации продуктов мюонного катализа получена моделированием физических процессов в мишени и детекторах с помощью программы GEANT4.

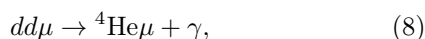
Скорость ядерной реакции λ^y определялась путем фитирования временного спектра продукта y соответствующего канала реакции.

Парциальный коэффициент прилипания ω_s вычислялся из соотношения $1 - \omega_s = N_{\gamma seq} / (N_{\gamma e}(\gamma))$, где $N_{\gamma seq}$ — число зарегистрированных событий с выходом двух последовательных γ -квантов (рис. 6). Полученные значения, представленные в табл. 3, близки к теоретическим оценкам [12].

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ

Основным результатом данной работы является первое наблюдение двойных γ -квантов в выходном канале реакции pt -синтеза, протекающей в мюонной молекуле $pt\mu$. Достоверность такого события подтверждается согласованностью эксперимента и теории (двухфотонный $E0$ -переход), а также величиной полученной скорости $\lambda_{pt}^{2\gamma}$ (табл. 3), которая в пределах ошибок совпадает со скоростью $E0$ -перехода, измеренной в работе [2], в предположении, что этот переход отвечает реакции с конверсией мюона (3), обусловленной образованием виртуального фотона.

Здесь уместно отметить, что ранее в эксперименте [6] по изучению редкого радиационного канала dd -синтеза ядер в мю-молекуле $dd\mu$:



наблюдалось порядка ста событий, удовлетворяющих критериям отбора для γ -квантов, имеющих энергию в соответствии с конечным состоянием реакции синтеза (1) с выходом одиночных γ -квантов. Одно из наиболее вероятных объяснений состоит в том, что этот процесс (1) протекает не в связанном состоянии мюонной системы $pt\mu$ (молекуле), а «на лету», когда «горячий» мюонный атом трития, образовавшийся как продукт более вероятной реакции $dd\mu \rightarrow t\mu + p$, сталкивается с молекулой HD в атмосфере плотного дейтерия. Заметим также, что в проанализированных данных того же эксперимента [6]

не удалось выделить события, которые отвечали бы реакции $dd\mu \rightarrow {}^4\text{He}\mu + 2\gamma$.

В то же время проведенные в данной работе исследования показывают возможность измерения выхода реакции (6) даже при естественном содержании дейтерия в водороде.

Предварительные результаты настоящего эксперимента были представлены на Международной конференции NTINER-18 [13]. Обработка полученных экспериментальных данных, необходимых для детального описания каналов (3) и (4), в настоящее время продолжается.

Благодарности. Авторы признательны за помощь в работе Л. И. Пономареву, К. Петижану, Г. Д. Ширкову, Н. А. Русаковичу, В. В. Кобецу, Г. М. Тер-Акопяну, Д. В. Философову, А. С. Фомичеву, А. П. Кустову, А. И. Богуславскому.

Финансирование. Работа авторов, являющихся сотрудниками ОИЯИ, была выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 12-02-00089-а).

ЛИТЕРАТУРА

1. Я. Б. Зельдович, С. С. Герштейн, УФН **71**, 581 (1960).
2. P. Baumann, H. Daniel, S. Grunewald, F. J. Hartmann, R. Lipowsky, E. Moser, W. Schott, T. von Egidy, P. Ackerbauer, W. H. Breunlich, M. Fuchs, M. Jeitler, P. Kammel, J. Marton, N. Nagele, J. Werner, J. Zmeskal, H. Bossy, K. M. Crowe, R. H. Sherman, K. Lou, C. Petitjean, and V. E. Markushin, Phys. Rev. Lett. **70**, 3720 (1993).
3. L. N. Bogdanova, D. L. Demin, V. N. Duginov, V. V. Filchenkov, K. I. Gritsaj, A. D. Konin, T. N. Mamedov, A. I. Rudenko, V. A. Stolupin, Yu. I. Vinogradov, V. P. Volnykh, and A. A. Yukhimchuk, Phys. Part. Nucl. Lett. **9**, 605 (2012).
4. А. А. Юхимчук, Ю. И. Виноградов, А. Н. Голубков, С. К. Гришечкин, А. М. Демин, Д. Л. Демин, В. В. Перевозчиков, А. М. Родин, Г. М. Тер-Акопян, В. М. Харитонов, ВАНТ, сер. Термоядерный синтез **36**(3), 26 (2013).
5. А. А. Yukhimchuk, I. P. Maksimkin, R. K. Musyaev, I. L. Malkov, V. V. Baluev, S. V. Filchagin, O. P. Vikhlyantsev, A. V. Kuryakin, A. D. Tumkin, A. I. Gurkin, A. V. Buchirin, D. L. Demin, and A. D. Konin, Instr. Exp. Techniq. **62**, 464 (2019).

6. V. V. Baluev, L. N. Bogdanova, V. R. Bom, D. L. Demin, C. W. E. van Eijk, V. V. Filchenkov, N. N. Grafov, S. K. Grishechkin, K. I. Gritsaj, A. D. Konin, K. L. Mikhailyukov, A. I. Rudenko, Yu. I. Vinogradov, V. P. Volnykh, A. A. Yukhimchuk, and S. A. Yukhimchuk, *JETP* **113**, 68 (2011).
7. *Химическая энциклопедия*, т. 1, под ред. И. Л. Кнунянц и др., Советская энциклопедия, Москва (1988), с. 623.
8. Л. Н. Лабзовский, *Теория атома. Квантовая электродинамика электронных оболочек и процессы излучения*, Наука, Физматлит, Москва (1996).
9. O. Hausser, M. A. Lone, T. K. Alexander, S. A. Kushneriuk, and J. Gascon, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res.* **213**, 301 (1983).
10. С. С. Герштейн, Ю. В. Петров, Л. И. Пономарев, *УФН* **160**, 3 (1990).
11. Л. И. Меньшиков, Л. Н. Сомов, *УФН* **160**, 47 (1990).
12. D. I. Abramov, L. N. Bogdanova, V. V. Gusev, and L. I. Ponomarev, *Нур. Int.* **101/102**, 301 (1996).
13. A. Adamczak, V. V. Baluev, L. N. Bogdanova, D. L. Demin, V. N. Duginov, M. P. Faifman, S. V. Filchagin, K. I. Gritsaj, A. D. Konin, I. P. Maksimkin, T. N. Mamedov, R. K. Musyayev, A. I. Rudenko, Z. U. Usubov, O. P. Vikhlyantsev, V. P. Volnykh, and A. A. Yukhimchuk, *Proceedings of the Conference "New Trends in High-Energy Physics"*, Budva, Becici, Montenegro, 2018 (NTIHEP-18), Dubna: JINR, pp. 156–172 (2019).

DIFFERENTIABLE PROGRAMMING FOR PARTICLE PHYSICS SIMULATIONS

R. Grinis^{***}

*Moscow Institute of Physics and Technology
141700, Dolgoprudny, Moscow Region, Russia*

Received August 24, 2021,
revised version August 24, 2021
Accepted for publication October 6, 2021

DOI: 10.31857/S0044451022020043

Abstract. We describe how to apply adjoint sensitivity methods to backward Monte-Carlo schemes arising from simulations of particles passing through matter. Relying on this, we demonstrate derivative based techniques for solving inverse problems for such systems without approximations to underlying transport dynamics. We are implementing those algorithms for various scenarios within a general purpose differentiable programming C++17 library NOA (github.com/grinisrit/nea).

1. Overview of the main results. In this paper, we explore the challenges and opportunities that arise in integrating differentiable programming (DP) with simulations in particle physics.

In our context, we will broadly refer to DP as a program for which some of the inputs could be given the notion of a variable, and the output of that program could be differentiated with respect to them.

Most common examples include the widely used deep learning (DL) models created over the powerful automatic differentiation (AD) engines such as TensorFlow and PyTorch. Since their initial release, those machine learning (ML) frameworks grew up into fully-fledged DP libraries capable of tackling a more diversified set of tasks.

Recently, a very fruitful interaction between DP as we know it in ML and numerical solutions to differen-

tial equations started to gather pace with the work of Chen et al. [1]. A whole new area tagged now-days Neural Differential Equations arose in scientific ML.

On one hand, using ML we obtain a more flexible framework with a wealth of new tools to tackle a variety of inverse problems in mathematical modeling. On the other hand, many techniques in the latter such as the adjoint sensitivity methods give rise to new powerful algorithms for AD.

A few implementations are now available:

— `torchdiffeq` is the initial python package developed by [1] providing ODE solvers that not only integrate with PyTorch DL models, but also use those to describe the dynamics;

— `torchsde` builds off from `torchdiffeq` and provides the same functionality for SDEs, as well as $\mathcal{O}(1)$ -memory gradient computation algorithms, see [2];

— `diffeqflux` is a Julia package developed by Rackauckas et al. [3] and relies on a rich scientific ML ecosystem treating many different types of equations including PDEs.

Unsurprisingly, one can also find roots of this story in computational finance, see for example the work of Giles et al. [4]. An AD algorithm is presented there for computing the risk sensitivities for a portfolio of options priced through Monte-Carlo simulation. That set-up is close to our case of interest and therefore represents a great source of inspiration for us.

In fact, for particle physics simulations a similar picture is left almost unexplored so far. The dynamics are richer than the ones considered before, but we also

* E-mail: roland.grinis@grinisrit.com

** GrinisRIT ltd., London, UK

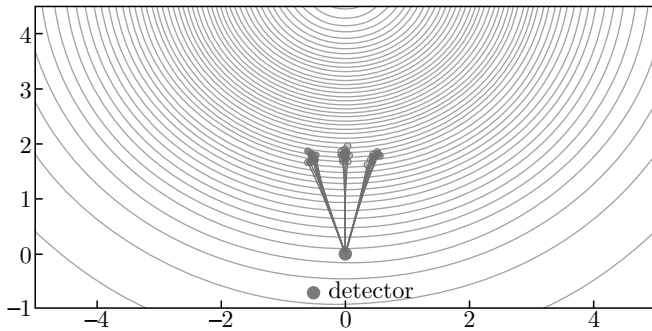


Fig. 1. (Color online) This is a toy example. The contours correspond to level sets of the materials mixture given by a Gaussian centered at $\vartheta_\mu = (0, 5)$ with scale $\vartheta_\sigma = \sqrt{10}$. In blue we show the BMC simulated trajectories. For the sake of simplicity, we assume the known particle flux is constant equals to one and is reached after two steps. A naive implementation of the BMC scheme to compute the flux in this configuration can be found in the Appendix, routine `backward_mc 1`. There is, however, a challenge with the approach consisting in differentiating through the MC simulation with AD. The algorithm is not scalable in the number of steps for the discretisation of the transport. This issue can be addressed by adjoint sensitivity methods. The routine `backward_mc_grad 2` in the Appendix provides an implementation with first order derivative for the BMC scheme in this example

have more tools at our disposal such as the Backward Monte-Carlo (BMC) techniques [5, 6]. We make use of the latter to adapt the adjoint sensitivity methods [7] to the transport of particles through matter simulations.

Ultimately, we obtain a novel methodology for image reconstruction problems when the absorption mechanism is non-linear. In future, one can demonstrate this approach in the specific case of muography. We are releasing our implementations within the open source library NOA [8].

The results are shown in Figs. 1–3.

2. Conclusion. In this paper, we have demonstrated how to efficiently integrate automatic differentiation and adjoint sensitivity methods with BMC schemes arising in the passage of particles through matter simulations.

We believe that this builds a whole new bridge between scientific machine learning and inverse problems arising in particle physics. In future, we hope to prove the success of this technique in a variety of image reconstruction problems with non-linear dynamics, starting with muography.

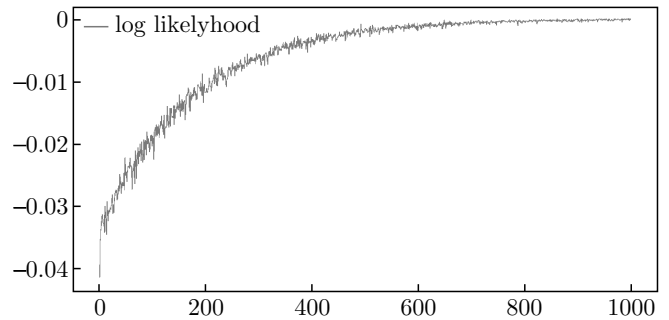


Fig. 2. After implementing BMC over LibTorch’s Autograd library we can use a gradient based optimisation to solve the inverse problem for ϑ_μ and ϑ_σ . Let us set $\vartheta_\mu = (-1, 5)$ arbitrarily. We present SGD convergence over 1000 steps with learning rate 0.05, reaching $\hat{\vartheta}_\mu = (-1.0033, 4.9891)$ and $\hat{\vartheta}_\sigma^2 = 9.9611$ in good agreement with true values

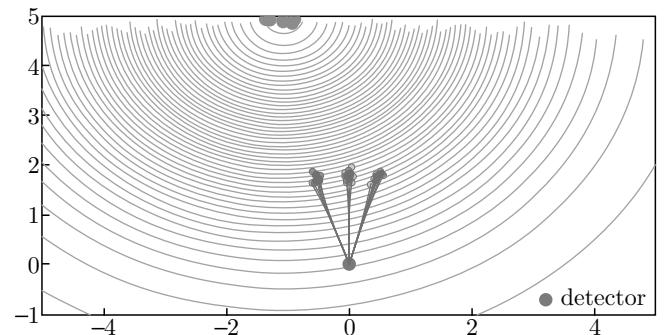


Fig. 3. (Color online) Optimal parameters and Bayesian posterior sampled using NOA [8] implementation of Riemannian HMC with an explicit symplectic integrator

Acknowledgments. I would like to thank the MIPT–NPM lab and A. Nozik in particular for very fruitful discussions that have led to this work. We are very grateful to GrinisRIT for the support.

This work has been initially presented at the QUARKS-2020 workshop — serie “Advanced Computing in Particle Physics”.

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

Appendix. Code examples. We have collected here the two BMC implementations for our basic example. You can reproduce all the calculations in this paper from the notebook `differentiable_programming_pms.ipynb` available in NOA [8].

For the specific code snippets here the only dependency is LibTorch:

```
#include <torch/torch.h>
```

The following routine will be used throughout and provides the rotations by a tensor angles for multiple scattering:

```
inline torch::Tensor rot(const torch::Tensor &angles)
{
  const auto n = angles.numel();
  const auto c = torch::cos(angles);
  const auto s = torch::sin(angles);
  return torch::stack({c, -s, s, c}).t().view({n, 2, 2});
}
```

Given the set-up in Fig. 1 example we define:

```
const auto detector = torch::zeros(2);
const auto materialA = 0.9f;
const auto materialB = 0.01f;

inline const auto PI = 2.f * torch::acos(torch::tensor(0.f));

inline torch::Tensor mix_density(
  const torch::Tensor &states,
  const torch::Tensor &vartheta)
{
  return torch::exp(-(states - vartheta.slice(0, 0, 2))
    .pow(2).sum(-1) / vartheta[2].pow(2));
}
```

Example 1. This implementation relies completely on the AD engine for tensors. The whole trajectory is kept in memory to perform reverse-mode differentiation.

The routine accepts a tensor `theta` representing the angles for the readings on the detector, the tensor `node` encoding the mixture of the materials which is essentially our variable, and the number of particles `npar`.

It outputs the simulated flux on the detector corresponding to `theta`:

```
inline torch::Tensor backward_mc(
  const torch::Tensor &theta,
  const torch::Tensor &node,
  const int npar)
{
  const auto length1 = 1.f - 0.2f * torch::rand(npar);
  const auto rot1 = rot(theta);

  auto step1 = torch::stack({torch::zeros(npar), length1}).t();
  step1 = rot1.matmul(step1.view({npar, 2, 1})).view({npar, 2});
  const auto state1 = detector + step1;

  auto biasing = torch::randint(0, 2, {npar});
  auto density = mix_density(state1, node);
  auto weights =
    torch::where(biasing > 0,
      (density / 0.5) * materialA,
      ((1 - density) / 0.5) * materialB) *
    torch::exp(-0.1f * length1);

  const auto length2 = 1.f - 0.2f * torch::rand(npar);
  const auto rot2 = rot(0.05f * PI * (torch::rand(npar) - 0.5f));
  auto step2 =
    length2.view({npar, 1}) * step1 / length1.view({npar, 1});

  step2 = rot2.matmul(step2.view({npar, 2, 1})).view({npar, 2});
  const auto state2 = state1 + step2;

  biasing = torch::randint(0, 2, {npar});
}
```

```

density = mix_density(state2, node);
weights *=
torch::where(biasing > 0,
(density / 0.5) * materialA,
((1 - density) / 0.5) * materialB) *
torch::exp(-0.1f * length2);

// assuming the flux is known equal to one at state2
return weights;
}

```

Example 2. This routine adopts the adjoint sensitivity algorithm to earlier Example 1. It outputs the value of the flux and the first order derivative w.r.t. the tensor node:

```

inline std::tuple<torch::Tensor, torch::Tensor> backward_mc_grad(
const torch::Tensor &theta,
const torch::Tensor &node)
{
const auto npar = 1; //work with single particle
auto bmc_grad = torch::zeros_like(node);

const auto length1 = 1.f - 0.2f * torch::rand(npar);
const auto rot1 = rot(theta);
auto step1 = torch::stack({torch::zeros(npar), length1}).t();
step1 = rot1.matmul(step1.view({npar, 2, 1})).view({npar, 2});
const auto state1 = detector + step1;

auto biasing = torch::randint(0, 2, {npar});
auto node_leaf = node.detach().requires_grad_();
auto density = mix_density(state1, node_leaf);
auto weights_leaf = torch::where(biasing > 0,
(density / 0.5) * materialA,
((1 - density) / 0.5) * materialB) * torch::exp(-0.01f * length1);

bmc_grad += torch::autograd::grad({weights_leaf}, {node_leaf})[0];
auto weights = weights_leaf.detach();

const auto length2 = 1.f - 0.2f * torch::rand(npar);
const auto rot2 = rot(0.05f * PI * (torch::rand(npar) - 0.5f));
auto step2 = length2.view({npar, 1}) * step1 / length1.view({npar, 1});
step2 = rot2.matmul(step2.view({npar, 2, 1})).view({npar, 2});
const auto state2 = state1 + step2;

biasing = torch::randint(0, 2, {npar});
node_leaf = node.detach().requires_grad_();
density = mix_density(state2, node_leaf);
weights_leaf = torch::where(biasing > 0,
(density / 0.5) * materialA,
((1 - density) / 0.5) * materialB) * torch::exp(-0.01f * length2);

const auto weight2 = weights_leaf.detach();
bmc_grad = weights * torch::autograd::grad({weights_leaf}, {node_leaf})[0]
+ weight2 * bmc_grad;
weights *= weight2;

// assuming the flux is known equal to one at state2
return std::make_tuple(weights, bmc_grad);
}

```

REFERENCES

1. R. T. Q. Chen, Y. Rubanova, J. Bettencourt, and D. K. Duvenaud, in *Proc. Advances in Neural Information Processing Systems 31*, pp. 6571–6583 (2018).
2. X. Li, T.-K. L. Wong, R. T. Q. Chen, and D. K. Duvenaud, *23^d International Conference on Artificial*

- Intelligence and Statistics*, Proc. Machine Learning Res. **108**, 2677 (2020).
3. C. Rackauckas, Y. Ma, J. Martensen, C. Warner, K. Zubov, R. Supekar, D. Skinner, and A. Ramadhan, arXiv:2001.04385.
 4. L. Capriotti and M. B. Giles, *Algorithmic Differentiation: Adjoint Greeks Made Easy*, SSRN Electronic Journal (2011).
 5. L. Desorgher, F. Lei, and G. Santin, Nucl. Instrum. Meth. A **621**, 247 (2010).
 6. V. Niess, A. Barnoud, C. Carloganu, and E. Le Menedeu, Comput. Phys. Comm. **229**, 54 (2018).
 7. L. S. Pontryagin, E. F. Mishchenko, V. G. Boltyanskii, and R. V. Gamkrelidze, *The Mathematical Theory of Optimal Processes*, John Wiley S., New York, London (1962).
 8. Differentiable Programming for Optimisation Algorithms over LibTorch, <https://github.com/grinisrit/hoa>.

СИНГУЛЯРНЫЕ ФУНКЦИИ СПИНОРНОГО ПОЛЯ В КЭД С СИЛЬНЫМ ВНЕШНИМ ПОЛЕМ

А. И. Бреев^{a*}, С. П. Гаврилов^{a,b**}, Д. М. Гитман^{a,c,d***}

^a Томский государственный университет
634050, Томск, Россия

^b Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена
191186, Санкт-Петербург, Россия

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

^d Институт физики, Университет Сан-Паулу
05508-090, Сан-Паулу, Бразилия

Поступила в редакцию 29 сентября 2021 г.,
после переработки 29 сентября 2021 г.
Принята к публикации 18 октября 2021 г.

Построены и исследованы сингулярные функции в КЭД сильного поля с двумя типами внешних электромагнитных полей, которые принципиально различны. Первый тип относится к классу так называемых t -потенциальных электрических ступеней (электрические поля включаются и выключаются в начальный и конечный моменты времени), а второй — к классу так называемых x -потенциальных электрических ступеней (не зависящие от времени электрические поля постоянного направления, которые сосредоточены в ограниченном пространстве). Первый тип (T -постоянное электрическое поле) представляет собой однородное электрическое поле, которое действует в течение конечного промежутка времени T , а второй (L -постоянное электрическое поле) — постоянное электрическое поле, ограниченное двумя обкладками конденсатора, разделенными большим расстоянием L . Для обоих случаев найдены in- и out-решения уравнения Дирака в терминах переменных светового конуса. При помощи этих решений строятся интегральные представления Фока–Швингера по собственному времени для всех сингулярных функций, которые обеспечивают непертурбативные (по отношению к внешнему полю) вычисления любых амплитуд переходов и средних значений всех физических величин. Рассматривая T -постоянное и L -постоянное поля как различные регуляризации постоянного однородного электрического поля, можно показать их эквивалентность для достаточно больших T и L .

DOI: 10.31857/S0044451022020055

1. ВВЕДЕНИЕ

Квантовая электродинамика (КЭД) идеально описывает процессы с взаимодействующими заряженными частицами и фотонами. КЭД с внешним электромагнитным полем представляет собой удобную модель для рассмотрения процессов с небольшим количеством данных частиц на фоне, создаваемом огромным количеством фотонов, совокупность

которых при определенных обстоятельствах может быть описана полуклассически [1] и выглядит в модели как внешнее поле. Таким образом, в данной модели электромагнитное поле проявляется как внешнее классическое поле и фотоны, которые описываются чисто квантовым образом. Такая модель обычно называется КЭД сильного поля.

Внешнее поле в КЭД сильного поля не может трактоваться пертурбативно и должно учитываться точно, тогда как для процессов с заряженными частицами и фотонами можно построить теорию возмущений. В такой теории возмущений возникают процессы нулевого порядка без фотонов и процессы более высокого порядка с фотонами. Существенная и нетривиальная часть КЭД сильного

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

** E-mail: gavrilovsergeyp@yahoo.com

*** E-mail: dmitrygitman@hotmail.com

поля связана с процессами нулевого порядка. Рождение частиц из вакуума сильными электрическими внешними полями (эффект Швингера [2], привлекающий внимание уже давно, или, другими словами, нестабильность вакуума), по сути, является проявлением процессов нулевого порядка. Для зависящих от времени внешних электрических полей, которые включаются и выключаются в начальный и конечный моменты времени, теория возмущений с учетом радиационных поправок и с точным учетом взаимодействия с сильным внешним полем была развита в работах [3]. Данные внешние поля постоянно направления называются t -электрическими ступеньками (далее — t -ступеньками). А теория возмущений использует существенно специальные наборы точных решений уравнения Дирака для соответствующих t -ступенек (примеры, когда такие решения могут быть найдены и все вычисления могут быть выполнены аналитически, мы называем точно решаемыми случаями). Она включает в себя технику расчета процессов нулевого порядка, модифицированные правила Фейнмана для расчета амплитуд рассеяния с заряженными частицами и фотонами и теорию возмущений для расчета средних значений. Для простоты эффекты рождения частиц обычно рассматриваются в однородных внешних электрических полях, зависящих от времени.

Подходы к рассмотрению квантовых эффектов в КЭД сильного поля в t -ступеньках не применимы напрямую к КЭД сильного поля в не зависящих от времени электрических внешних полях постоянного направления, которые сосредоточены в ограниченной пространственной области, в так называемых x -ступеньках электрического потенциала (далее — x -ступеньках). В работе [4] был построен непертурбативный подход для расчета процессов нулевого порядка в КЭД сильного поля в x -ступеньках. Соответствующая техника основана на использовании специальных наборов точных решений уравнения Дирака в x -ступеньке. Эти решения представляют собой стационарные плоские волны с заданными продольными импульсами p^L и p^R в макроскопических областях слева и справа от x -ступеньки, соответственно (см. [4–6]). По аналогии с КЭД сильного поля в t -ступеньках можно построить теорию возмущений для КЭД сильного поля в критических x -ступеньках по радиационным поправкам и с точным учетом взаимодействия с сильным полем.

Сингулярные функции спинорного поля в соответствующих внешних полях (обобщающие известные сингулярные функции в стандартной КЭД, см. [7]) являются ключевыми элементами для построе-

ния теорий возмущений в КЭД сильного поля, как в t -ступеньках, так и в x -ступеньках. При этом амплитуды перехода и средние значения физических величин выражаются через причинный пропагатор (in–out-пропагатор) $S^c(X, X')$, так называемый in–in-пропагатор $S_{\text{in}}^c(X, X')$ и out–out-пропагатор $S_{\text{out}}^c(X, X')$. В свою очередь, данные сингулярные функции связаны с in- и out-вакуумом следующим образом:

$$\begin{aligned} S^c(X, X') &= i \langle 0, \text{out} | \hat{T} \hat{\Psi}(X) \times \\ &\quad \times \hat{\Psi}^\dagger(X') \gamma^0 | 0, \text{in} \rangle / \langle 0, \text{out} | 0, \text{in} \rangle, \\ S_{\text{in}}^c(X, X') &= i \langle 0, \text{in} | \hat{T} \hat{\Psi}(X) \hat{\Psi}^\dagger(X') \gamma^0 | 0, \text{in} \rangle, \\ S_{\text{out}}^c(X, X') &= i \langle 0, \text{out} | \hat{T} \hat{\Psi}(X) \hat{\Psi}^\dagger(X') \gamma^0 | 0, \text{out} \rangle. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $\hat{\Psi}(X)$ — оператор поля в представлении Гейзенберга, удовлетворяющий уравнению Дирака в соответствующем внешнем поле,

$$\begin{aligned} X &= (X^\mu) = (t, \mathbf{r}), \quad t = X^0, \quad \mathbf{r} = (X^k), \\ x &= X^1, \quad \mu = 0, 1, \dots, D, \quad k = 1, \dots, D, \end{aligned}$$

\hat{T} обозначает операцию хронологического упорядочения; $|0, \text{in}\rangle$ и $|0, \text{out}\rangle$ — начальный и конечный вакуум, соответственно.

Отметим, что, несмотря на то, что формальные представления (1) верны в КЭД сильного поля как в t -ступеньках, так и в x -ступеньках, in- и out-решения строятся по-разному, так же, как и операторы рождения и уничтожения и соответствующие вакуумные состояния.

Уравнение Дирака во внешнем электромагнитном поле заданным потенциалом $A_\mu(X)$ в d -мерном пространстве-времени имеет вид ($\hbar = c = 1$)

$$\begin{aligned} (\gamma^\mu P_\mu - m) \psi(X) &= 0, \\ P_\mu &= i \partial_\mu - q A_\mu(X), \end{aligned}$$

где $\psi(X)$ — $2^{[d/2]}$ -компонентный спинор, γ^μ — матрицы Дирака,

$$\begin{aligned} [\gamma^\mu, \gamma^\nu]_+ &= 2\eta^{\mu\nu}, \quad \eta^{\mu\nu} = \text{diag}(\underbrace{1, -1, \dots, -1}_d), \\ d &= D + 1, \end{aligned}$$

$q = -e$, $e > 0$ — заряд электрона, m — его масса.

Заметим, что в случае, когда вакуум нестабилен, все сингулярные функции (1) различны. Различия между функциями $S_{\text{in}}^c(X, X')$, $S_{\text{out}}^c(X, X')$ и причинным пропагатором $S^c(X, X')$ обозначаются через $S^p(X, X')$ и $S^{\bar{p}}(X, X')$,

$$\begin{aligned} S^p(X, X') &= S_{\text{in}}^c(X, X') - S^c(X, X'), \\ S^{\bar{p}}(X, X') &= S_{\text{out}}^c(X, X') - S^c(X, X'). \end{aligned} \quad (2)$$

Перестановочная функция

$$\begin{aligned} S(X, X') &= i[\hat{\Psi}(X), \hat{\Psi}^\dagger(X')\gamma^0]_+, \\ S(X, X')|_{t=t'} &= i\gamma^0\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \end{aligned} \quad (3)$$

является важной характеристикой спинорного поля. Ее вид существенно зависит от структуры внешнего поля. В работах [3] сформулированы правила построения всех необходимых сингулярных функций в виде сумм по соответствующим точным решениям уравнения Дирака для t -ступенек. Те же идеи можно использовать для построения сингулярных функций в КЭД сильного поля в x -ступеньках.

В случае постоянного однородного электромагнитного поля причинный пропагатор электрона $S^c(X, X')$ был найден в явном виде как интеграл по собственному времени Фока–Швингера много лет назад [2]. Этот вид основывается на методе эффективного действия, см. [8]. Очевидно, что постоянное однородное электромагнитное поле — это идеализация, которая полезна для описания эффектов в медленно меняющихся и слабо неоднородных полях. Случай постоянного однородного электромагнитного поля рассматривается как приближение в ведущем порядке теоретико-полевых расчетов [9,10], т. е. приближения локально постоянного поля (см., например, работы [11–17] и ссылки в них).

Постоянное однородное электрическое поле можно рассматривать как предел T -постоянного электрического поля (однородное электрическое поле, которое действует в течение временного интервала T) большой длительности или как предел L -постоянного электрического поля (постоянного электрического поля, заключенного между двумя обкладками конденсатора, разделенными расстоянием L) большого пространственного масштаба. КЭД сильного поля для T -постоянного электрического поля и L -постоянного электрического поля описывает физически разные задачи. В этой работе мы получим явный вид для всех указанных выше сингулярных функций и покажем, что в пределе $T, L \rightarrow \infty$ оба подхода приводят к одним и тем же результатам.

В данной работе мы строим и исследуем спинорные сингулярные функции в КЭД сильного поля в T -постоянном электрическом поле и в КЭД сильного поля в L -постоянном электрическом поле. С этой целью в разд. 2 мы находим in- и out-решения уравнения Дирака в T -постоянном электрическом поле, используя переменные светового конуса. С помощью этих решений мы строим интегральные представления Фока–Швингера по собственному времени для всех сингулярных функций, которые обеспечивают непертурбативные (по отношению к внешне-

му полю) вычисления любых амплитуд переходов и средних значений любых физических величин. Эти представления получены для произвольной ориентации внешнего электрического поля, что нетривиальным образом обобщает результаты работ [18,19]. В разд. 3 мы находим соответствующие наборы in- и out-решений уравнения Дирака в L -постоянном электрическом поле в переменных светового конуса. При помощи данных наборов мы строим интегральные представления Фока–Швингера для соответствующих спинорных сингулярных функций. Полученные результаты обсуждаются в разд. 4. Рассматривая вычисления в T -постоянном поле и L -постоянном поле как различные регуляризации соответствующих вычислений в постоянном однородном электрическом поле, мы показываем их эквивалентность для достаточно больших значений T и L .

2. СИНГУЛЯРНЫЕ ФУНКЦИИ В КЭД СИЛЬНОГО ПОЛЯ В T -ПОСТОЯННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

2.1. In- и out-решения

В данном разделе мы рассмотрим случай t -ступеньки, которая представляет собой T -постоянное электрическое поле, действующее в течение большого промежутка времени. T -постоянное поле является одной из возможных регуляризаций постоянного однородного электрического поля в пределе $T \rightarrow \infty$. Для построения спинорных сингулярных функций нам понадобятся два полных набора решений уравнения Дирака, in-решения $\{\zeta\psi_n(x)\}$ и out-решения $\{\zeta\psi_n(x)\}$ со специальной асимптотикой при $t \rightarrow -\infty$ и $t \rightarrow +\infty$, соответственно. Нижний индекс $\zeta = +$ асимптотически соответствует электронам, а $\zeta = -$ асимптотически соответствует позитронам. Поскольку явный вид искомым решений нетривиально зависит от ориентации электрического поля относительно оси x , ниже мы рассмотрим оба случая по отдельности.

Рассмотрим постоянное электрическое поле, которое имеет только одну ненулевую компоненту E_x вдоль оси x . Поле задается зависящим от времени электромагнитным потенциалом $A_\mu(X)$,

$$A_\mu(X) = E_x t \delta_\mu^1, \quad E_x = \kappa E, \quad \kappa = \pm 1, \quad E > 0. \quad (4)$$

Случай $\kappa = -1$ был рассмотрен в работах [18,19]. Отметим, что в случае $\kappa = +1$ направление поля совпадает с направлением поля в общей формулировке КЭД сильного поля в x -ступеньках, приведенной в [4].

Введем полный набор решений уравнения Дирака, имеющих следующий вид:

$$\begin{aligned} \psi(X) &= (\gamma P + m) \Phi(X), \quad X = (t, x, \mathbf{r}_\perp), \\ \Phi(X) &= \phi(t, x) \varphi_{\mathbf{p}_\perp}(\mathbf{r}_\perp) v_{\chi, \sigma}, \\ \varphi_{\mathbf{p}_\perp}(\mathbf{r}_\perp) &= (2\pi)^{-(d-2)/2} \exp(i\mathbf{p}_\perp \mathbf{r}_\perp), \\ \mathbf{r}_\perp &= (X^2, \dots, X^D), \quad \mathbf{p}_\perp = (p^2, \dots, p^D), \\ \gamma_\perp &= (\gamma^2, \dots, \gamma^D), \end{aligned} \quad (5)$$

где $v_{\chi, \sigma}$ — набор постоянных ортонормированных спиноров,

$$\chi = \pm 1, \quad \sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{[d/2]-1}), \quad \sigma_j = \pm 1.$$

Спиноры $v_{\chi, \sigma}$ удовлетворяют соотношениям

$$\gamma^0 \gamma^1 v_{\chi, \sigma} = \chi v_{\chi, \sigma}, \quad v_{\chi, \sigma}^\dagger v_{\chi', \sigma'} = \delta_{\chi, \chi'} \delta_{\sigma, \sigma'}.$$

Фактически, функции (5) соответствуют состояниям с заданными импульсами \mathbf{p}_\perp в направлении, перпендикулярном оси x . Квантовые числа χ и σ_j описывают поляризацию спина и обеспечивают удобную параметризацию решений. Поскольку в измерениях $(1+1)$ и $(2+1)$ ($d=2, 3$) нет спиновых степеней свободы, квантовые числа σ отсутствуют. Заметим, что в размерностях $(2+1)$ существуют два неэквивалентных представления для γ -матриц, которые соответствуют разным сортам фермионов, которые параметризуются параметром $\chi = \pm 1$. В d -измерениях для любых заданных импульсов существует только $J_{(d)} = 2^{[d/2]-1}$ различных состояний спина. Причем решения (5), которые различаются только значениями χ , линейно зависимы. Без ограничения общности положим $\chi = 1$ и введем обозначение $v_\sigma = v_{1, \sigma}$.

Скалярные функции $\phi(t, x)$ удовлетворяют уравнению

$$\begin{aligned} \left\{ \partial_t^2 - \partial_x^2 + 2iekEt \partial_x + \right. \\ \left. + [(eEt)^2 - iekE + \mathbf{p}_\perp^2 + m^2] \right\} \phi(t, x) = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Рассмотрим решения уравнения Дирака с определенными значениями импульсов,

$$\begin{aligned} \psi_n(X) &= (\gamma P + m) \phi_n(t, x) \varphi_{\mathbf{p}_\perp}(\mathbf{r}_\perp) v_\sigma, \\ \phi_n(t, x) &= e^{ip_x x} \phi_n(t), \quad n = (p_x, \mathbf{p}_\perp, \sigma), \\ p_x &= p^1, \quad \hat{p}_x \psi_n(X) = p_x \psi_n(X), \quad \hat{p}_x = -i\partial_x. \end{aligned} \quad (7)$$

Асимптотики решений (7) для $\kappa = -1$ и $\kappa = +1$ при $t \rightarrow \pm\infty$ были исследованы в работах [19] и [20], соответственно. Решения

$$\begin{aligned} {}^{\pm} \phi_n(t, x) &= C_n e^{ip_x x} D_{-\rho} [\pm(1+i)\xi], \quad \kappa = +1, \\ {}^{\mp} \phi_n(t, x) &= \check{C}_n e^{ip_x x} D_{\rho-1} [\pm(1-i)\xi], \quad \kappa = +1, \\ {}^{\mp} \phi_n(t, x) &= C_n e^{ip_x x} D_{\rho-1} [\pm(1-i)\xi], \quad \kappa = -1, \\ {}^{\pm} \phi_n(t, x) &= \check{C}_n e^{ip_x x} D_{\rho-1} [\pm(1+i)\xi], \quad \kappa = -1, \end{aligned} \quad (8)$$

$$C_n = (4\pi eE)^{-1/2} e^{-\pi\lambda/8},$$

$$\check{C}_n = (2\pi\lambda eE)^{-1/2} e^{-\pi\lambda/8},$$

$$\rho = \frac{i}{2}\lambda + \frac{\kappa + 1}{2},$$

$$\xi = \frac{eEt - \kappa p_x}{\sqrt{eE}},$$

$$\lambda = \frac{\mathbf{p}_\perp^2 + m^2}{eE},$$

уравнения (6) использованы для построения in-решений и out-решений. Будем говорить, что функции ${}_\zeta \phi_n(t, x)$ соответствуют in-решениям $\{\zeta \psi_n(X)\}$, а функции ${}^\zeta \phi_n(t, x)$ соответствуют out-решениям $\{\zeta \psi_n(X)\}$. В (8) функции $D_\nu(x)$ — функции параболического цилиндра. In- и out-решения ортонормированы относительно стандартного скалярного произведения,

$$\begin{aligned} ({}_\zeta \psi_n, {}_\zeta \psi_{n'}) &= ({}^\zeta \psi_n, {}^\zeta \psi_{n'}) = \delta(\mathbf{p}_\perp - \mathbf{p}'_\perp) \delta(p_x - p'_x) \delta_{\sigma, \sigma'}, \\ (\psi, \psi') &= \int \psi^\dagger(x) \psi'(x) d\mathbf{r}, \\ d\mathbf{r} &= dx^1 \dots dx^D. \end{aligned}$$

Удобнее работать с решениями уравнения (6), которые зависят от координат на световом конусе

$$x_\pm = t \pm x.$$

Данные решения параметризуются набором квантовых чисел $n_- = (p_-, \mathbf{p}_\perp, \sigma)$ и имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} {}^{\pm\kappa} \phi_{n_-}(t, x) &= C_{n_-} \times \\ &\times \exp \left\{ -ie \frac{\kappa E}{2} \left(\frac{1}{2} x_-^2 - x^2 \right) - \frac{i}{2} p_- x_+ - \right. \\ &\left. - \frac{i}{2} [\kappa\lambda - 2i] \ln \left[\frac{\mp\pi_-}{\sqrt{eE}} \exp \left(-\frac{i\pi}{2} \theta(\kappa) \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$C_{n_-} = (4\pi eE)^{-1/2} \times$$

$$\times \exp \left\{ \frac{i}{4} [(2\lambda \log 2 + \pi) \kappa + \pi(1 + i\lambda)] \right\},$$

$$\lambda = \frac{\mathbf{p}_\perp^2 + m^2}{eE}, \quad \pi_- = p_- + ekEx_-.$$

Для удобства мы ввели следующее обозначение:

$${}^{\pm\kappa} \phi = \begin{cases} {}^{\pm} \phi, & \kappa = +1, \\ {}^{\mp} \phi, & \kappa = -1, \end{cases}$$

где $\zeta\phi$ и $\zeta\phi$ — различные наборы функций. Здесь p_- — импульс, принимающий непрерывные значения и являющийся собственным значением оператора $2i(\partial/\partial x_+)$. Знак $\pm\kappa$, отвечающий функциям ${}_{\pm\kappa}^+\phi_{n_-}(t, x)$, совпадает со знаком кинетического импульса π_- при $x_- \rightarrow \pm\infty$. Далее мы покажем, что состояния (9) необходимы для построения специальных асимптотик при $t \rightarrow \pm\infty$.

Наборы решений (9) и (8) связаны между собой интегральным преобразованием

$$\begin{aligned} & {}_{-\kappa}^+\phi_n(t, x) = \\ & = (2\pi eE)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} M^*(p_x, p_-) {}_{-\kappa}^+\phi_{n_-}(t, x) dp_-, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} M(p_x, p_-) & = \\ & = \exp \left\{ -\frac{i\kappa}{4eE} [(p_- + 2p_x)^2 - 2(p_x)^2] \right\}. \end{aligned}$$

Обратное преобразование имеет вид

$$\begin{aligned} & {}_{-\kappa}^+\phi_{n_-}(t, x) = \\ & = (2\pi eE)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} M(p_x, p_-) {}_{-\kappa}^+\phi_n(t, x) dp_x. \end{aligned} \quad (11)$$

Заметим, что в случае постоянного однородного электрического поля преобразования (10) и (11) были рассмотрены в работе [21].

Как мы упоминали выше, функциям ${}_{+\kappa}^+\phi_n(t, x)$ соответствуют out-решения ${}_{+\kappa}^+\psi_n(X)$, тогда как функциям ${}_{-\kappa}^+\phi_n(t, x)$ соответствуют in-решения ${}_{-\kappa}^+\psi_n(X)$. Преобразования (11) позволяют нам построить in- и out-решения ${}_{-\kappa}^+\psi_{n_-}(X)$ и ${}_{+\kappa}^+\psi_{n_-}(X)$ с квантовыми числами n_- , соответственно:

$${}_{-\kappa}^+\psi_{n_-}(X) = (\gamma P + m) {}_{-\kappa}^+\phi_{n_-}(t, x) \varphi_{\mathbf{p}_\perp}(\mathbf{r}_\perp) v_\sigma.$$

На данном шаге мы введем два различных набора решений:

$$\begin{aligned} \kappa = +1 : \\ \left\{ \begin{aligned} & {}_{+\kappa}^+\phi_{n_-}(t, x) = \theta(+\pi_-) {}_{+\kappa}^+\phi_{n_-}(t, x) g(+|+), \\ & {}_{-\kappa}^+\phi_{n_-}(t, x) = \theta(-\pi_-) {}_{-\kappa}^+\phi_{n_-}(t, x) g(-|-), \end{aligned} \right. \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \kappa = -1 : \\ \left\{ \begin{aligned} & {}_{+\kappa}^+\phi_{n_-}(t, x) = \theta(+\pi_-) {}_{+\kappa}^+\phi_{n_-}(t, x) g(+|+), \\ & {}_{-\kappa}^+\phi_{n_-}(t, x) = \theta(-\pi_-) {}_{-\kappa}^+\phi_{n_-}(t, x) g(-|-), \end{aligned} \right. \end{aligned}$$

где $\theta(x)$ — ступенчатая функция Хевисайда. Мы можем проверить что выполняются следующие соотношения:

$$\begin{aligned} (2\pi eE)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} M^*(p_x, p_-) {}_{+\kappa}^+\phi_{n_-}(t, x) dp_- = \\ = {}_{+\kappa}^+\phi_n(t, x). \end{aligned}$$

Функциям ${}_{-\kappa}^+\phi_n(t, x)$ соответствуют out-решения ${}_{-\kappa}^+\psi_n(X)$, тогда как функциям ${}_{+\kappa}^+\phi_n(t, x)$ соответствуют in-решения ${}_{+\kappa}^+\psi_n(X)$. Преобразования (11) позволяют нам построить in- и out-решения ${}_{+\kappa}^+\psi_{n_-}(X)$ и ${}_{-\kappa}^+\psi_{n_-}(X)$ с квантовыми числами n_- :

$${}_{+\kappa}^+\psi_{n_-}(X) = (\gamma P + m) {}_{+\kappa}^+\phi_{n_-}(t, x) \varphi_{\mathbf{p}_\perp}(\mathbf{r}_\perp) v_\sigma.$$

Таким образом, мы построили in- и out-решения для двух различных направлений электрического поля, $\kappa = \pm 1$. Причем имеют место преобразования данных решений друг через друга:

$$\begin{aligned} \zeta\psi_{n_-}(X) & = {}_{+\kappa}^+\psi_{n_-}(X) g(+|\zeta) + {}_{-\kappa}^+\psi_{n_-}(X) g(-|\zeta), \\ \zeta\psi_{n_-}(X) & = {}_{+\kappa}^+\psi_{n_-}(X) g(+|\zeta) + {}_{-\kappa}^+\psi_{n_-}(X) g(-|\zeta). \end{aligned}$$

Здесь g -коэффициенты определяются соотношениями

$$\begin{aligned} g(\zeta|\zeta) & = \frac{\sqrt{\pi\lambda} \exp(-\pi\lambda/4)}{\Gamma(1 - i\zeta\lambda/2)}, \\ g(-|+) & = -g(+|-) = \kappa \exp(-\pi\lambda/2). \end{aligned} \quad (13)$$

2.2. Представления собственного времени

Используя представления сингулярных функций в виде некоторых сумм решений уравнения Дирака, построенных в работах [3, 19], можно найти их представления по собственному времени. Таким образом, представления по собственному времени для сингулярных функций $S^p(X, X')$ и $S^{\bar{p}}(X, X')$ следуют из выражений

$$\begin{aligned} S^p(X, X') & = i \int_{-\infty}^{\infty} dp_- \times \\ & \times \int_{\mathbb{R}^{d-2}} d\mathbf{p}_\perp \sum_{\sigma=\pm 1} {}_{-\kappa}^+\psi_{n_-}(X) \times \\ & \times \left[g(+|-) g(-|-)^{-1} \right]^\dagger {}_{+\kappa}^+\bar{\psi}_{n_-}(X'), \\ S^{\bar{p}}(X, X') & = -i \int_{-\infty}^{\infty} dp_- \times \\ & \times \int_{\mathbb{R}^{d-2}} d\mathbf{p}_\perp \sum_{\sigma=\pm 1} {}_{+\kappa}^+\psi_{n_-}(X) \times \\ & \times \left[g(+|+)^{-1} g(+|-) \right] {}_{-\kappa}^+\bar{\psi}_{n_-}(X'). \end{aligned} \quad (14)$$

Заметим, что сингулярные функции (14) в работе [19] были обозначены по-другому, а именно, как $-S^a(X, X')$ и $-S^p(X, X')$, соответственно. Учитывая (13) и (12), получим

$$\begin{aligned}
 S^p(X, X') &= \\
 &= -\kappa \int_{-\infty}^{\infty} dp_- \theta(+\kappa\pi'_-) {}_+Y(X, X'; p_-), \\
 S^{\bar{p}}(X, X') &= \\
 &= +\kappa \int_{-\infty}^{\infty} dp_- \theta(-\kappa\pi'_-) {}^{+\kappa}Y(X, X'; p_-), \\
 &+Y(X, X'; p_-) = \\
 &= i \int_{\mathbb{R}^{d-2}} d\mathbf{p}_\perp \sum_{\sigma} {}_+\psi_{n_-}(X) {}_+\bar{\psi}_{n_-}(X'), \\
 &{}^{+\kappa}Y(X, X'; p_-) = \\
 &= i \int_{\mathbb{R}^{d-2}} d\mathbf{p}_\perp \sum_{\sigma} {}^{+\kappa}\psi_{n_-}(X) {}^{+\kappa}\bar{\psi}_{n_-}(X').
 \end{aligned} \tag{15}$$

В соответствии с работой [19], причинный пропагатор и перестановочная функция могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned}
 S^c(X, X') &= (\gamma P + m)\Delta^c(X, X'), \\
 \Delta^c(X, X') &= \int_{\Gamma_c} f(X, X'; s) ds,
 \end{aligned} \tag{16}$$

$$\begin{aligned}
 S(X, X') &= (\gamma P + m)\Delta(X, X'), \\
 \Delta(X, X') &= \text{sgn}(t - t') \int_{\Gamma} f(X, X'; s) ds,
 \end{aligned} \tag{17}$$

где

$$\text{sgn}(t - t') = \theta(t - t') - \theta(t' - t),$$

и функция

$$\begin{aligned}
 f(X, X'; s) &= \exp(-\epsilon\kappa E\gamma^0\gamma^1 s) f^{(0)}(X, X'; s), \\
 f^{(0)}(X, X'; s) &= -\left(\frac{-i}{4\pi}\right)^{d/2} \times \\
 &\quad \times \frac{eE}{s^{(d-2)/2} \sinh(eEs)} \times \\
 &\times \exp\left[-ism^2 + ie\Lambda + \frac{i}{4s} |\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp|^2 - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{i}{4} eE \coth(eEs) (y_0^2 - y_1^2)\right]
 \end{aligned} \tag{18}$$

представляет собой ядро Фока–Швингера [2, 22]. Здесь и далее мы вводим четыре-вектор

$$y_\mu = X_\mu - X'_\mu, \quad y_0 = t - t', \quad y_1 = x' - x.$$

Функция $f(X, X'; s)$ удовлетворяет следующему дифференциальному уравнению с начальным условием:

$$\begin{aligned}
 -i \frac{d}{ds} f(X, X'; s) &= (P^2 - m^2 + ieE\gamma^0\gamma^1) f(X, X'; s), \\
 \lim_{s \rightarrow \pm 0} f(X, X'; s) &= \pm i \delta(X - X').
 \end{aligned}$$

Заметим что только член Λ в (18) является калибровочно-зависимой величиной, которая может быть представлена в виде интеграла вдоль кривой, проходящей через точки X и X' ,

$$\Lambda = - \int_{X'}^X A_\mu(\tilde{X}) d\tilde{X}^\mu. \tag{19}$$

В рассматриваемой калибровке электромагнитный потенциал $A_\mu(X)$ задается формулой (4), так что мы имеем

$$\Lambda = \kappa E y_1(t + t')/2.$$

Контурные интегрирования показаны на рис. 1 и рис. 2. Контур Γ_c и Γ_1 обходят снизу все особые точки на вещественной оси, кроме начала координат. Функция $f^{(0)}(X, X'; s)$ имеет две особые точки $s_0 = 0$ и $eEs_1 = -i\pi$ на комплексной плоскости между контурами $\Gamma_c - \Gamma_1$ и $\Gamma_p - \Gamma_3$.

Контур Γ расположен в нижней части комплексной плоскости s в достаточно малой окрестности точки $s = 0$, а также соединяет точки $s = +0$ и $s = e^{-i\pi}0$. Заметим, что интеграл по контуру Γ в (17) может быть представлен как интеграл по контуру $\Gamma_c - \Gamma_2 - \Gamma_1$. Так как ядро $f(X, X'; s)$ не имеет других особенностей в достаточно малой окрестности точки $s = 0$, то замыкание контура интегрирования $\Gamma_c - \Gamma_2 - \Gamma_1$ при $\text{Re } s \rightarrow \pm\infty$, дает контур интегрирования Γ .

Заметим что представление (16) имеет форму представления Швингера [2]. Представление (17) обладает универсальной структурой присущей представлению собственного времени для перестановочной функции, см. [18]. Отсюда следует, что интеграл (17) удовлетворяет уравнению Дирака и начальному условию

$$S(X, X')|_{t=t'} = i\gamma^0\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

В свою очередь, это показывает полноту двух наборов $\{\pm\psi_{n_-}(x)\}$ и $\{\pm\bar{\psi}_{n_-}(x)\}$ на гиперповерхности $t = \text{const}$.

Следуя процедуре, указанной в работе [19], и учитывая что

$$\mathbf{E}y = \kappa E y^1,$$

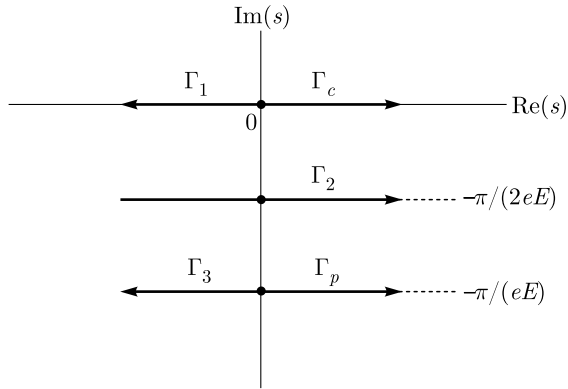


Рис. 1. Контуры интегрирования $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_c, \Gamma_p$

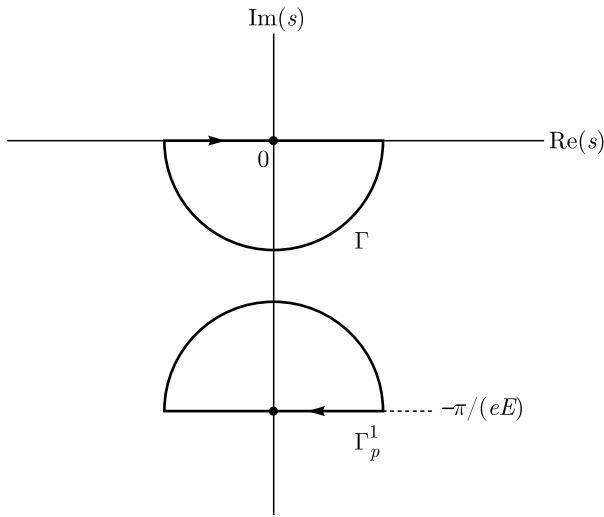


Рис. 2. Контуры интегрирования

мы можем представить сингулярные функции (15) в виде интегралов по собственному времени:

$$\begin{aligned}
 S^p(X, X') &= (\gamma P + m)\Delta^p(X, X'), \\
 S^{\bar{p}}(X, X') &= (\gamma P + m)\Delta^{\bar{p}}(X, X'), \\
 -\Delta^p(X, X') &= \int_{\Gamma_p} f(X, X'; s) ds + \\
 &+ \theta(\mathbf{E}\mathbf{y}) \int_{\Gamma_p^1} f(X, X'; s) ds, \\
 -\Delta^{\bar{p}}(X, X') &= \int_{\Gamma_p} f(X, X'; s) ds + \\
 &+ \theta(-\mathbf{E}\mathbf{y}) \int_{\Gamma_p^1} f(X, X'; s) ds.
 \end{aligned}
 \tag{20}$$

Контур интегрирования Γ_p^1 (радиус которого стремится к нулю) соединяет точки

$$s = e^{-i\pi}0 - i\pi/(eE)$$

и

$$s = +0 - i\pi/(eE).$$

Заметим, что интеграл по контуру Γ_p^1 в (20) сводится к интегралу по контуру $\Gamma_2 + \Gamma_3 - \Gamma_p$, так как, замыкая контур интегрирования $\Gamma_2 + \Gamma_3 - \Gamma_p$ при $\text{Re } s \rightarrow \pm\infty$, мы можем преобразовать его в контур Γ_p^1 .

Используя (20), получаем представление по собственному времени для сингулярных функций $S_{\text{in/out}}^c(X, X')$:

$$S_{\text{in/out}}^c(X, X') = S^{p/\bar{p}}(X, X') + S^c(X, X'). \tag{21}$$

Представления (16), (17) и (20) могут быть записаны в ковариантной форме при помощи тензора электромагнитного поля $F_{\mu\nu}$, см. работы [18,19]. Например, для $d = 4$ получим

$$\begin{aligned}
 f(X, X'; s) &= \\
 &= \exp\left(-\frac{e}{4}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]F_{\mu\nu}s\right) f^{(0)}(X, X'; s), \\
 f^{(0)}(X, X'; s) &= \frac{e^2 EB \exp(-ie\Lambda')}{(4\pi)^2 \sinh(eEs) \sin(eBs)} \times \\
 &\times \exp\left[-im^2s - i\frac{1}{4}yqF \coth(qFs)y\right],
 \end{aligned}
 \tag{22}$$

$$\Lambda' = -\int_{X'}^X \left(A_\mu^E(\tilde{X}) + A_\mu^B(\tilde{X})\right) d\tilde{X}^\mu,$$

где E и B — электрические и магнитные поля в $F_{\mu\nu}$, $A_\mu^E + A_\mu^B$ — потенциалы электрических (E) и магнитных (B) компонент тензора $F_{\mu\nu}$, соответственно. Интеграл в (22) берется вдоль кривой соединяющей точки X и X' .

Как следует из (18) и (20), для функций $S^{p/\bar{p}}(X, X')$ (а также для $S_{\text{in/out}}^c(X, X')$), замена $E_x = E \rightarrow E_x = -E$ эквивалентна замене

$$x \rightarrow -x, \quad x' \rightarrow -x', \quad \gamma^1 \rightarrow -\gamma^1.$$

Причем проекция

$$\mathbf{E}\mathbf{y}/E = (E_x/E)y^1$$

вектора смещения

$$\mathbf{y} = (y^2, \dots, y^D)$$

на направление поля и функция $f(X, X'; s)$ не меняются. Это означает, что средний ток созданных

частиц остается направленным вдоль электрического поля.

Заметим, что контуры интегрирования в представлениях собственного времени для причинного пропагатора и перестановочной функции нечувствительны к направлению электрического поля. Однако контуры интегрирования в представлениях собственного времени для сингулярных функций $S^{p,\bar{p}}(X, X')$ зависят от проекции \mathbf{E}_u . Это естественно, поскольку именно эти сингулярные функции определяют влияние внешнего электрического поля на электрические токи создаваемых частиц. Такое наблюдение невозможно было сделать из представлений, полученных в работах [18, 19] для конкретного выбора системы координат.

3. СИНГУЛЯРНЫЕ ФУНКЦИИ В КЭД В L -ПОСТОЯННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

3.1. In- и out-решения

В этом разделе мы построим спинорные сингулярные функции в КЭД в L -постоянном электрическом поле. Данное поле имеет только одну ненулевую компоненту E_x вдоль оси x ,

$$E_x(x) = \begin{cases} 0, & x \in (-\infty, -L/2] \cup [L/2, \infty), \\ E, & x \in S_{\text{int}} = (-L/2, L/2), \end{cases} \quad L > 0.$$

Будем предполагать, что соответствующая потенциальная ступенька имеет достаточно большую высоту, $eEL \gg 2m$ (такая ступенька называется критической). В этом случае поле $E_x(x)$ и ведущие вклады в вакуумные средние можно рассматривать как макроскопические физические величины. В этом смысле L -постоянное электрическое поле является слабо неоднородным, и характеристики вакуумной нестабильности имеют некоторые универсальные особенности, см. [15]. Эффект рождения пар связан с наличием зоны Клейна. Подчеркнем, что в пределе $L \rightarrow \infty$ L -постоянное электрическое поле является одной из возможных регуляризаций постоянного однородного электрического поля.

Некоторые характеристики вакуумной нестабильности, в частности, деформации спинорных сингулярных функций в КЭД в L -постоянном электрическом поле при больших L , могут быть приближенно вычислены в КЭД с постоянным однородным электрическим полем. Последняя задача важна сама по себе, и ее решение в рамках последовательной формулировки КЭД [4] дается ниже, см. также результаты, полученные в работе [5] для L -постоянного электрического поля.

Выберем электромагнитные потенциалы, описывающие постоянное однородное электрическое поле E , направленное вдоль оси x , следующим образом:

$$A_0(X) = -Ex, \quad A_k(X) = 0. \quad (23)$$

Рассмотрим полный набор стационарных решений уравнения Дирака в электромагнитном поле (23) вида

$$\begin{aligned} \psi_{n_0}(X) &= (\gamma P + m) \Phi_{n_0}(X), \\ \Phi_{n_0}(X) &= \varphi_{n_0}(t, x) \varphi_{\mathbf{p}_\perp}(\mathbf{r}_\perp) v_{\chi, \sigma}, \\ n_0 &= (p_0, \mathbf{p}_\perp, \sigma), \\ \varphi_{n_0}(t, x) &= (2\pi)^{-1/2} \exp(-ip_0 t) \varphi_{n_0}(x), \end{aligned} \quad (24)$$

где $\varphi_{\mathbf{p}_\perp}(\mathbf{r}_\perp)$ и $v_{\chi, \sigma}$ даны в (5). В силу причин, описанных выше в разд. 2, выберем $\chi = 1$. Скалярные функции $\varphi_{n_0}(x)$ удовлетворяют дифференциальному уравнению второго порядка

$$\begin{aligned} \left\{ \hat{p}_x^2 - iU'(x) - [p_0 - U(x)]^2 + \mathbf{p}_\perp^2 + m^2 \right\} \times \\ \times \varphi_{n_0}(x) = 0, \\ U(x) = -eA_0(x). \end{aligned} \quad (25)$$

Решения уравнения Дирака с хорошо определенными левыми и правыми асимптотиками обозначим как $\zeta \psi_{n_0}(X)$ и $\varsigma \psi_{n_0}(X)$,

$$\begin{aligned} \hat{p}_x \zeta \psi_{n_0}(X) &= p^L \zeta \psi_{n_0}(X), \quad x \rightarrow -\infty, \quad \zeta = \text{sgn}(p^L), \\ \hat{p}_x \varsigma \psi_{n_0}(X) &= p^R \varsigma \psi_{n_0}(X), \quad x \rightarrow +\infty, \quad \zeta = \text{sgn}(p^R). \end{aligned}$$

Решения $\zeta \psi_{n_0}(X)$ и $\varsigma \psi_{n_0}(X)$ описывают асимптотически частицы с определенными импульсами p^L при $x \rightarrow -\infty$ и p^R при $x \rightarrow +\infty$, соответственно. Мы видим, что решения $\zeta \psi_{n_0}(X)$ и $\varsigma \psi_{n_0}(X)$ имеют вид (24), при этом функции $\varphi_{n_0}(x)$ обозначены как $\zeta \varphi_{n_0}(x)$ и $\varsigma \varphi_{n_0}(x)$, соответственно. Они имеют следующие асимптотики:

$$\begin{aligned} \zeta \varphi_{n_0}(x) &= \zeta C \exp[ip^L x], \quad x \rightarrow -\infty, \\ \varsigma \varphi_{n_0}(x) &= \varsigma C \exp[ip^R x], \quad x \rightarrow +\infty. \end{aligned}$$

Здесь ζC и ςC — нормировочные множители.

Решения $\zeta \psi_{n_0}(X)$ и $\varsigma \psi_{n_0}(X)$ удовлетворяют следующим соотношениям ортогональности на гиперповерхности $x = \text{const}$:

$$\begin{aligned} (\zeta \psi_{n_0}, \zeta' \psi_{n'_0})_x &= \zeta \delta_{\zeta, \zeta'} \delta_{n_0, n'_0}, \\ (\varsigma \psi_{n_0}, \varsigma' \psi_{n'_0})_x &= -\zeta \delta_{\zeta, \zeta'} \delta_{n_0, n'_0}, \\ (\psi, \psi')_x &= \int \psi^\dagger(X) \gamma^0 \gamma^1 \psi'(X) dt d\mathbf{r}_\perp, \\ \delta_{n_0, n'_0} &= \delta_{\sigma, \sigma'} \delta(p_0 - p'_0) \delta(\mathbf{p}_\perp - \mathbf{p}'_\perp). \end{aligned} \quad (26)$$

Они выражаются друг через друга следующим образом:

$$\begin{aligned} \zeta \psi_{n_0}(X) &= \\ &= +\psi_{n_0}(X) \tilde{g}(+|\zeta) - \psi_{n_0}(X) \tilde{g}(-|\zeta), \\ \zeta \psi_{n'_0}(X) &= \\ &= -\psi_{n_0}(X) \tilde{g}(-|\zeta) - +\psi_{n_0}(X) \tilde{g}(+|\zeta), \end{aligned} \quad (27)$$

где коэффициенты разложения определяются из соотношений

$$\begin{aligned} \left(\zeta \psi_{n_0}, \zeta' \psi_{n'_0}(X) \right)_x &= \tilde{g}(\zeta|\zeta') \delta_{n_0, n'_0}, \\ \tilde{g}(\zeta'|\zeta) &= \tilde{g}(\zeta|\zeta')^*. \end{aligned}$$

Заметим, что коэффициенты \tilde{g} отличаются от коэффициентов g , которые имеют место в КЭД в t -ступеньках, см. разд. 2. Коэффициенты \tilde{g} удовлетворяют следующим соотношениям:

$$\begin{aligned} |\tilde{g}(-|+)|^2 &= |\tilde{g}(+|-)|^2, \\ |\tilde{g}(+|+)|^2 &= |\tilde{g}(-|-)|^2, \\ \frac{\tilde{g}(+|-)}{\tilde{g}(-|-)} &= \frac{\tilde{g}(+|+)}{\tilde{g}(-|+)}, \\ |\tilde{g}(+|-)|^2 - |\tilde{g}(+|+)|^2 &= 1. \end{aligned} \quad (28)$$

Вернемся к решению уравнения (25), которое мы можем записать в виде

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 + i - \lambda \right] \varphi_{n_0}(x) = 0, \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{eEx - p_0}{\sqrt{eE}}, \\ \lambda &= \frac{\mathbf{p}_\perp^2 + m^2}{eE}. \end{aligned}$$

Общее решение уравнения (29) полностью определяется подходящей парой линейно независимых функций параболического цилиндра. А именно, парой

$$D_\rho[(1-i)\xi], \quad D_{-1-\rho}[(1+i)\xi]$$

или парой

$$D_\rho[-(1-i)\xi], \quad D_{-1-\rho}[-(1+i)\xi],$$

где

$$\rho = -i\lambda/2 - 1.$$

Учитывая асимптотические разложения функций параболического цилиндра, мы можем классифицировать решения по знаку импульсов p^L и p^R . В

результате получим четыре набора решений уравнения (29):

$$\begin{aligned} +\varphi_{n_0}(x) &= \\ &= +CD_{-1-\rho}[-(1+i)\xi] \propto e^{-i\xi^2/2}, \quad \xi \rightarrow -\infty, \\ -\varphi_{n_0}(x) &= \\ &= -CD_\rho[-(1-i)\xi] \propto e^{i\xi^2/2}, \quad \xi \rightarrow -\infty; \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} +\varphi_{n_0}(x) &= \\ &= +CD_\rho[(1-i)\xi] \propto e^{i\xi^2/2}, \quad \xi \rightarrow \infty, \\ -\varphi_{n_0}(x) &= \\ &= -CD_{-1-\rho}[(1+i)\xi] \propto e^{-i\xi^2/2}, \quad \xi \rightarrow \infty, \\ -\zeta C = \zeta C &= (\epsilon E)^{-1/2} e^{\pi\lambda/8} \times \\ &\times \left[\frac{\lambda}{2}(1+\zeta) + 1 - \zeta \right]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (31)$$

Что позволяет нам построить соответствующие дираковские спиноры, которые являются in- и out-решениями:

$$\begin{aligned} \text{in-solutions: } &-\psi_{n_0}(X), \quad -\psi_{n_0}(X), \\ \text{out-solutions: } &+\psi_{n_0}(X), \quad +\psi_{n_0}(X). \end{aligned} \quad (32)$$

Коэффициенты \tilde{g} имеют вид

$$\tilde{g}(-|+) = \tilde{g}(+|-) = e^{\pi\lambda/2}. \quad (33)$$

Согласно общей теории [4], дифференциальные средние числа рожденных пар определяются соотношением

$$N_{n_0}^{\text{cr}} = |\tilde{g}(+|-)|^{-2} = e^{-\pi\lambda}.$$

Действуя тем же образом, как и в разд. 2 при вычислении спинорных сингулярных функций (1) и (2), построим полные наборы решений уравнения Дирака с корректно определенными левыми и правыми асимптотиками в терминах переменных светового конуса $x_\pm = t \pm x$. С этой целью мы рассмотрим спиноры $\tilde{\psi}_{n_-}(X)$, параметризованные квантовыми числами $n_- = (p_-, p_\perp, \sigma)$:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_{n_-}(X) &= (\gamma P + m) \Phi_{n_-}(X), \\ \Phi_{n_-}(X) &= \varphi_{n_-}(t, x) \varphi_{\mathbf{p}_\perp}(\mathbf{r}_\perp) v_\sigma, \end{aligned} \quad (34)$$

где функции $\varphi_{n_-}(t, x)$ удовлетворяют уравнению

$$\begin{aligned} \left\{ \hat{p}_x^2 - iU'(x) - [\hat{p}_0 - U(x)]^2 + \mathbf{p}_\perp^2 + m^2 \right\} \times \\ \times \varphi_{n_-}(t, x) = 0. \end{aligned} \quad (35)$$

Построим нестационарные решения уравнения (35). Заметим, что данное уравнение допускает интегралы движения \hat{Y}_α , $\alpha = 0, 1, 2, 3$, в классе линейных дифференциальных операторов первого порядка:

$$\begin{aligned} \hat{Y}_0 &= ie, & \hat{Y}_1 &= \partial_t, & \hat{Y}_2 &= \partial_x + ieEt, \\ \hat{Y}_3 &= x\partial_t + t\partial_x + \frac{ieE}{2}(t^2 + x^2). \end{aligned}$$

Операторы \hat{Y}_α образуют четырехмерную алгебру Ли \mathcal{L} , заданную ненулевыми коммутационными соотношениями:

$$[\hat{Y}_1, \hat{Y}_2] = E\hat{Y}_0, \quad [\hat{Y}_1, \hat{Y}_3] = \hat{Y}_2, \quad [\hat{Y}_2, \hat{Y}_3] = \hat{Y}_1.$$

Уравнение (35) представляет собой уравнение на собственные функции оператора Казимира

$$\hat{K} = 2E\hat{Y}_0\hat{Y}_3 - \hat{Y}_1^2 + \hat{Y}_2^2,$$

а именно,

$$\hat{K}\varphi_{n_-}(t, x) = (\mathbf{p}_\perp^2 + m^2)\varphi_{n_-}(t, x), \quad [\hat{K}, \hat{Y}_a] = 0.$$

Для построения полных наборов решений такого рода уравнений эффективно применение метода некоммутиативного интегрирования [23–25], основанного на алгебре симметрии уравнения Дирака. Сначала определим неприводимое λ -представление алгебры Ли в пространстве функций от переменной $p_- \in (-\infty, +\infty)$ при помощи операторов

$$\ell_a(p_-, \partial_{p_-}, j), \quad \alpha = 0, 1, 2, 3; \quad j \in (0, \infty),$$

получим

$$\begin{aligned} \ell_0(p_-, \partial_{p_-}, j) &= ie, \\ \ell_1(p_-, \partial_{p_-}, j) &= -eE\partial_{p_-} + \frac{i}{2}p_-, \\ \ell_2(p_-, \partial_{p_-}, j) &= eE\partial_{p_-} + \frac{i}{2}p_-, \\ \ell_3(p_-, \partial_{p_-}, j) &= -p_-\partial_{p_-} + ij - 1, \\ \ell_1^2(p_-, \partial_{p_-}, j) - \ell_2^2(p_-, \partial_{p_-}, j) - \\ &- 2E\ell_0(p_-, \partial_{p_-}, j)\ell_3(p_-, \partial_{p_-}, j) = (2eE)j. \end{aligned}$$

Интегрируя систему уравнений

$$\left[\hat{Y}_a + \ell_a(p_-, \partial_{p_-}, j) \right] \varphi_{n_-}(t, x) = 0$$

вместе с уравнением (35), получим алгебраическое уравнение $j = -\lambda/2$ и два его полных набора решений ${}_{-}\varphi_{n_-}$ и ${}_{+}\varphi_{n_-}$. Данные решения параметризуются набором квантовых чисел n_- :

$$\begin{aligned} {}_{\pm}\varphi_{n_-}(t, x) &= C' \exp \left[ie\frac{E}{2} \left(\frac{1}{2}x_-^2 - t^2 \right) - \right. \\ &\left. - \frac{i}{2}(\lambda - 2i) \ln \frac{\pm i\pi_-}{\sqrt{eE}} - \frac{i}{2}p_-x_+ \right], \quad (36) \end{aligned}$$

$$\pi_- = p_- + eEx_-.$$

Квантовое число p_- является собственным значением оператора симметрии $i(\hat{Y}_1 + \hat{Y}_2)$:

$$i(\hat{Y}_1 + \hat{Y}_2) {}_{\pm}\varphi_{n_-}(t, x) = p_- {}_{\pm}\varphi_{n_-}(t, x).$$

В этом случае решения уравнения Дирака имеют вид (34) с функциями (36):

$$\begin{aligned} {}_{\pm}\tilde{\psi}_{n_-}(X) &= (\gamma P + m) {}_{\pm}\Phi_{n_-}(X), \\ {}_{\pm}\Phi_{n_-}(X) &= {}_{\pm}\varphi_{n_-}(t, x)\varphi_{\mathbf{p}_\perp}(\mathbf{r}_\perp)v_\sigma, \end{aligned} \quad (37)$$

Построим прямое и обратное интегральные преобразования, которые связывают функции (36) с функциями (30) и (31). Посмотрим на решения уравнения (25) вида

$$\begin{aligned} {}_{\pm}\varphi_{n_0}(t, x) &= (2\pi eE)^{-1/2} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{M}^*(p_0, p_-) {}_{\pm}\varphi_{n_-}(t, x) dp_-, \end{aligned} \quad (38)$$

которые удовлетворяют уравнению

$$\hat{p}_0 {}_{\pm}\varphi_{n_0}(t, x) = p_0 {}_{\pm}\varphi_{n_0}(t, x). \quad (39)$$

Подставляя (38) в (39) с учетом условия

$$\left[\partial_t - eE\partial_{p_-} + \frac{i}{2}p_- \right] \varphi_{n_-}(t, x) = 0,$$

видим, что функция $\tilde{M}(p_0, p_-)$ определяется как решение уравнения

$$-i \left(-eE\partial_{p_-} + \frac{i}{2}p_- \right) \tilde{M}(p_0, p_-) = p_0 \tilde{M}(p_0, p_-).$$

Выберем частное решение

$$\tilde{M}(p_0, p_-) = \exp \frac{i}{4eE} (p_-^2 - 4p_-p_0 + 2p_0^2),$$

которое удовлетворяет условию ортогональности

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{M}^*(p_0, p_-) \tilde{M}(p_0, p'_-) dp_0 &= \\ &= 2\pi eE \delta(p_- - p'_-). \end{aligned} \quad (40)$$

Запишем обратное преобразование

$$\begin{aligned} {}_{\pm}\varphi_{n_-}(t, x) &= (2\pi eE)^{-1/2} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{M}(p_0, p_-) {}_{\pm}\varphi_{n_0}(t, x) dp_0. \end{aligned} \quad (41)$$

Для совместности преобразований (38) и (41), в выражениях (30), (31) положим

$$C' = 2^{i\lambda/4} e^{\pi\lambda/4} (4\pi eE)^{-1/2}.$$

Обратное преобразование (41) показывает, что функции ${}_{\pm}\varphi_{n_{\pm}}(t, x)$ выражаются через функции ${}_{\pm}\varphi_{n_0}(t, x)$ с хорошо определенными левыми и правыми асимптотиками.

Из преобразований (38) и (41) следуют соответствующие соотношения между решениями уравнения Дирака:

$$\begin{aligned} {}_{\pm}\psi_{n_0}(X) &= (2\pi eE)^{-1/2} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{M}^*(p_0, p_{-}) {}_{\pm}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X) dp_{-}, \\ {}_{\pm}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X) &= (2\pi eE)^{-1/2} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{M}(p_0, p_{-}) {}_{\pm}\psi_{n_0}(X) dp_0, \end{aligned} \quad (42)$$

где ${}_{\pm}\psi_{n_0}(X)$ даны в (24) с функциями $\varphi_{n_0}(x)$, обозначенными как ${}_{\pm}\varphi_{n_0}(x)$, функции ${}_{\pm}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X)$ даются выражением (37). Из второго преобразования в (42) и соотношения (40) следует, что спиноры ${}_{\pm}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X)$ удовлетворяют условию ортогональности на гиперповерхности $x = \text{const}$:

$$\left({}_{\pm}\tilde{\psi}_{n_{-}}, {}_{\pm}\tilde{\psi}_{n'_{-}} \right)_x = -\delta_{n_{-}, n'_{-}}.$$

В соответствии с (32), функции ${}_{+}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X)$ описывают out-решения, а функции ${}_{-}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X)$ — in-решения. Коэффициенты $\tilde{g}(-|^{+})$ даны в (33) и не зависят от p_0 и p_{-} , а также связывают между собой наборы решений ${}_{\pm}\tilde{\psi}_{n_{-}}$.

При помощи (37) мы построили два полных и ортогональных набора решений $\left\{ \pm\tilde{\psi}_{n_{-}}(x) \right\}$ и $\left\{ \pm\tilde{\psi}_{n_{-}}(x) \right\}$ уравнения Дирака; дополнительные наборы решений выберем следующим образом:

$$\begin{aligned} {}_{-}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X) &= -\theta(\pi_{-}) {}_{-}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X) \tilde{g}(-|^{-}), \\ {}_{+}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X) &= -\theta(-\pi_{-}) {}_{+}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X) \tilde{g}(+|_{+}). \end{aligned} \quad (43)$$

Они могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} {}_{\pm}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X) &= (\gamma P + m) {}_{\pm}\Phi_{n_{-}}(X), \\ {}_{\pm}\Phi_{n_{-}}(X) &= {}_{\pm}\varphi_{n_{-}}(t, x) \varphi_{\mathbf{p}_{\perp}}(\mathbf{r}_{\perp}) v_{\chi, \sigma}, \\ {}_{\pm}\varphi_{n_{-}}(t, x) &= (2\pi)^{-1/2} \exp(-ip_0 t) {}_{\pm}\varphi_{n_{-}}(x), \end{aligned} \quad (44)$$

где

$$\begin{aligned} {}_{-}\varphi_{n_{-}}(t, x) &= -\theta(\pi_{-}) {}_{-}\varphi_{n_{-}}(t, x) \tilde{g}(-|^{-}), \\ {}_{+}\varphi_{n_{-}}(t, x) &= -\theta(-\pi_{-}) {}_{+}\varphi_{n_{-}}(t, x) \tilde{g}(+|_{+}). \end{aligned} \quad (45)$$

Применяя интегральное преобразование типа (38) к решениям (45), получим

$$\begin{aligned} (2\pi eE)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{M}^*(p_0, p_{-}) {}_{-}\varphi_{n_{-}}(t, x) dp_{-} &= \\ &= {}_{-}\varphi_{n_0}(t, x), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (2\pi eE)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{M}^*(p_0, p_{-}) {}_{+}\varphi_{n_{-}}(t, x) dp_{-} &= \\ &= {}_{+}\varphi_{n_0}(t, x). \end{aligned}$$

Тогда

$$\begin{aligned} {}_{\pm}\psi_{n_0}(X) &= \\ &= (2\pi eE)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{M}^*(p_0, p_{-}) {}_{\pm}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X) dp_{-}, \\ {}_{\pm}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X) &= \\ &= (2\pi eE)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{M}(p_0, p_{-}) {}_{\pm}\psi_{n_0}(X) dp_0, \end{aligned} \quad (46)$$

где ${}_{\pm}\psi_{n_0}(X)$ даны в (24), а функции $\varphi_{n_0}(x)$ обозначены как ${}_{\pm}\varphi_{n_0}(x)$. Функции ${}_{\pm}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X)$ даны в (44).

Используя второе преобразование в (46) и соотношения (26), мы видим что выполняются соотношения ортогональности:

$$\begin{aligned} \left({}_{+}\tilde{\psi}_{n_{-}}, {}_{-}\tilde{\psi}_{n'_{-}} \right)_x &= 0, \\ \left({}_{-}\tilde{\psi}_{n_{-}}, {}_{+}\tilde{\psi}_{n'_{-}} \right)_x &= 0. \end{aligned}$$

Очевидно, что

$$\begin{aligned} {}_{+}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X) &= 0, \quad \pi_{-} > 0, \\ {}_{-}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X) &= 0, \quad \pi_{-} < 0. \end{aligned}$$

Используя (42) и (46) и учитывая, что коэффициенты \tilde{g}' не зависят от p_0 , из (27), находим

$$\begin{aligned} {}_{+}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X) &= \tilde{g}(+|^{-})^{-1} \times \\ &\times \left[{}_{-}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X) \tilde{g}(-|^{-}) + {}_{-}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X) \right] = 0, \quad \pi_{-} > 0, \\ {}_{-}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X) &= \tilde{g}(-|_{+})^{-1} \times \\ &\times \left[{}_{+}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X) \tilde{g}(+|_{+}) + {}_{+}\tilde{\psi}_{n_{-}}(X) \right] = 0, \quad \pi_{-} < 0. \end{aligned}$$

Таким образом, соотношения (43) справедливы для всех $\tilde{g}(-|^{-})$ и $\tilde{g}(+|_{+})$, удовлетворяющих условиям (28).

Заметим, что подобные наборы решений уравнения Клейна–Гордона для скалярных частиц, находящихся между двумя обкладками конденсатора, получены в работе [26]. Эти решения связаны между собой при помощи интегральных преобразований, аналогичных преобразованиям (42) и (46).

3.2. Представления собственного времени

Спинорные сингулярные функции в КЭД в x -ступеньках определяются уравнениями (1), (2) и (3). В случае L -постоянного электрического поля их можно найти как суммы по построенным выше решениям, см. [4]. Отметим, что для $L \rightarrow \infty$ достаточно рассматривать суммы только в зоне Клейна. В этой зоне решения (30) и (31) удовлетворяют следующим соотношениям ортонормированности на гиперплоскости $t = \text{const}$:

$$\begin{aligned} (\zeta\psi_{n_0}, \zeta\psi_{n'_0}) &= (\zeta\psi_{n_0}, \zeta\psi_{n'_0}) = \\ &= \delta_{\sigma,\sigma'}\delta(p_0 - p'_0)\delta(\mathbf{p}_\perp - \mathbf{p}'_\perp)\mathcal{M}_{n_0}, \\ (\zeta\psi_{n_0}, \zeta\psi_{n'_0}) &= 0, \\ (\psi, \psi') &= \int \psi^\dagger(X)\psi'(X) d\mathbf{r}, \\ \mathcal{M}_{n_0} &= |\tilde{g}(+|-)|^2 = e^{\pi\lambda}. \end{aligned}$$

Тогда сингулярные функции можно представить в виде

$$\begin{aligned} S^c(X, X') &= \\ &= \theta(t - t')S^-(X, X') - \theta(t' - t)S^+(X, X'), \\ S^-(X, X') &= i \sum_{n_0} \mathcal{M}_{n_0}^{-1} \times \\ &\times {}^+\psi_{n_0}(X)\tilde{g}(+|-)\tilde{g}(-|-)^{-1} {}^-\bar{\psi}_{n_0}(X'), \quad (47) \\ S^+(X, X') &= i \sum_{n_0} \mathcal{M}_{n_0}^{-1} \times \\ &\times {}^-\psi_{n_0}(X)\tilde{g}(-|+)\tilde{g}(+|+)^{-1} {}^+\bar{\psi}_{n_0}(X'); \\ S(X, X') &= S^-(X, X') + S^+(X, X'); \quad (48) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S_{\text{in/out}}^c(X, X') &= \\ &= \theta(t - t')S_{\text{in/out}}^-(X, X') - \theta(t' - t)S_{\text{in/out}}^+(X, X'), \\ S_{\text{in/out}}^-(X, X') &= \\ &= i \sum_{n_0} \mathcal{M}_{n_0}^{-1} {}^\mp\psi_{n_0}(X) {}^\mp\bar{\psi}_{n_0}(X'), \quad (49) \end{aligned}$$

$$S_{\text{in/out}}^+(X, X') = i \sum_{n_0} \mathcal{M}_{n_0}^{-1} {}^\mp\psi_{n_0}(X) {}^\mp\bar{\psi}_{n_0}(X'),$$

$$\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma^0.$$

Используя соотношения (27), представим сингулярные функции $S^p(X, X')$ и $S^{\bar{p}}(X, X')$ в (2) следующим образом:

$$\begin{aligned} S^p(X, X') &= \\ &= i \sum_{n_0} \mathcal{M}_{n_0}^{-1} {}^-\psi_{n_0}(X)\tilde{g}(-|-)^{-1} {}^-\bar{\psi}_{n_0}(X'), \quad (50) \\ S^{\bar{p}}(X, X') &= \\ &= -i \sum_{n_0} \mathcal{M}_{n_0}^{-1} {}^+\psi_{n_0}(X)\tilde{g}(+|+)^{-1} {}^+\bar{\psi}_{n_0}(X'). \end{aligned}$$

Подчеркнем, что если вакуум стабилен, то обе функции обращаются в нуль.

Используя (42), (46) и (43), получим следующие интегральные представления:

$$\begin{aligned} S^-(X, X') &= -i \sum_{\sigma} \int dp_- d\mathbf{p}_\perp \times \\ &\times \theta(+\pi'_-) e^{-\pi\lambda/2} {}^-\tilde{\psi}_{n_-}(X) {}^-\bar{\psi}_{n_-}(X'), \quad (51) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S^+(X, X') &= -i \sum_{\sigma} \int dp_- d\mathbf{p}_\perp \times \\ &\times \theta(-\pi'_-) e^{-\pi\lambda/2} {}^-\tilde{\psi}_{n_-}(X) {}^+\bar{\psi}_{n_-}(X'), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S^p(X, X') &= -i \sum_{\sigma} \int dp_- d\mathbf{p}_\perp \times \\ &\times \theta(+\pi'_-) e^{-\pi\lambda} {}^-\tilde{\psi}_{n_-}(X) {}^-\bar{\psi}_{n_-}(X'), \quad (52) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S^{\bar{p}}(X, X') &= i \sum_{\sigma} \int dp_- d\mathbf{p}_\perp \times \\ &\times \theta(-\pi'_-) e^{-\pi\lambda} {}^+\tilde{\psi}_{n_-}(X) {}^+\bar{\psi}_{n_-}(X'). \end{aligned}$$

Учитывая (37) и (43) и выполнив суммирование по квантовым числам σ ,

$$\sum_{\sigma} v_{1,\sigma} v_{1,\sigma}^\dagger = \sum_{\sigma} (v_{1,\sigma} \otimes v_{1,\sigma}^\dagger) = \Xi_+ = \frac{1}{2}(1 + \gamma^0\gamma^1),$$

перепишем представление (51) следующим образом:

$$\begin{aligned}
 S^\pm(X, X') &= \int \theta(\mp \pi'_\pm) Y^{(\pm)}(X, X'; p_-) dp_-, \\
 Y^{(\pm)}(X, X'; p_-) &= \frac{1}{4\pi} \left[\gamma^0 + \frac{(m - \gamma_\perp \hat{\mathbf{p}}_\perp)}{\pi_-} \right] \Xi_+ \times \\
 &\quad \times \left[\gamma^0 + \frac{(m + \gamma_\perp \hat{\mathbf{p}}'_\perp)}{\pi'_\pm} \right] \gamma^0 \mp F, \\
 \mp F &= \frac{i}{(2\pi)^{d-2}} I_1 \exp \left\{ \frac{i}{2} \left[eE \left(\frac{x_-^2 - x'^2}{2} - t^2 + t'^2 \right) - \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - p_-(x_+ - x'_+) \right] - im^2 \mp a \right\}, \\
 I_1 &= \int \exp \left[-i \mp a p_\perp^2 + i(\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp) \mathbf{p}_\perp \right] d\mathbf{p}_\perp, \\
 \mp a &= \frac{1}{2eE} \left\{ \ln(\mp i \tilde{\pi}_-) - [\ln(\pm i \tilde{\pi}'_-)]^* \right\}, \\
 \tilde{\pi}_- &= \pi_- / \sqrt{eE}, \quad \tilde{\pi}'_- = \pi'_- / \sqrt{eE}.
 \end{aligned}$$

Для комплексной переменной $\mp a$ выберем главную ветвь логарифма:

$$\begin{aligned}
 \operatorname{Re}(\mp a) &= \frac{1}{2eE} \ln \left| \frac{\pi_-}{\pi'_\pm} \right|, \\
 \operatorname{Im}(\mp a) &= \mp \frac{\pi}{2eE} \operatorname{sgn}(\pi_-) \theta(-\pi_- \pi'_\pm).
 \end{aligned}$$

Вычисляя гауссовый интеграл I_1 , получим

$$\begin{aligned}
 \mp F(X, X'; p_-) &= i \left(\frac{-i}{4\pi \mp a} \right)^{(d-2)/2} \times \\
 &\quad \times \exp \left\{ -i \frac{\pi_- + \pi'_\pm}{4} y_+ + \right. \\
 &\quad \left. + ie\Lambda - i \mp am^2 + \frac{i}{4 \mp a} |\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp|^2 \right\}, \\
 \Lambda &= -Ey_0(x + x')/2, \quad y_\pm = x_\pm - x'_\pm.
 \end{aligned} \tag{53}$$

Учитывая данный результат, можно записать функции $S^\pm(X, X')$ в виде

$$\begin{aligned}
 S^\pm(X, X') &= \mp (\gamma P + m) \Delta^\pm(X, X'), \\
 \Delta^\pm(X, X') &= \int dp_- \theta(\mp \pi'_\pm) \mp f(X, X'; p_-), \\
 \mp f(X, X'; p_-) &= \exp(-eE\gamma^0\gamma^1 \mp a) \mp f^{(0)}, \\
 \mp f^{(0)} &= - \left(\frac{-i}{4\pi} \right)^{d/2} (\mp a)^{(2-d)/2} \times \\
 &\quad \times \exp \left\{ -i \mp am^2 + \frac{i}{4 \mp a} |\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp|^2 - i \frac{\pi_- + \pi'_\pm}{4} y_+ + \right. \\
 &\quad \left. + ie\Lambda - \frac{1}{2} \left\{ \ln(\mp i \tilde{\pi}_-) + [\ln(\mp i \tilde{\pi}'_-)]^* \right\} \right\}.
 \end{aligned} \tag{54}$$

Полагая $y_- \neq 0$, выполним замену переменной $s = -a$ в интеграле $\Delta^+(X, X')$ и замену переменной $s = +a$ в интеграле $\Delta^-(X, X')$:

$$\begin{aligned}
 \Delta^+(X, X') &= \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(-\pi'_\pm) \mp f(X, X'; p_-) dp_- = \\
 &= \int_{\Gamma_c} \tilde{f}(X, X'; s) \frac{eE ds}{\sinh(eEs)} - \\
 &\quad - \theta(+y_-) \int_{\Gamma_c - \Gamma_2 - \Gamma_1} \tilde{f}(X, X'; s) \frac{eE ds}{\sinh(eEs)}, \\
 \Delta^-(X, X') &= \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(+\pi'_\pm) \mp f(X, X'; p_-) dp_- = \\
 &= \int_{\Gamma_c} \tilde{f}(X, X'; s) \frac{eE ds}{\sinh(eEs)} - \\
 &\quad - \theta(-y_-) \int_{\Gamma_c - \Gamma_2 - \Gamma_1} \tilde{f}(X, X'; s) \frac{eE ds}{\sinh(eEs)},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{f}(X, X'; s) &= \\
 &= - \left(\frac{-i}{4\pi s} \right)^{d/2} \frac{1}{s} \exp \left[-eE\gamma^0\gamma^1 s + ie\Lambda - ism^2 + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{i}{4s} |\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp|^2 - \frac{i}{4} eE \coth(eEs) (y_0^2 - y_1^2) \right].
 \end{aligned}$$

Все контуры интегрирования показаны на рис. 1. Замыкая контур интегрирования $\Gamma_c - \Gamma_2 - \Gamma_1$ на $\operatorname{Re} s \rightarrow \pm\infty$, преобразуем его в контур Γ (см. рис. 2).

В итоге получим

$$\begin{aligned}
 S^\pm(X, X') &= (\gamma P + m) \Delta^\pm(X, X'), \\
 \mp \Delta^\pm(X, X') &= \int_{\Gamma_c} f(X, X'; s) ds - \\
 &\quad - \theta(\pm y_-) \int_{\Gamma} f(X, X'; s) ds.
 \end{aligned} \tag{55}$$

Ядро Фока-Швингера $f(X, X'; s)$ дано выражением (18) с калибровочно-зависимым членом Λ в (53). Заметим, что этот член может быть представлен как интеграл по кривой (19), где в нашем случае потенциал $A_\mu(X)$ определяется выражением (23).

В работе [18], было показано что

$$\int_{\Gamma} F(X, X'; s) ds = 0, \quad y_\mu y^\mu < 0,$$

откуда следует, что интегралы $\Delta^\pm(X, X')$ в (55) могут быть записаны следующим образом:

$$\mp \Delta^\pm(X, X') = \int_{\Gamma_c} f(X, X'; s) ds - \theta(\pm y_0) \int_{\Gamma} f(X, X'; s) ds. \quad (56)$$

Таким образом, мы вывели интегральное представление Швингера (16) для причинного пропагатора (47) и продемонстрировали, что перестановочная функция (48) имеет универсальную структуру (17):

$$\begin{aligned} S^c(X, X') &= (\gamma P + m)\Delta^c(X, X'), \\ \Delta^c(X, X') &= \int_{\Gamma_c} f(X, X'; s) ds, \\ S(X, X') &= (\gamma P + m)\Delta(X, X'), \\ \Delta(X, X') &= \operatorname{sgn}(t - t') \int_{\Gamma} f(X, X'; s) ds. \end{aligned}$$

Фактически, приведенный выше результат представляет собой косвенное доказательство полноты построенных выше наборов решений на гиперплоскости t -const. Представление (56) верно для произвольных X и X' , несмотря на то, что замена переменных в интеграле (54) проводилась при условии $y_- \neq 0$. Все это подтверждает, что представление (56) эквивалентно представлению (47).

Действуя аналогично, представим сингулярные функции $S^p(X, X')$ и $S^{\bar{p}}(X, X')$ в (52) следующим образом:

$$\begin{aligned} S^p(X, X') &= \int dp_- \theta(+\pi'_-) \tilde{Y}^{(-)}(X, X'; p_-), \\ S^{\bar{p}}(X, X') &= \int dp_- \theta(-\pi'_-) \tilde{Y}^{(+)}(X, X'; p_-), \\ \tilde{Y}^{(\pm)}(X, X'; p_-) &= \frac{1}{4\pi} \left[\gamma^0 + \frac{(m - \gamma_\perp \hat{\mathbf{p}}_\perp)}{\pi_-} \right] \Xi_\pm \times \\ &\quad \times \left[\gamma^0 + \frac{(m + \gamma_\perp \hat{\mathbf{p}}'_\perp)}{\pi'_-} \right] \gamma^0 \tilde{F}^{(\pm)}, \\ \tilde{F}^{(\pm)} &= \frac{\pm i I_2}{(2\pi)^{d-2}} \exp \left\{ \frac{i}{2} \left[eE \left(\frac{x_-^2 - x'^2}{2} - t^2 + t'^2 \right) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - p_-(x_+ - x'_+) \right] - i \left(b_\pm - \frac{i\pi}{2eE} \right) m^2 \right\}, \\ I_2 &= \int \exp \left[-i \left(b_\pm - \frac{i\pi}{2eE} \right) p_\perp^2 + i(\mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}'_\perp) \mathbf{p}_\perp \right] d\mathbf{p}_\perp, \\ b_\pm &= \left(\ln(\pm i \tilde{\pi}_-) - [\ln(\pm i \tilde{\pi}'_-)]^* \right) / (2eE). \end{aligned}$$

Полагая $y_- \neq 0$, выполним в интеграле $S^p(X, X')$ замену переменных

$$s = b_- - i\pi / (2eE),$$

так что

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(s) &= \frac{1}{2eE} \log \left| \frac{\pi_-}{\pi'_-} \right|, \\ \operatorname{Im}(s) &= -\frac{\pi}{2eE} [\theta(+\pi_-) + \theta(-\pi'_-)], \end{aligned}$$

а в интеграле $S^{\bar{p}}(X, X')$ — замену переменных

$$s = b_+ - i\pi / (2eE),$$

так что

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(s) &= \frac{1}{2eE} \log \left| \frac{\pi_-}{\pi'_-} \right|, \\ \operatorname{Im}(s) &= -\frac{\pi}{2eE} [\theta(-\pi_-) + \theta(-\pi'_-)]. \end{aligned}$$

Тогда

$$\begin{aligned} S^p(X, X') &= - \int_{\Gamma_p} f(X, X'; s) ds - \\ &\quad - \theta(-y_-) \int_{\Gamma_2 + \Gamma_3 - \Gamma_p} f(X, X'; s) ds, \\ S^{\bar{p}}(X, X') &= - \int_{\Gamma_p} f(X, X'; s) ds - \\ &\quad - \theta(+y_-) \int_{\Gamma_2 + \Gamma_3 - \Gamma_p} f(X, X'; s) ds. \end{aligned} \quad (57)$$

Замыкая контур интегрирования $\Gamma_2 + \Gamma_3 - \Gamma_p$ при $\operatorname{Re} s \rightarrow \pm\infty$ трансформируем его в контур Γ_p^1 (см. рис. 2) с радиусом, стремящимся к нулю:

$$\begin{aligned} S^p(X, X') &= (\gamma P + m)\Delta^p(X, X'), \\ \Delta^p(X, X') &= - \int_{\Gamma_p} f(X, X'; s) ds - \\ &\quad - \theta(-y_-) \int_{\Gamma_p^1} f(X, X'; s) ds; \\ S^{\bar{p}}(X, X') &= (\gamma P + m)\Delta^{\bar{p}}(X, X'), \\ \Delta^{\bar{p}}(X, X') &= - \int_{\Gamma_p} f(X, X'; s) ds - \\ &\quad - \theta(+y_-) \int_{\Gamma_p^1} f(X, X'; s) ds. \end{aligned} \quad (58)$$

Заметим, что в пределе $s \rightarrow \pm 0 - i\pi / eE$ мы имеем

$$\begin{aligned} \lim_{s \rightarrow \pm 0 - i\pi/eE} f(X, X'; s) &= \\ &= \pm f_{\perp}(X, X') \delta(y^0) \delta(y^1), \\ f_{\perp}(X, X') &= -i \left(\frac{eE}{4\pi^2} \right)^{(d-2)/2} \times \\ &\times \exp \left(i\pi \gamma^0 \gamma^1 - \frac{\pi m^2}{eE} - \frac{eE}{4\pi} |\mathbf{r}_{\perp} - \mathbf{r}'_{\perp}|^2 \right). \end{aligned} \quad (59)$$

Принимая во внимание (59), можно выделить все особенности в интеграле (58):

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_p^1} f(X, X'; s) ds &= \theta(y_1^2 - y_0^2) \Delta_R^p(X, X'), \\ \Delta_R^p(X, X') &= \int_{\Gamma_R^p} f(X, X'; s) ds. \end{aligned}$$

Здесь Γ_R^p — контур интегрирования проходящий по часовой стрелке в виде круга с центром $s = -i\pi/eE$ и достаточно малого радиуса R , так что внутри данного контура функция $f(x, x', s)$ не имеет других особенностей.

Приведем окончательный вид сингулярных функций $S^{p/\bar{p}}$:

$$\begin{aligned} S^{p/\bar{p}}(X, X') &= (\gamma P + m) \Delta^{p/\bar{p}}(X, X'), \\ -\Delta^p(X, X') &= \int_{\Gamma_p} f(X, X'; s) ds + \\ &+ \theta(y^1) \int_{\Gamma_p^1} f(X, X'; s) ds, \\ -\Delta^{\bar{p}}(X, X') &= \int_{\Gamma_p} f(X, X'; s) ds + \\ &+ \theta(-y^1) \int_{\Gamma_p^1} f(X, X'; s) ds. \end{aligned} \quad (60)$$

Заметим, что контур Γ_p^1 трансформируется в контур $\Gamma_2 + \Gamma_3 - \Gamma_p$. Ступенчатая функция $\theta(\pm y^1)$ может быть представлена как функция $\theta(\mathbf{y}\mathbf{E}/E)$ от проекции $\mathbf{y}\mathbf{E}/E$ вектора смещения \mathbf{y} на направление электрического поля.

Учитывая (60), мы получаем представление по собственному времени для сингулярных функций $S_{in/out}^c(X, X')$ и $S_{in/out}^{\mp}(X, X')$:

$$\begin{aligned} S_{in/out}^c(X, X') &= S^{p/\bar{p}}(X, X') + S^c(X, X'), \\ S_{in/out}^{\mp}(X, X') &= \mp S^{p/\bar{p}}(X, X') + S^{\pm}(X, X'). \end{aligned} \quad (61)$$

Заметим, что замена переменных в интеграле (57) была выполнена при условии $y_- \neq 0$. Однако представления (52) справедливы для всех y_- .

Можно проверить, что представления (60) (и следовательно, представления (61)) справедливы для произвольных X и X' . Для этого мы нужно показать, что для всех X и X' представления (60) удовлетворяют тому же самому уравнению Дирака, что и представления (50). Сначала мы должны проверить, что интегралы (60) удовлетворяют уравнению Дирака для всех X и X' . Затем остается убедиться, что при $t = t'$ условия Коши для обобщенных функций (50) совпадают с условиями для выражений (60).

Заметим, что соответствующие скалярные сингулярные функции могут быть получены из представлений для спинорных функций $\Delta^{\pm}(X, X')$, $\Delta^c(X, X')$, $\Delta(x, x')$ и $\Delta^{p/\bar{p}}(X, X')$, если формально положить все γ -матрицы равными нулю.

Мы рассмотрели случай, когда L -постоянное электрическое поле направлено вдоль оси x , $E_x = E$. Ясно, что выбор противоположного направления соответствует отражению $x \rightarrow -x$, $x' \rightarrow -x'$ и замене $\gamma^1 \rightarrow -\gamma^1$. Поэтому достаточно рассмотреть случай одного направления электрического поля. Мы видим, что представления (60) и (61) с точностью до калибровочного слагаемого совпадают с представлениями (20) и (21). Их легко записать в ковариантном виде с помощью тензора электромагнитного поля $F_{\mu\nu}$, см. (22). Напомним, что выражение (22) было найдено для постоянного электрического поля, задаваемого нестационарным потенциалом в рамках общей формулировки КЭД для такого случая [3].

4. ОБСУЖДЕНИЕ

В данной работе построены и исследованы сингулярные функции в КЭД сильного поля в T -постоянном электрическом поле и в КЭД сильного поля в L -постоянном электрическом поле. Для обоих случаев найдены in- и out-решения уравнения Дирака специального вида в переменных светового конуса. С помощью этих решений построены интегральные представления Фока – Швингера по собственному времени для всех видов сингулярных функций, необходимых для вычисления амплитуд вероятностей процессов и средних значений физических величин. Впервые получены интегральные представления Фока – Швингера для сингулярных функций в КЭД сильного поля в L -постоянном электрическом поле. Получены представления сингулярных функций в КЭД сильного поля в T -постоянном электрическом поле для произвольной ориентации внеш-

него электрического поля, что нетривиальным образом обобщает результаты работ [18, 19].

После стандартной ультрафиолетовой регуляризации и перенормировки все физические величины, которые могут быть получены при помощи причинного пропагатора $S^c(X, X')$, конечны в пределе $L \rightarrow \infty$ и $T \rightarrow \infty$. К примеру, это видно для вакуумных матричных элементов тензора энергии-импульса:

$$\begin{aligned} \langle T_{\mu\nu} \rangle^c &= \langle 0, \text{out} | T_{\mu\nu} | 0, \text{in} \rangle c_v^{-1}, \\ T_{\mu\nu} &= \frac{1}{2} (T_{\mu\nu}^{\text{can}} + T_{\nu\mu}^{\text{can}}), \\ T_{\mu\nu}^{\text{can}} &= \frac{1}{4} \left\{ \left[\hat{\Psi}^\dagger(X) \gamma^0, \gamma_\mu P_\nu \hat{\Psi}(X) \right] + \right. \\ &\quad \left. + \left[P_\nu^* \hat{\Psi}^\dagger(X) \gamma^0, \gamma_\mu \hat{\Psi}(X) \right] \right\}, \end{aligned}$$

которые могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} \langle T_{\mu\nu} \rangle^c &= i \operatorname{tr} [A_{\mu\nu} S^c(X, X')] |_{X=X'}, \\ A_{\mu\nu} &= \frac{1}{4} [\gamma_\mu (P_\nu + P_\nu^*) + \gamma_\nu (P_\mu + P_\mu^*)]. \end{aligned}$$

Естественно, что проблемы нестабильности вакуума и ее проявления совершенно различны в L -постоянном поле и T -постоянном поле для конечных интервалов T и L . Однако в пределе $T, L \rightarrow \infty$ соответствующие характеристики нестабильности вакуума оказываются одинаковыми. В частности, этот факт можно интерпретировать следующим образом: оба случая представляют собой разные регуляризации в идеализированном случае постоянного однородного электрического поля. Однако эта эквивалентность может отсутствовать для средних значений физических величин, которые могут быть получены с использованием сингулярных функций $S_{\text{in/out}}^c(X, X')$. Например, вакуумные средние тензора энергии-импульса,

$$\langle T_{\mu\nu} \rangle_{\text{in/out}} = \langle 0, \text{in/out} | T_{\mu\nu} | 0, \text{in/out} \rangle,$$

могут быть представлены в виде

$$\langle T_{\mu\nu} \rangle_{\text{in/out}} = i \operatorname{tr} \left[A_{\mu\nu} S_{\text{in/out}}^c(X, X') \right] |_{X=X'},$$

где учтены вклады от $S^{p/\bar{p}}(X, X')$. Такие вклады неограниченно растут в пределах $T \rightarrow \infty$ и $L \rightarrow \infty$, см. работы [5, 20]. Этот факт связан с неограниченным ростом плотности рождающихся пар электронов и позитронов. Отсюда следует, что в таких случаях существует существенная физическая разница между T -постоянным и L -постоянным полем.

Тем не менее, в случаях, когда соответствующие вклады в диаграммы Фейнмана конечны, можно использовать полученные собственно-временные представления сингулярных функций $S^{p/\bar{p}}(X, X')$. Тогда регуляризация постоянного однородного электрического поля L -постоянным полем эквивалентна регуляризации T -постоянным полем при $T, L \rightarrow \infty$.

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 19-12-00042).

ЛИТЕРАТУРА

1. W. Greiner, B. Müller, and J. Rafelski, *Quantum Electrodynamics of Strong Fields*, Springer-Verlag, Berlin (1985).
2. J. Schwinger, Phys. Rev. **82**, 664 (1951).
3. D. M. Gitman, J. Phys. A **10**, 2007 (1977); E. S. Fradkin and D. M. Gitman, Fortschr. Phys. **29**, 381 (1981); E. S. Fradkin, D. M. Gitman, and S. M. Shvartsman, *Quantum Electrodynamics with Unstable Vacuum*, Springer-Verlag, Berlin (1991).
4. S. P. Gavrilov and D. M. Gitman, Phys. Rev. D **93**, 045002 (2016).
5. S. P. Gavrilov and D. M. Gitman, Phys. Rev. D **93**, 045033 (2016).
6. S. P. Gavrilov, D. M. Gitman, and A. A. Shishmarev, Phys. Rev. D **96**, 096020 (2017).
7. N. N. Bogoliubov and D. V. Shirkov, *Introduction to the Theory of Quantized Fields*, John Wiley & Sons. Inc., New York (1980).
8. G. V. Dunne (eds.), *From Fields to Strings: Circumnavigating Theoretical Physics*, World Scientific, Singapore (2005).
9. G. V. Dunne and T. Hall, Phys. Rev. D **58**, 10502 (1998).
10. V. P. Gusynin and I. A. Shovkovy, Can. J. Phys. **74**, 282 (1996); V. P. Gusynin and I. A. Shovkovy, J. Math. Phys. **40**, 5406 (1999).
11. H. Gies and F. Karbstein, J. High Energy Phys. **2017**(3), 108 (2017).
12. F. Karbstein, Phys. Rev. D **95**, 076015 (2017).
13. F. Karbstein, Phys. Rev. Lett. **122**, 211602 (2019).
14. S. P. Gavrilov and D. M. Gitman, Phys. Rev. D **95**, 076013 (2017).

15. S. P. Gavrilov, D. M. Gitman, and A. A. Shishmarev, *Phys. Rev. D* **99**, 116014 (2019).
16. D. G. Sevostyanov, I. A. Aleksandrov, G. Plunien, and V. M. Shabaev, arXiv:2012.10751 [hep-ph] (2020).
17. G. V. Dunne and Z. Harris, *Phys Rev. D* **103**, 065014 (2021).
18. S. P. Gavrilov and D. M. Gitman, *J. Math. Phys.* **37**, 3118 (1996).
19. S. P. Gavrilov, D. M. Gitman, and Sh. M. Shvartsman, *Sov. J. Nucl. Phys.* **29**, 567 (1979); S. P. Gavrilov, D. M. Gitman, and Sh. M. Shvartsman, *Sov. J. Nucl. Phys.* 715 (1979); S. P. Gavrilov, D. M. Gitman, and A. E. Gonçalves, *J. Math. Phys.* **39**, 3547 (1998).
20. S. P. Gavrilov, D. M. Gitman, and N. Yokomizo, *Phys. Rev. D* **86**, 125022 (2012).
21. N. B. Narozhnyi and A. I. Nikishov, *Theor. Math. Phys.* **26**, 9 (1976).
22. V. Fock, *Phys. Z. Sowjetunion* **12**, 404 (1937).
23. A. V. Shapovalov and I. V. Shirokov, *Theor. Math. Phys.* **104**, 921 (1995).
24. V. G. Bagrov, M. C. Baldiotti, D. M. Gitman, and I. V. Shirokov, *J. Math. Phys.* **43**, 2284 (2002).
25. A. I. Breev and A. V. Shapovalov, *Symmetry* **12**, 1867 (2020).
26. A. I. Breev, S. P. Gavrilov, and D. M. Gitman, *Phys. Complex Systems* **1**, 30 (2020).

ОПТОМЕХАНИЧЕСКАЯ ЛАЗЕРНАЯ ГЕНЕРАЦИЯ И ДОМЕННЫЕ СТЕНКИ, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ ЭКСИТОН-ФОНОННЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

А. В. Юмин^а, А. В. Пошакинский^б, А. Н. Поддубный^{б,а*}

^а Университет ИТМО
197101, Санкт-Петербург, Россия

^б Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе
194021, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 26 июля 2021 г.,
после переработки 4 октября 2021 г.
Принята к публикации 4 октября 2021 г.

Теоретически исследовано взаимодействие оптически возбужденных экситонов с акустическими волнами в планарных полупроводниковых наноструктурах в сильнонелинейном режиме. Для частоты оптической накачки выше частоты экситонного резонанса описан режим многомодовой оптомеханической лазерной генерации и продемонстрированы широкополосные спектры излучения, подобные хаотическим. Для частоты оптической накачки ниже частоты экситонного резонанса предсказано формирование распространяющихся оптомеханических доменных стенок, обусловленных оптомеханической нелинейностью. Условия устойчивости доменных стенок исследованы аналитически и согласуются с результатами прямого численного моделирования. Полученные результаты применимы к нелинейному распространению звука в массивах квантовых ям или в планарных полупроводниковых брэгговских микрорезонаторах, поддерживающих экситон-поляритонные моды.

DOI: 10.31857/S0044451022020067

1. ВВЕДЕНИЕ

Полупроводниковая оптомеханика, основанная на использовании экситонных поляритонов — гибридных квазичастиц, являющихся смесью фотонов и материальных возбуждений, — испытывает в данный момент бурное развитие, вызванное успехами в технологиях создания планарных наносистем [1]. Недавно были реализованы фононные лазеры с поляритонной накачкой [2] и динамически перестраиваемые массивы поляритонных параметрических резонаторов [3]. Особенностью поляритонной платформы является наличие резонансного фотоупругого взаимодействия в дополнение к геометрическому оптомеханическому взаимодействию [4]. С акустической волной может взаимодействовать как экситонная, так и фотонная компонента поляритона, что может приводить к усилению оптомеханического

взаимодействия [5]. Было предсказано, что поляритонные оптомеханические системы могут усиливать звук \mathcal{PT} -симметричным образом [6], а также обладают сильной акустической невзаимностью [7]. Однако большинство исследований нелинейной оптомеханической динамики поляритонов до сих пор проводилось в режиме оптомеханического резонатора, когда лишь несколько локализованных экситонных, фотонных и акустических мод взаимодействуют друг с другом, см. работу [8] и ссылки в ней. Учитывая огромный прогресс в понимании коллективных нелинейных оптомеханических эффектов в массивах связанных резонаторов [9–14], включая явление синхронизации [12, 15], формирование солитонов [14] и химерные состояния [11], актуально рассмотреть распределенных поляритонных систем, в которых акустические волны взаимодействуют с экситонами и светом.

В настоящей работе теоретически изучено нелинейное оптомеханическое взаимодействие между оптически накачиваемыми экситонами и распространяющимися акустическими волнами. Мы предпо-

* E-mail: poddubny@coherent.ioffe.ru

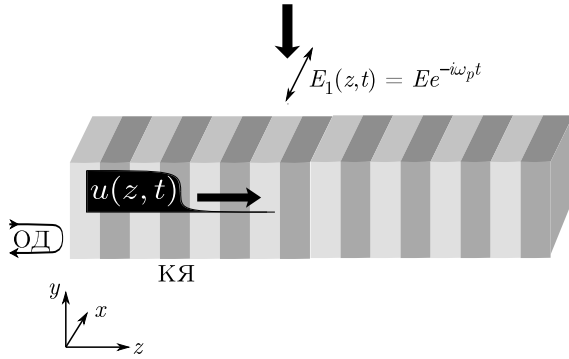


Рис. 1. Схематическое изображение рассматриваемой структуры. Оптомеханическая доменная стенка распространяется перпендикулярно массиву полупроводниковых квантовых ям (КЯ) при наличии однородной оптической накачки $E \exp(-i\omega_p t)$ (ОД — оптическое детектирование)

лагаем, что экситоны имеют большую массу и, следовательно, квазилокализованы в пространстве. Такая ситуация обычно реализуется в периодических полупроводниковых сверхрешетках, где экситоны локализованы внутри квантовых ям, а продольная акустическая волна может свободно распространяться вдоль нормали структуры [5, 16]. Подобная структура изображена схематически на рис. 1. Помимо этого, полученные результаты могут быть применены к латерально распространяющимся акустическим волнам в планарных брэгговских полупроводниковых микрорезонаторах [3]. В работе продемонстрировано, что нелинейная оптомеханическая динамика может быть довольно сложной в зависимости от частоты накачки, длины структуры и граничных условий. Помимо известного режима оптомеханической лазерной генерации [17] мы также предсказываем образование движущихся с дозвуковой скоростью оптомеханических доменных стенок.

2. МОДЕЛЬ

Рассматривается распространение взаимодействующих света, экситонов и акустических волн вдоль нормали z плоской периодической полупроводниковой наноструктуры, такой как массив квантовых ям, показанный на рис. 1. Когда длины оптических и акустических волн больше периода структуры вдоль оси роста z , систему можно рассматривать как сплошную среду. Например, эксперимент по мандельштам-бриллюэновскому рассеянию экситонных поляритонов в работе [5] был проведен для 40 квантовых ям GaAs толщиной 17.1 нм, разделен-

ных барьерами AlAs толщиной 7.5 нм, когда приближение сплошной среды вполне оправдано. Лагранжиан для такой системы имеет вид

$$L = \frac{1}{8\pi} \left[\frac{(\partial_t A)^2}{c^2} - (\partial_z A)^2 \right] - \frac{1}{c} P \partial_t A + \frac{\rho}{2} (\partial_t u)^2 - \frac{\mathcal{E}}{2} (\partial_z u)^2 + \frac{f}{2} [(\partial_t P)^2 - (\omega_x + \Xi \partial_z u)^2 P^2]. \quad (1)$$

Первый член лагранжиана (1) соответствует свободному электромагнитному полю, описываемому векторным потенциалом $A(z, t)$, а второй член представляет его взаимодействие с экситонной поляризацией $P(z, t)$. Вторая строка лагранжиана (1) описывает поле механических смещений $u(z, t)$, где ρ — плотность среды и \mathcal{E} — модуль Юнга. Последняя строка уравнения (1) представляет собой лагранжиан гармонического осциллятора, описывающего поляризацию экситона. Частота осциллятора линейно сдвигается с деформацией $\partial_z u$; константа деформационного потенциала Ξ приблизительно равна 10 эВ. Предполагается, что экситоны не могут двигаться в направлении z , будучи сильно ограниченными внутри отдельных квантовых ям. Константа нормировки f связана с продольно-поперечным расщеплением ω_{LT} [18] как $f = 2\pi/\omega_x \omega_{LT}$. В массиве квантовых ям GaAs/AlGaAs это расщепление порядка $\hbar\omega_{LT} \sim 0.1$ мэВ [5].

Из лагранжиана (1) следуют уравнения движения для полей $A(z, t)$, $u(z, t)$, и $P(z, t)$:

$$\partial_t^2 A - c^2 \partial_z^2 A = 4\pi c \partial_t P, \quad (2)$$

$$\partial_t^2 u - s^2 \partial_z^2 u = (f\omega_x \Xi / \rho) \partial_z P^2, \quad (3)$$

$$\partial_t^2 P + \omega_x^2 P = -2\omega_x \Xi P \partial_z u - (1/fc) \partial_t A, \quad (4)$$

где $s = \sqrt{\mathcal{E}/\rho}$ — скорость (продольного) звука и мы пренебрегли квадратичными по Ξ вкладками.

Поскольку частота экситона намного выше акустической, положим

$$P(z, t) = P_1(z, t) \exp(-i\omega_x t) + \text{c.c.},$$

$$A(z, t) = A_1(z, t) \exp(-i\omega_x t) + \text{c.c.}$$

Затем, используя приближение вращающейся волны, из уравнений (3), (4) получаем

$$\partial_t^2 u - s^2 \partial_z^2 u = \frac{4\pi \Xi}{\omega_{LT} \rho} \partial_z |P_1|^2, \quad (5)$$

$$i \partial_t P_1 = \Xi P_1 \partial_z u - \frac{\omega_{LT}}{4\pi} E_1, \quad (6)$$

где $E_1(z, t) = (i\omega_x/c) A_1(z, t)$ — электрическое поле. Вместо поля смещений $u(z, t)$ удобно ввести поле

$\xi(z, t) = \Xi \partial_z u + \epsilon |P_1|^2$, где $\epsilon = 4\pi \Xi^2 / \omega_{LT} \mathcal{E}$. Это поле пропорционально напряжению и учитывает как механический, так и экситонный вклад. Тогда получаем систему уравнений

$$\partial_t^2 \xi + 2\Gamma_s \partial_t \xi - s^2 \partial_z^2 \xi = \epsilon \partial_t^2 |P_1|^2, \quad (7)$$

$$i \partial_t P_1 = -i \Gamma_x P_1 + \xi P_1 + \alpha |P_1|^2 P_1 + G, \quad (8)$$

где $G(z, t) = (\omega_{LT} / 4\pi) E_1(z, t)$ и дополнительно были введены скорости затухания экситона Γ_x и звука Γ_s . Из уравнения (8) следует, что взаимодействие со звуком вызывает нелинейность для экситона с константой $\alpha = -\epsilon$ [19]. Однако такая нелинейность для реалистичных параметров подавляется экситон-экситонным отталкивающим взаимодействием, приводящим к суммарному значению $\alpha > 0$. Влияние такой нелинейности широко изучалось, в частности, в работах [19–21]. В настоящей статье нас интересует эффект экситон-звукового взаимодействия. Поэтому вклад, пропорциональный α , не учитывается. Мы также предполагаем, что электрическое поле $E_1(z, t)$ определяется лазером накачки, и пренебрегаем обратным действием экситонов, т. е. пренебрегаем уравнением (2), что оправдано при условии $\omega_{LT} < \Gamma_x$.

Рассматривается случай однородного возбуждения с частотой ω_p :

$$E_1(z, t) = E \exp[-i(\omega_p - \omega_x)t].$$

Это можно реализовать, возбуждая массив сбоку, как показано на рис. 1. Эксперимент по распространению нелинейных акустических возбуждений, который будет обсуждаться далее, потенциально может быть проведен следующим образом. Звук запускается с левого края структуры путем возбуждения коротким оптическим лазерным импульсом, как это было сделано в работах [16, 22]. Волна приводит к модуляции частот экситонного резонанса. Эта модуляция исследуется оптически путем измерения либо обратного мандельштам-бриллюэновского рассеяния экситонных поляритонов [5], либо когерентного отражения оптического импульса [16]. Типичные интенсивности накачки в современном эксперименте «накачка-зондирование» [16] были равны $J \sim \sim 0.1$ мДж/см², а нелинейные акустические эффекты наблюдались для $J \gtrsim 3$ мДж/см².

3. АНАЛИЗ УСТОЙЧИВОСТИ В ЛИНЕАРИЗОВАННОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Сначала рассмотрим однородные в пространстве напряжение $\xi(z, t) = \xi_0$ и экситонную поляризацию $P_1(z, t) = b_0 \exp[-i(\omega_p - \omega_x)t]$, где

$$b_0 = \frac{G}{\omega_p - \omega_x - \xi_0 + i\Gamma_x}. \quad (9)$$

Для анализа устойчивости исследуется динамика малых поправок ζ и $a = a_1 + ia_2$ к полю деформаций ξ и полю поляризаций P_1 . Их эволюция описывается уравнениями

$$\partial_t^2 \zeta + 2\Gamma_s \partial_t \zeta - s^2 \partial_z^2 \zeta = 2\epsilon |b_0| \partial_t^2 a_1, \quad (10)$$

$$\partial_t a_1 = -(\omega_p - \omega_x - \xi_0) a_2 - \Gamma_x a_1, \quad (11)$$

$$\partial_t a_2 = (\omega_p - \omega_x - \xi_0) a_1 - \Gamma_x a_2 - |b_0| \zeta. \quad (12)$$

Рассматривая решение, зависящее от времени и координаты как $\exp(-i\Omega t + ikz)$, получаем условие разрешимости уравнений (10)–(12) в виде

$$(s^2 k^2 - \Omega^2 - 2i\Gamma_s \Omega) (\Delta^2 + \Gamma_x^2 - \Omega^2 - 2i\Gamma_x \Omega) + 2\Omega^2 \epsilon |b_0|^2 \Delta = 0, \quad (13)$$

где $\Delta = \omega_p - \omega_x - \xi_0$ – отстройка частоты лазера от экситонного резонанса.

В режиме сильной связи, когда Γ_s и Γ_x малы, дисперсионное соотношение в главном порядке приближения имеет вид

$$\Omega^2 = \frac{s^2 k^2 + \Delta(\Delta - 2\epsilon |b_0|^2)}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{[s^2 k^2 - \Delta(\Delta + 2\epsilon |b_0|^2)]^2 - 8\Delta^3 \epsilon |b_0|^2}. \quad (14)$$

При положительной отстройке лазера ($\Delta > 0$) собственные частоты становятся комплексными в окрестности $k = \pm \sqrt{\Delta(\Delta + 2\epsilon |b_0|^2)} / s$. Более того, некоторые собственные частоты имеют положительную мнимую часть, что указывает на рост соответствующих собственных мод со временем.

Теперь исследуем влияние конечных потерь на неустойчивость. Предполагается, что потери и накачка слабые по сравнению с соответствующими звуковыми частотами, $\Gamma_x, \Gamma_s, \epsilon |b_0|^2 \ll |\Delta|, s|k|$. Тогда естественно предположить, что наиболее нестабильная мода будет иметь волновой вектор $k \approx \approx \pm |\Delta| / s$ и частоту $\Omega \approx |\Delta|$. Вблизи этой точки уравнение (13) можно упростить до

$$(\Omega - sk + i\Gamma_s)(\Omega - |\Delta| + i\Gamma_x) = -\frac{1}{2} \epsilon |b_0|^2 \Delta. \quad (15)$$

Анализ показывает, что нестабильность сохраняется, если

$$\epsilon |b_0|^2 \Delta > 2\Gamma_x \Gamma_s.$$

Нестабильными оказываются акустические волны с волновыми векторами в области

$$\left| |k| - \frac{\Delta}{s} \right| < \frac{\Gamma_s + \Gamma_x}{s} \sqrt{\frac{\epsilon |b_0|^2 \Delta}{2\Gamma_s \Gamma_x} - 1}.$$

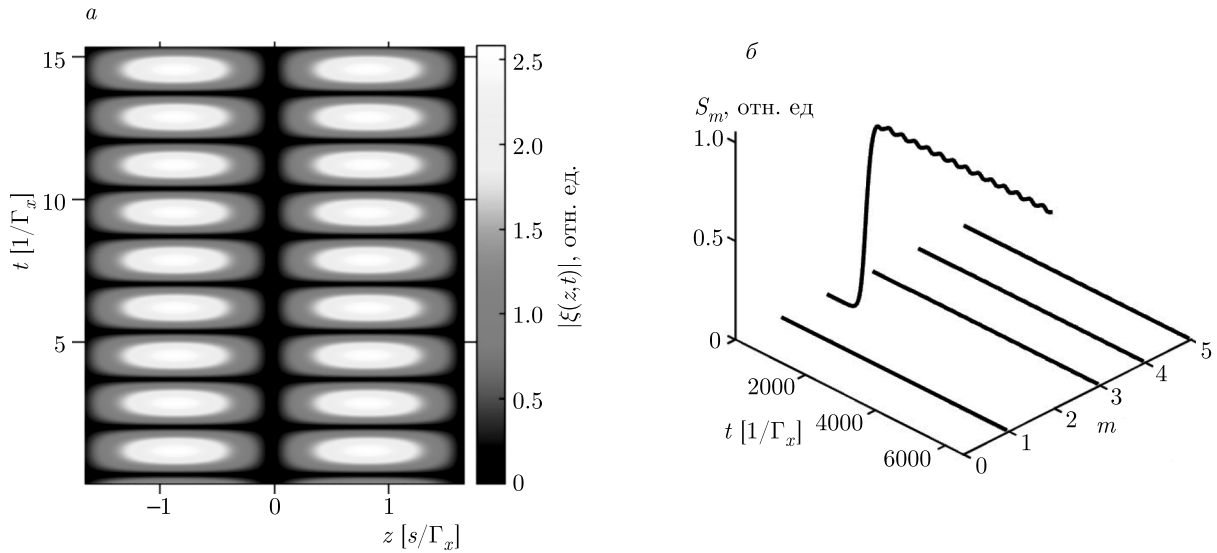


Рис. 2. (В цвете онлайн) Установившаяся эволюция поля деформаций $\xi(z, t)$ (а) и временная эволюция амплитуд первых пяти пространственных гармоник (б) для длины системы $L = 3.3s/\Gamma_x$. Параметры расчета приведены в тексте

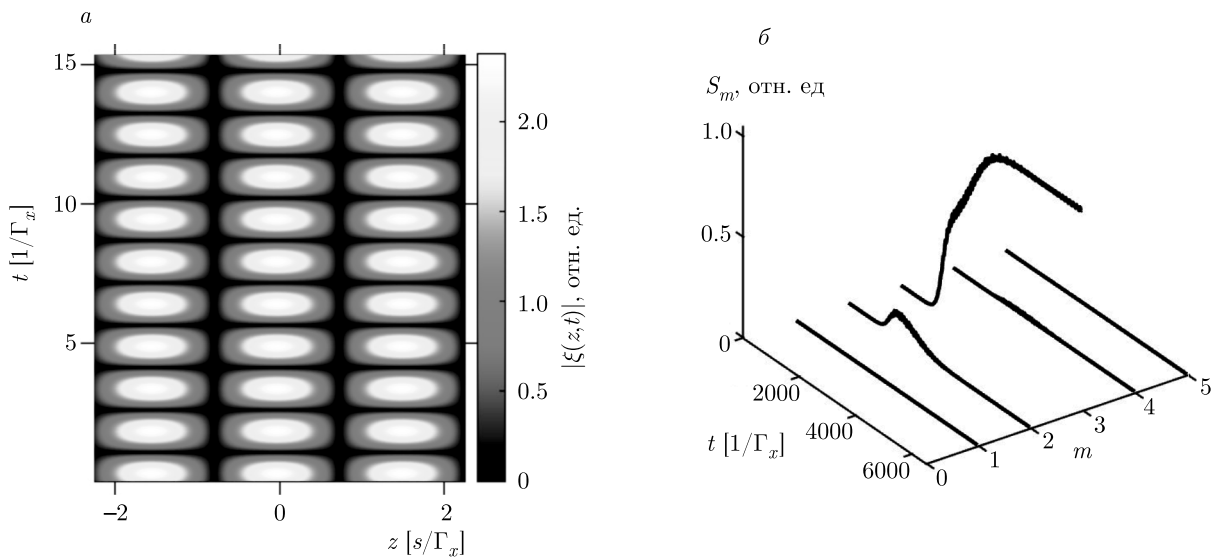


Рис. 3. (В цвете онлайн) То же, что на рис. 2, но для $L = 4.5s/\Gamma_x$

4. РЕЖИМ ОПТОМЕХАНИЧЕСКОЙ ЛАЗЕРНОЙ ГЕНЕРАЦИИ

Исследуем численно динамику системы в случае, когда основное состояние неустойчиво и структура генерирует автоколебания. На рис. 2 и 3 показаны результаты расчетов для $\Delta/\Gamma_x = 1.5$, $\Gamma_s/\Gamma_x = 0.01$, $\epsilon G^2/\Gamma_x^3 = 0.09$ и разных длин системы L . Предположим, что напряжения на краях структуры равны нулю, что соответствует граничным условиям

$\xi(\pm L/2) = 0$. В качестве начальных условий был взят слабый шум для ξ и стационарное решение для b_0 .

Рисунок 2 рассчитан для длины структуры $L = 3.3 s/\Gamma_x$. На рис. 2а показана цветом карта деформаций $\xi(z, t)$. На рис. 2б представлена временная эволюция амплитуд пространственных спектральных гармоник. Мы определяем их как

$$S_m = \sqrt{(k_m/s)^2 |S_\xi(k_m)|^2 + |S_{\partial_t \xi}(k_m)|^2},$$

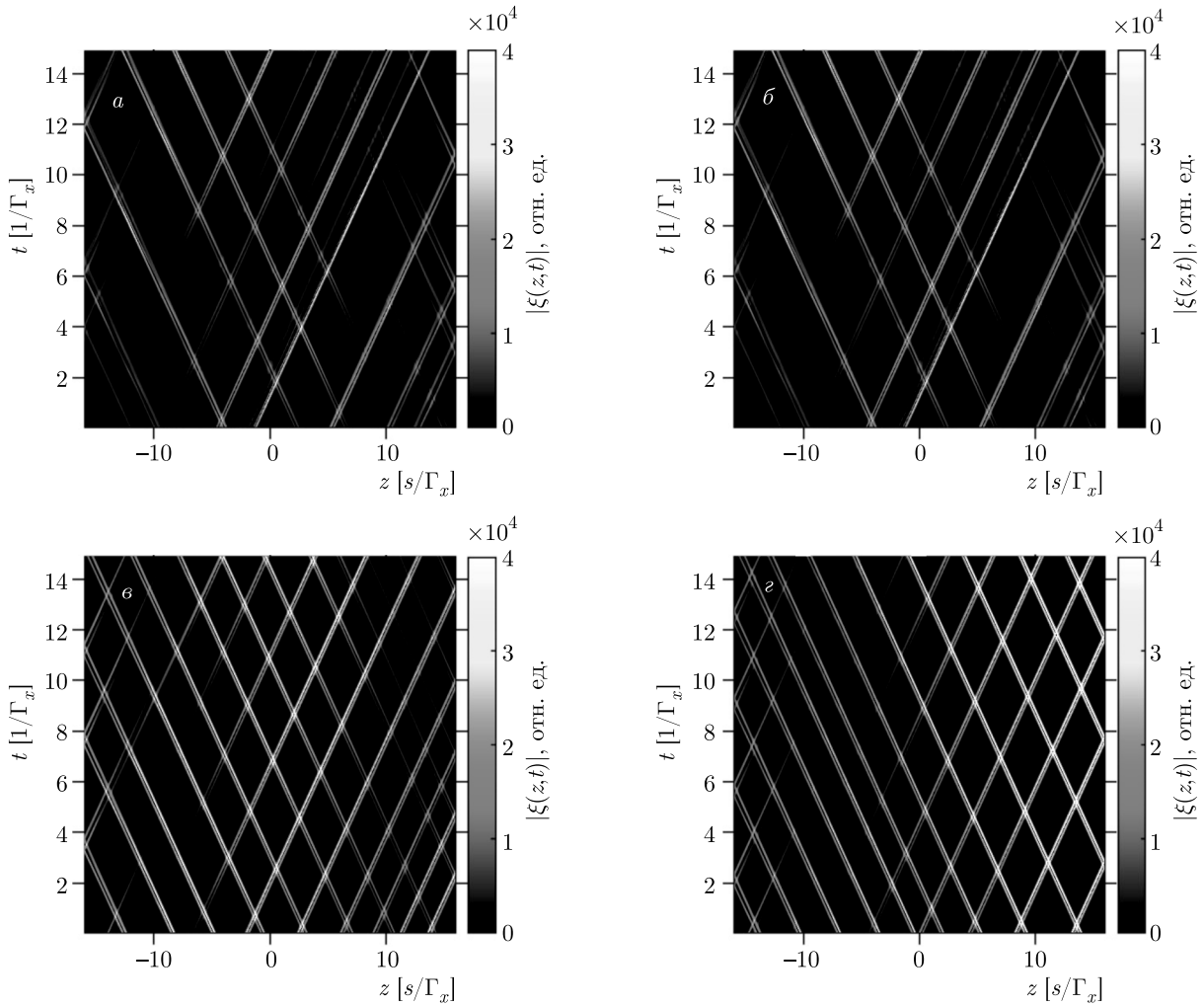


Рис. 4. (В цвете онлайн) Установившаяся динамика акустической составляющей, рассчитанная для различных акустических импедансов, определяющих граничные условия в уравнении (16): $Z_r = 0$ (а), $Z_r = 0.25$ (б), $Z_r = 4$ (в) и $Z_r = \infty$ (г). Другие параметры расчета не менялись: $L = 32s/\Gamma_x$ и $\epsilon G^2/\Gamma_x^3 = 0.04$. Начальными условиями для расчета были взяты случайные шумы как в акустической, так и в экситонной составляющих. Показана рассчитанная динамика после большой задержки $t_0 = 10000/\Gamma_x$, когда переходные процессы уже успели завершиться

где S_ξ и $S_{\partial_t \xi}$ — пространственные спектры соответственно ξ и $\partial_t \xi$, а $k_m = \pi m/L$. Видно, что положительный темп роста наблюдается только для одной моды $m = 2$.

Для более длинной системы несколько пространственных гармоник могут находиться в пределах диапазона усиления в линейном режиме. Случай, когда две гармоники усиливаются одновременно, показан на рис. 3. Параметры расчета выбраны такими же, как для рис. 2, но $L = 4.5s/\Gamma_x$. Происходит конкуренция между модами, и, в зависимости от начального условия, могут образовываться два различных стационарных состояния, в которых доминирует либо гармоника с $m = 3$, как на рис. 3, либо гармоника с $m = 2$.

При большой длине системы и большой мощности накачки динамика становится намного богаче. Это обусловлено тем, что большое количество пространственных гармоник попадает в диапазон усиления и одновременно возбуждается в системе. На нелинейном этапе поведение системы определяется сложной динамикой взаимодействующих мод. Было проведено численное моделирование для накачки $\epsilon G^2/\Gamma_x^3 = 4$ и длины системы $L = 32s/\Gamma_x$. Эволюция распределения акустической энергии в системе показана на рис. 4 при различных граничных условиях, наложенных на правом краю,

$$\partial_t \xi_t(L/2) + sZ_r \partial_z \xi(L/2) = 0, \quad (16)$$

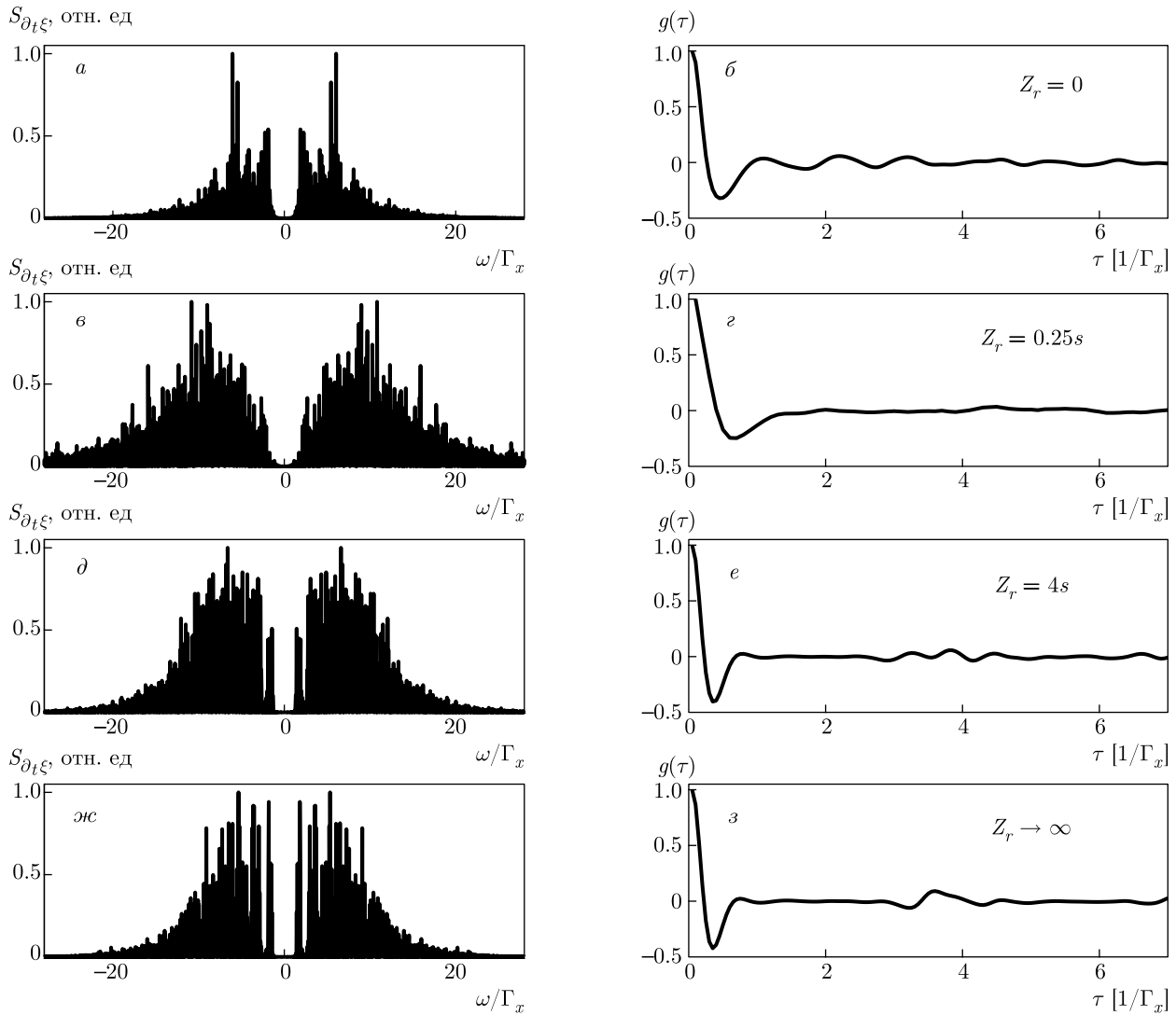


Рис. 5. Спектры скорости $S_{\partial_t \xi}$ (слева) и соответствующие корреляционные функции скорости $g(\tau)$ (справа), рассчитанные для различных акустических импедансов Z_r на правой границе. Скорость измерялась при $z_0 = 0$ (а, б) и при $z_0 = L/2 = 16s/\Gamma_x$ (в-ж). Акустический импеданс Z_r увеличивается сверху вниз, как показано на рисунке. Параметры такие же, как для рис. 4

которые описывают ситуацию, когда область $z > L/2$ заполнена материалами с различными акустическими импедансами, характеризуемыми параметром $Z_r = 0, 0.25, 4, \infty$ соответственно для рис. 4а, б, в, г. На левом краю всегда считалось, что $\xi(-L/2) = 0$, т. е. $Z_l = 0$.

Видно, что динамика существенно меняется в зависимости от импеданса на правом краю. Далее были рассчитаны временные спектры скорости $v(t) = \partial_t \xi(z_0, t)$, см. рис. 5, где верхняя строка соответствует импедансам $Z_r = 0$, нижние три строки соответствуют $Z_r = 0.25s$, $Z_r = 4s$, $Z_r = \infty$. Ско-

рость рассчитывалась на правом конце ($z_0 = L/2$) для всех случаев, кроме рис. 5а, б. Выбор для измерения скорости на правом краю сделан потому, что это значение определяет интенсивность излучения акустических волн на среду, контактирующую со структурой справа. В случае, когда $Z_r = 0$, скорость на правом краю тождественно равна нулю, поэтому для анализа было выбрано ее значение в середине структуры, $z_0 = 0$.

Видно, что все спектры скоростей на рис. 5а, в, д, жс довольно широкие, но имеют разную ширину и структуру. Корреляционные функции

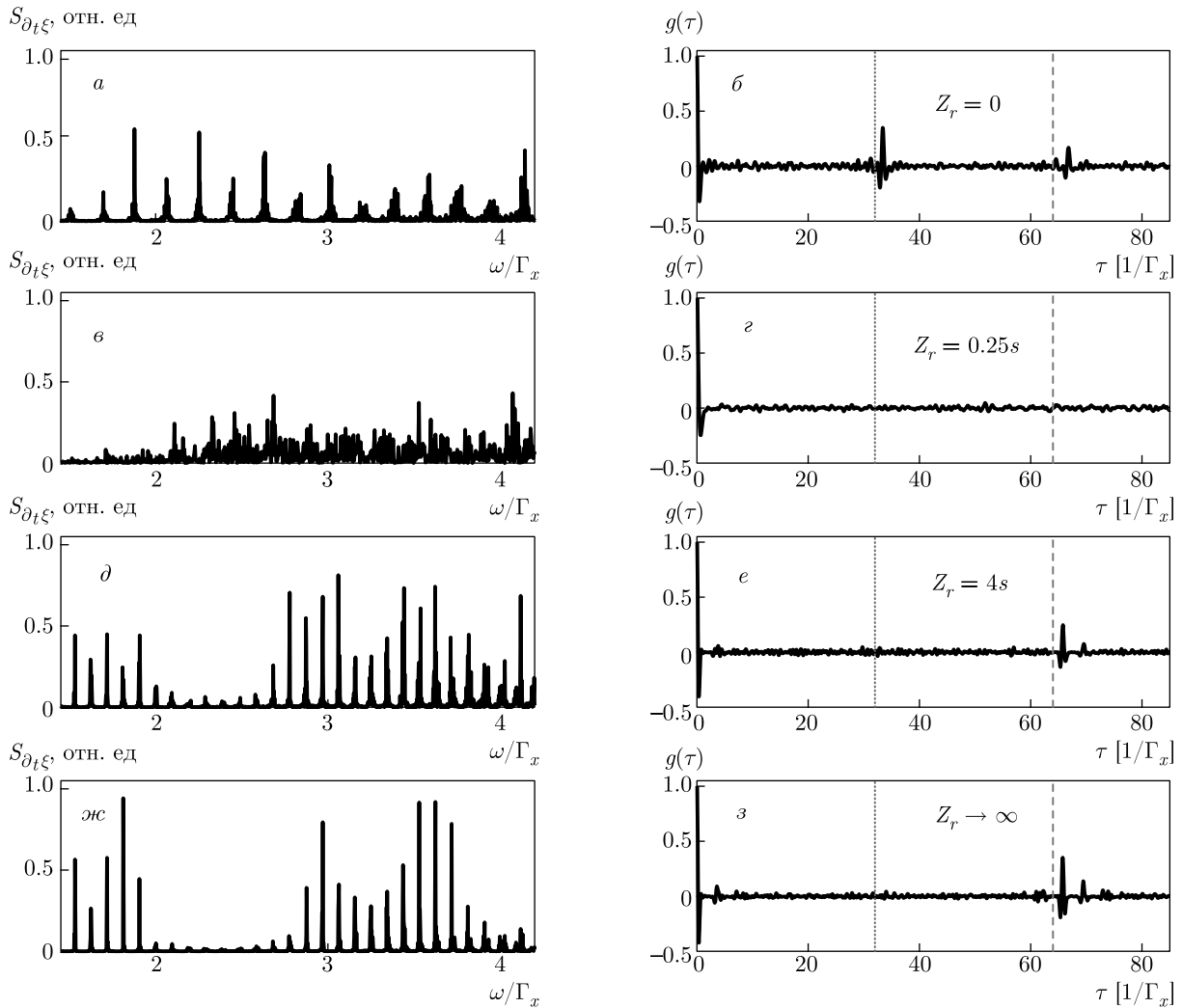


Рис. 6. То же, что и на рис. 5. Более узкая часть спектра показана с большим разрешением. Корреляционные функции показаны на больших временах. Вертикальные линии в правом столбце указывают время однократного прохождения акустической волны через структуру и время ее прохождения туда и обратно

$$g(\tau) = \frac{\int v(t - \tau)v(t) dt}{\int v(t)^2 dt},$$

показанные в правом столбце рис. 5, быстро затухают, что хорошо согласуется с шириной спектра. Широкие спектры и быстро затухающие корреляционные функции подтверждают, что динамика акустического поля очень сложна и, возможно, хаотична. Интересно отметить, что в линейном режиме абсолютные значения коэффициентов отражения акустических волн для $Z_r = 0.25s$ и $Z_r = 4s$ одинаковы, но в нелинейном режиме генерации динамика для этих импедансов различается. Это может происходить из-за того, что экситоны влияют на отражение акустической моды на краях системы.

Интересно рассмотреть тонкую структуру спектров и поведение корреляционных функций на временах, сравнимых со временем прохождения акустических волн через систему. Это показано на рис. 6. Видно, что в случае $Z_r = 0$ корреляционная функция имеет резкий максимум при $\tau \approx 64/\Gamma_x$, который соответствует проходу акустической волны через структуру слева направо и затем обратно, справа налево. Другой максимум виден при $\tau \approx 32/\Gamma_x$ и соответствует времени однократного прохождения акустических волн через структуру слева направо. При $Z_r = 0.25s$ максимумов корреляционной функции, кроме максимума при $\tau = 0$, не наблюдается. Для $Z_r = 4s$ и $Z_r = \infty$ первые максимумы расположены при $\tau \approx 64/\Gamma_x$. Данные особенности проявляются и в тонкой структуре спектров. Расстояние

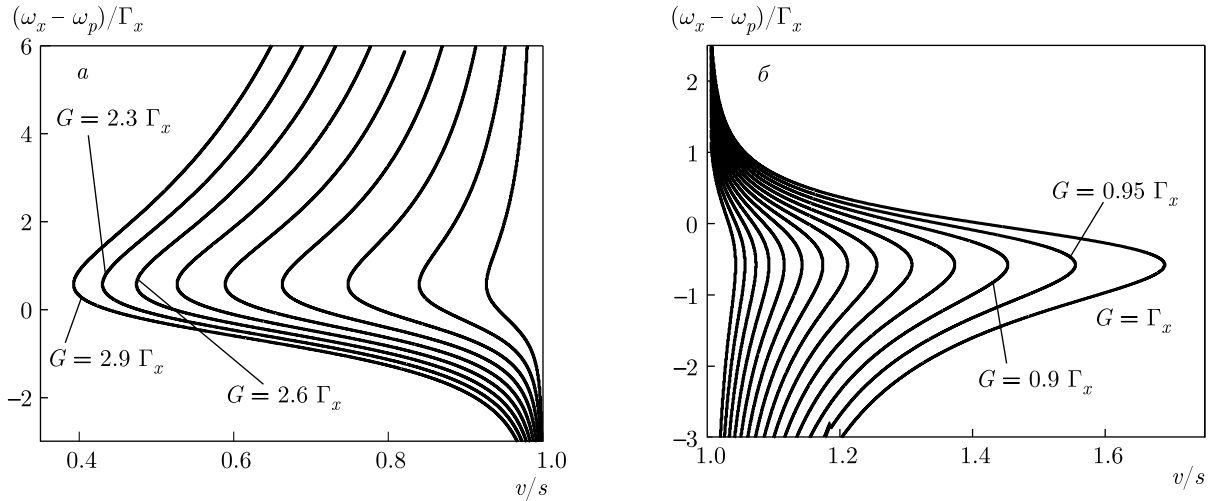


Рис. 7. Диаграммы существования дозвуковых и сверхзвуковых оптомеханических доменных стенок для различных параметров $v - \omega_x$ и амплитуд накачки. Накачка изменяется от $G = 0.2\Gamma_x$ до $G = 2.9\Gamma_x$ с шагом $0.3\Gamma_x$ (а) и от $G = \Gamma_x$ до $G = 0.35\Gamma_x$ с шагом $-0.05\Gamma_x$ (б)

между соседними пиками соответствует указанным выше временам: оно равно $\Delta\omega \approx 0.2\Gamma_x$ (рис. 6б) и $\Delta\omega = 0.1\Gamma_x$ (рис. 6е,з).

5. ОПТОМЕХАНИЧЕСКИЕ ДОМЕННЫЕ СТЕНКИ

Теперь рассмотрим ситуацию, когда накачка отрицательно отстроена от экситонного резонанса, $\omega_p < \omega_x$. В этом случае однородное решение является стабильным и оптомеханическая генерация не происходит, но ниже будет показано, что возможно образование оптомеханических доменных стенок.

Сначала рассмотрим случай $\Gamma_s = 0$ и перепишем основные уравнения (7), (8) в системе отсчета, движущейся со скоростью v :

$$(\partial_t^2 - 2v\partial_t\partial_\eta)(\xi - \epsilon|b|^2) = (s^2 - v^2)\partial_\eta^2\xi + \epsilon v^2\partial_\eta^2|b|^2,$$

$$\partial_t b = v\partial_\eta b - i(\omega_x - \omega_p)b - \Gamma_x b - ib\xi - iG,$$

где $b(\eta, t) = P_1(z, t)$ и $\eta = z - vt$. Стационарные решения в движущейся системе отсчета описываются связанными уравнениями

$$\partial_\eta^2\xi = \frac{\epsilon v^2}{v^2 - s^2} \partial_\eta^2|b|^2, \tag{17}$$

$$v\partial_\eta b = i(\omega_x - \omega_p)b + \Gamma_x b + ib\xi + iG.$$

Уравнение (17) имеет решение $\xi = \epsilon v^2|b|^2/(v^2 - s^2) + \xi_0$, где ξ_0 — константа. Используя это, получаем

уравнение для стационарного распределения поля b экситонных поляризаций:

$$v\partial_\eta b = i\tilde{\Omega}b + \Gamma_x b + i\mu|b|^2b + iG, \tag{18}$$

где $\tilde{\Omega} = \omega_x - \omega_p + \xi_0$ и $\mu = \epsilon v^2/(v^2 - s^2)$.

Без ограничения общности можно положить $\xi = 0$ при $\eta = -\infty$. Это означает, что $b(\eta = -\infty) = G/(\omega_p - \omega_x + i\Gamma_x)$ и поэтому $\xi_0 = -\mu G^2/[\Gamma_x^2 + (\omega_x - \omega_p)^2]$. Это состояние мы далее называем основным состоянием.

Выясним, можно ли связать основное состояние доменной стенки с другим пространственно-однородным состоянием. Это возможно, только если уравнение (18) имеет три пространственно-однородных решения. Нетрудно написать алгебраическое уравнение для интенсивности пространственно-однородных состояний:

$$\mu^2|b|^6 + 2\tilde{\Omega}\mu|b|^4 + (\tilde{\Omega}^2 + \Gamma_x^2)|b|^2 - G^2 = 0. \tag{19}$$

Используя то, что одно из решений есть $|b_0|^2 = G^2/[(\omega_x - \omega_p)^2 + \Gamma_x^2]$, можно представить другие два решения уравнения (19) в простой форме:

$$|b|^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{G^2}{(\omega_x - \omega_p)^2 + \Gamma_x^2} - \frac{2(\omega_x - \omega_p)}{\mu} \pm \sqrt{\frac{G^4}{[(\omega_x - \omega_p)^2 + \Gamma_x^2]^2} - \frac{4(\omega_x - \omega_p)G^2}{\mu[(\omega_x - \omega_p)^2 + \Gamma_x^2]} - \frac{4\Gamma_x^2}{\mu^2}} \right). \tag{20}$$

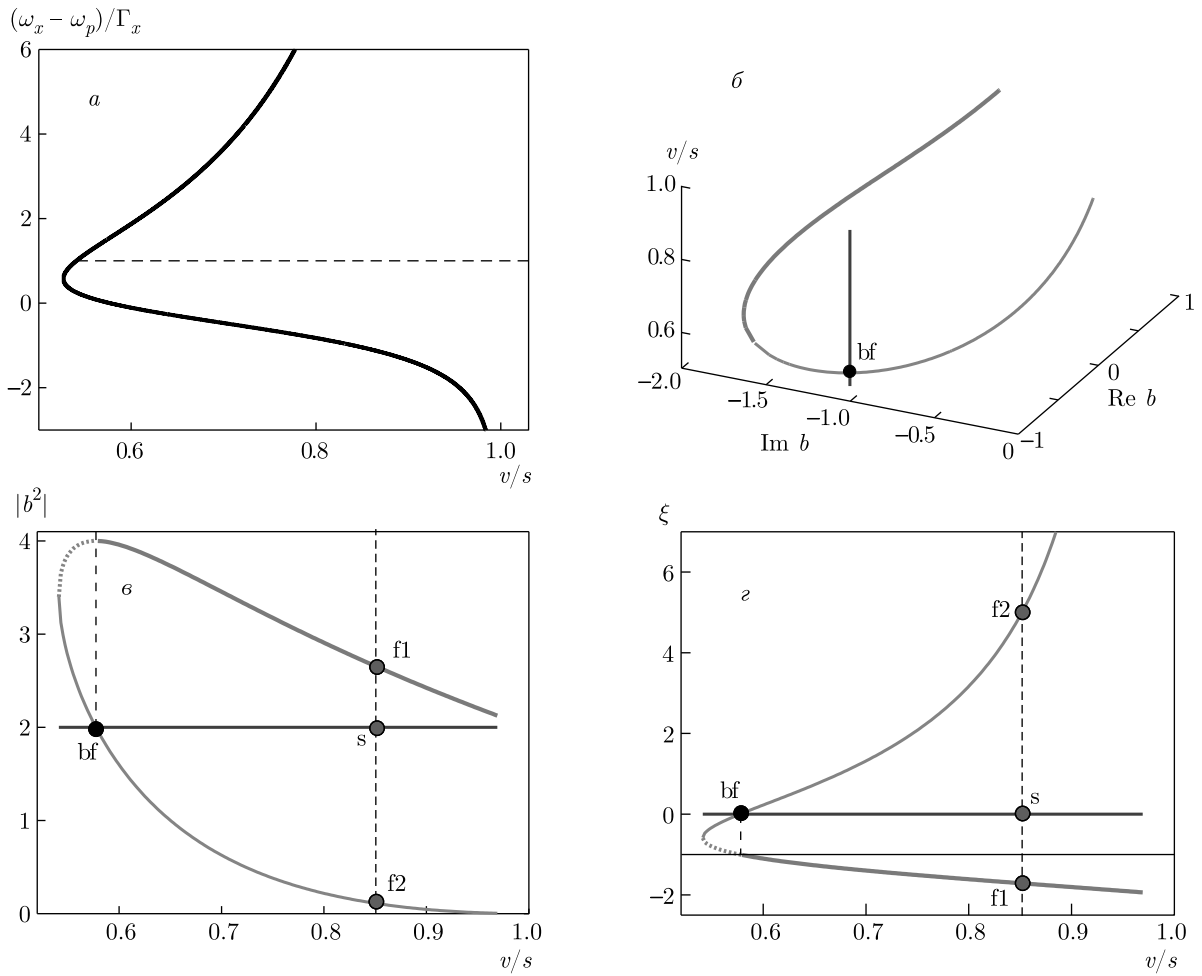


Рис. 8. (В цвете онлайн) *а*) Области существования нескольких стационарных решений для $G = 2\Gamma_x$ и $v < s$. *б, в*) Изменения экситонной компоненты b стационарных решений в зависимости от скорости v (соответствующий путь показан штриховой линией на рис. *а*) при $\omega_x - \omega_p = \Gamma_x$. *г*) Бифуркационная диаграмма для механической составляющей ξ . Синие линии соответствуют основному решению, а зеленые и красные линии — двум другим решениям. Столкновение основного состояния с другим устойчивым состоянием отмечено знаком «bf». Седло (s) и два стационарных состояния типа фокус ($f1, f2$) отмечены на фазовой плоскости на рис. 10 (см. ниже). Пунктирные линии показывают устойчивые состояния, которые не связаны с основным состоянием

Эти три решения существуют в области параметров $\omega_x - v$, находящейся справа от кривых на рис. 7*а* и слева от кривых на рис. 7*б*.

Анализ показывает, что сверхзвуковые доменные стенки никогда не могут соединять динамически устойчивые решения. Поэтому основное внимание мы уделяем дозвуковым доменным стенкам. Прежде всего исследуем, как изменяются установившиеся состояния, когда параметр v изменяется для фиксированного значения ω_x в области существования нескольких решений. Соответствующий путь показан штриховой линией на рис. 8*а*. Решение, пока-

занное синей линией, соответствует основному решению $\xi = 0$. Два других решения показаны зеленой и красной линиями. Рисунки 8*б* и 8*в* демонстрируют, как экситонные компоненты стационарных решений меняются с изменением скорости v . Аналогичная бифуркационная диаграмма для механической составляющей ξ представлена на рис. 8*г*. Можно видеть, что при определенном значении v основное состояние сталкивается с другим решением, точка столкновения (bf) отмечена на рис. 8.

Перейдем к классификации стационарных состояний. Это можно сделать, найдя собственные значения линеаризованной задачи, описывающей про-

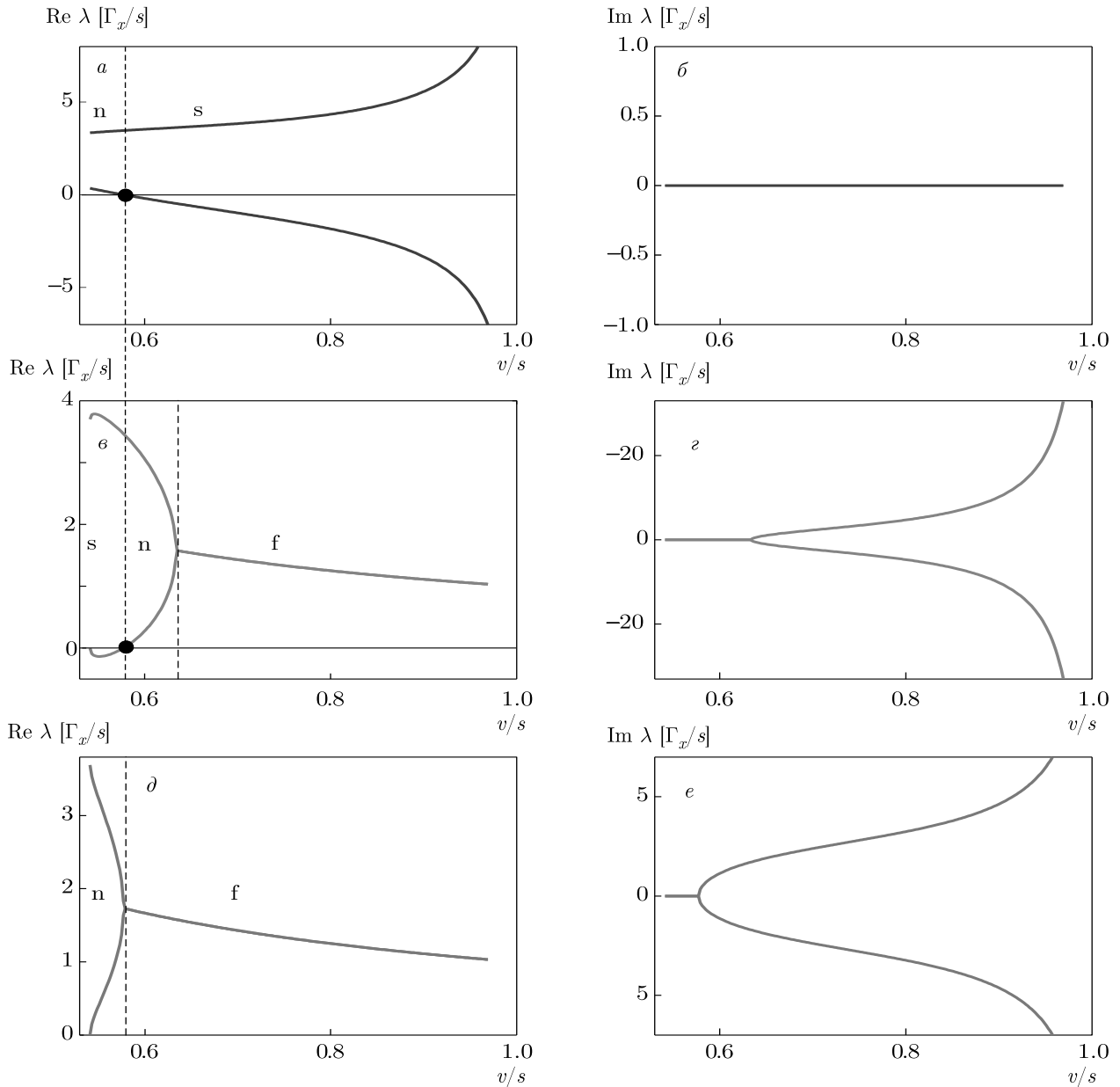


Рис. 9. (В цвете онлайн) Эволюция действительной (справа) и мнимой (слева) частей собственных значений, определяющих пространственную релаксацию к основному состоянию (a и б) и к двум другим устойчивым состояниям (в–е). Показаны типы стационарных состояний для седла (s), для узлов (n) и для фокусов (f)

пространственную эволюцию поля b в окрестности точек равновесия. Действительная и мнимая части соответствующих собственных значений представлены на рис. 9. Расчет показывает, что для скоростей, близких к 1, основное состояние — седло, два других — фокусы. Соответствующая фазовая плоскость для $v = 0.85s$ показана на рис. 10. Он демонстрирует, что основное состояние действительно является

седлом и имеет гетероклинические связи со всеми другими устойчивыми состояниями. Эти гетероклинические связи показаны толстыми красными линиями, что говорит о существовании двух разных доменных стенок, движущихся со скоростью $v = 0.85s$. Эти доменные стенки связывают основное состояние с состояниями с различными механическими ξ и экситонными b компонентами.

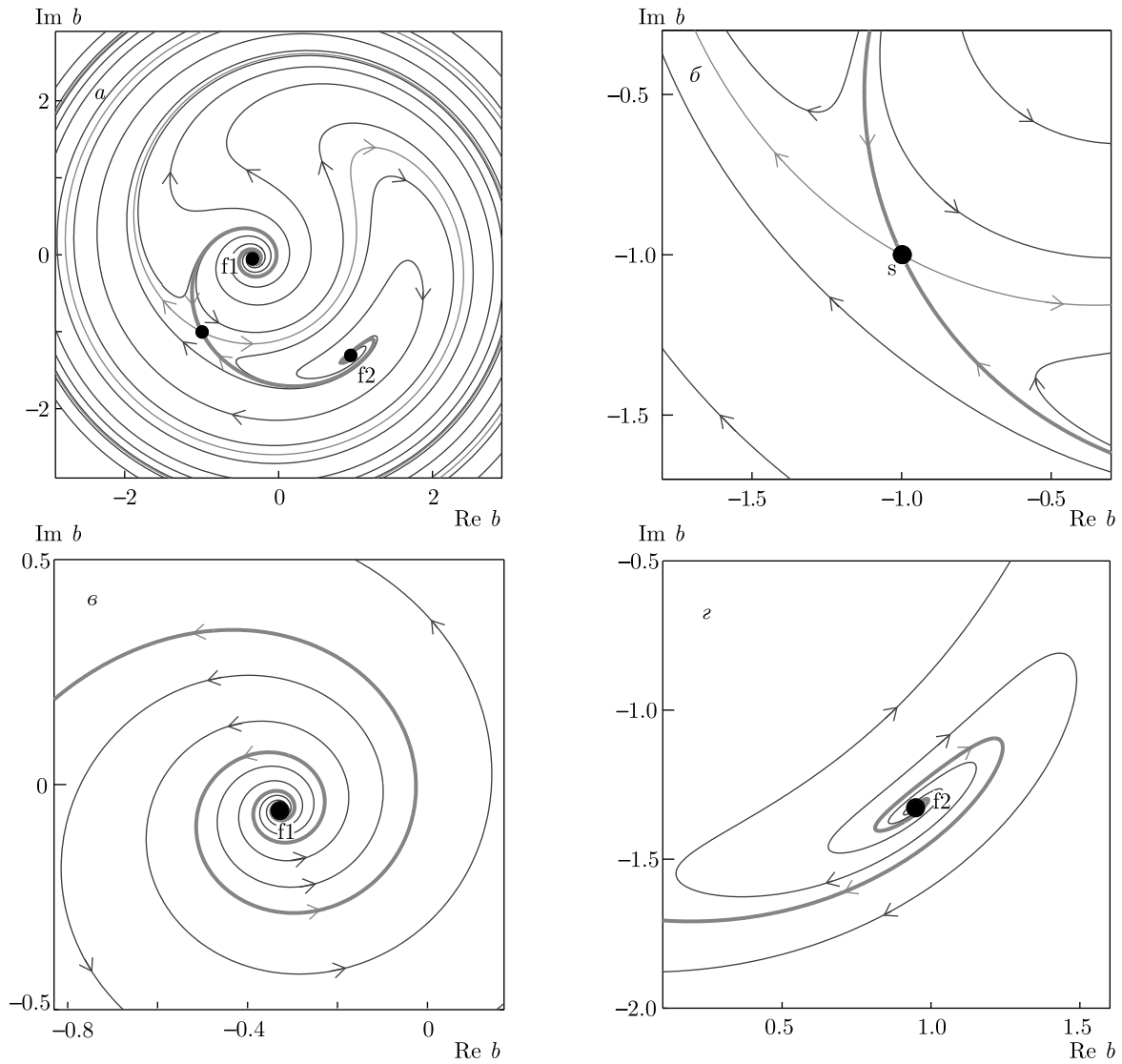


Рис. 10. (В цвете онлайн) Фазовая плоскость для $v = 0.85s$ и $\omega_x = \omega_p + \Gamma_x$ (а) и части фазовой плоскости вблизи стационарных состояний (б-г)

Пространственный профиль доменной стенки, соединяющей основное состояние с состоянием, обозначенным как «f2», показан на рис. 11а. Поскольку одно из стационарных состояний представляет собой фокус, хвост, переходящий в данное стационарное состояние, осциллирует в пространстве. Это объясняет существование дополнительного максимума в пространственном спектре доменной стенки (рис. 11б). Этот максимум становится более выраженным для более высоких скоростей, когда колебания становятся быстрее, а скорость их уменьшается (см. рис. 9в и 9г). Для более низких скоростей ре-

лаксация становится монотонной, когда фокус превращается в узел.

Важный результат состоит в том, что при некоторой пороговой скорости основное состояние сталкивается с другим стационарным состоянием в процессе транскритической бифуркации. В точке бифуркации хвосты доменной стенки релаксируют к основному состоянию алгебраически, поскольку соответствующее собственное значение обращается в нуль. Здесь следует отметить, что основное состояние становится узлом для скоростей ниже пороговой

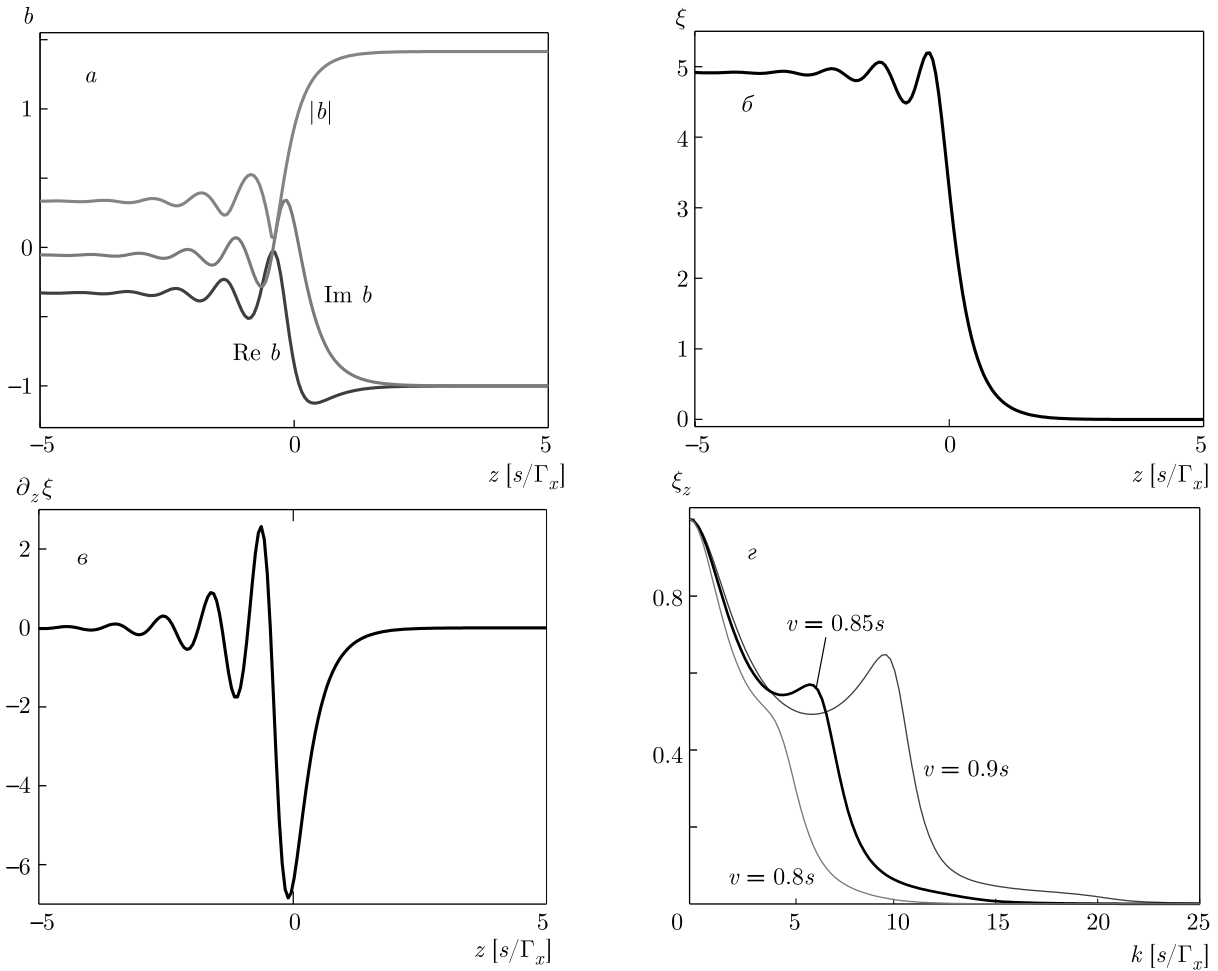


Рис. 11. (В цвете онлайн) а) Эволюция экситонного поля b в доменной стенке, соединяющей основное состояние s и стационарное состояние $f2$. б и в) Нормированные компоненты механической деформации ξ и $\partial_z \xi$ в доменной стенке. г) Нормированный пространственный спектр ξ_z для $v = 0.85s$. Тонкие синие и зеленые линии показывают спектры для скоростей доменных стенок $v = 0.8s$ и $v = 0.9s$

скорости бифуркации. Это означает, что для этих скоростей основное состояние может быть связано только с одним из двух других стационарных состояний. На рис. 8а и 8г состояния, не имеющие связи с основным состоянием, показаны пунктирной линией.

Для меньших значений частоты ω_x бифуркационная диаграмма выглядит иначе, как показано на рис. 12. В этом случае основное состояние сталкивается с иным решением, чем для $\omega_x - \omega_p = \Gamma_x$. Зависимости собственных значений, определяющих релаксацию доменных стенок к фону, от скорости v показаны на рис. 13. При высоких скоростях основным стационарным состоянием является седло, а двумя другими состояниями — фокусы. Затем один из фокусов превращается в узел. Наконец, проис-

ходит транскритическая бифуркация: основное состояние становится узлом, а второе состояние становится седлом. Как и в предыдущем случае, после точки бифуркации основное состояние может быть связано только с одним из двух других состояний. При еще меньших скоростях второй фокус также превращается в узел.

Для экспериментального наблюдения доменные стенки должны быть динамически устойчивыми. Спектральный анализ показывает, что это так, если соответствующие стационарные состояния стабильны. Как обсуждалось ранее, пространственно-однородные состояния устойчивы, если $(\omega_x - \omega_p) + \xi > 0$. Таким образом, стабильные доменные стенки являются связями между состояниями, расположенными над тонкими горизонтальными черными лини-

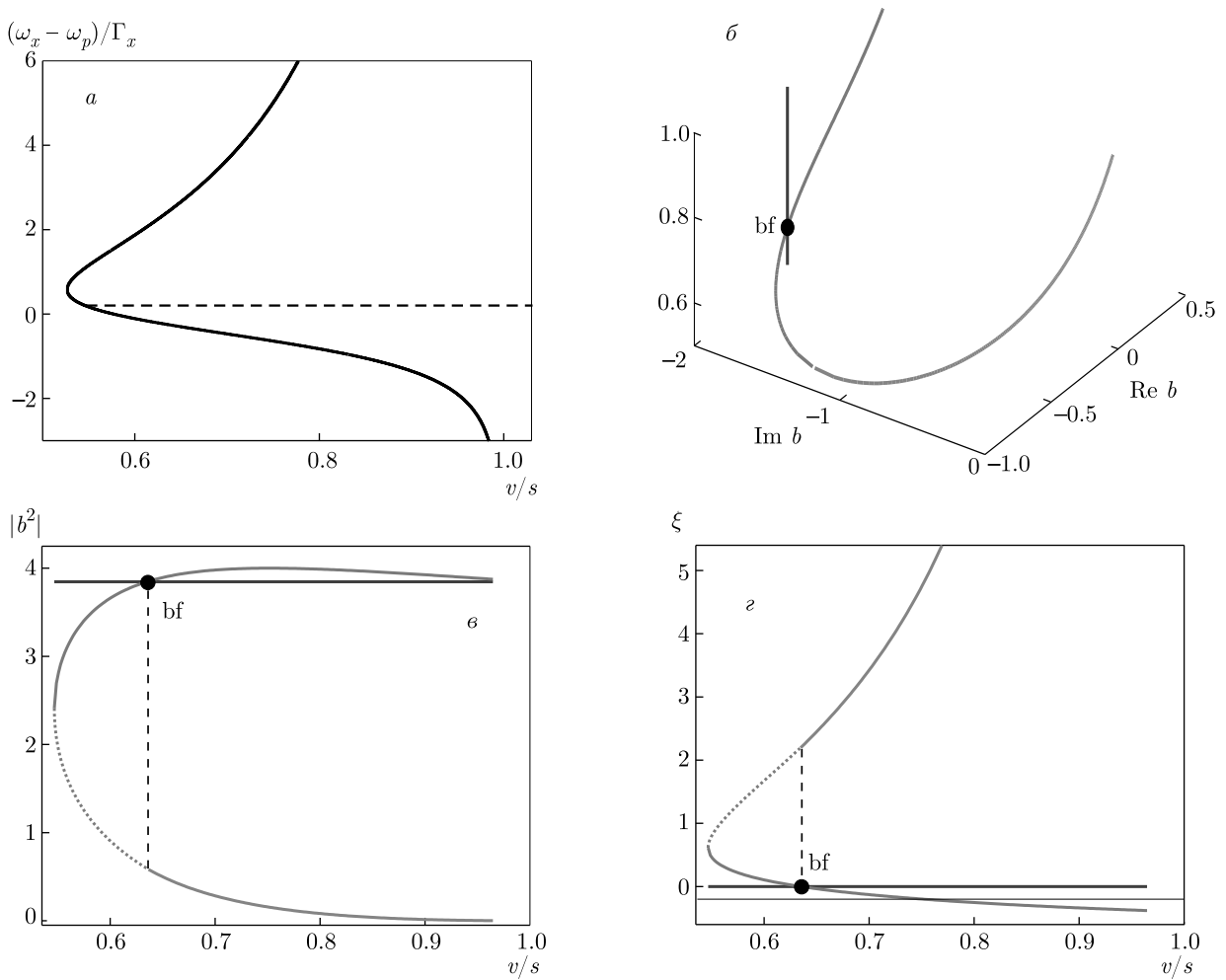


Рис. 12. (В цвете онлайн) То же что на рис. 8, но для $\omega_x = \omega_p + 0.2\Gamma_x$

ями на рис. 8г и 12г. Также было изучено, как конечные механические потери влияют на распространение доменной стенки. Было установлено, что доменные стенки могут образовываться при наличии механических потерь, если потери не слишком велики.

Образование доменных стенок наблюдалось и при прямом численном решении уравнений. Распространяющиеся волны хорошо описываются развитой теорией. Численный расчет также показывает, что две доменные стенки образуются после того, как левый край системы сдвигается на $\Delta\xi_1$ при $t = t_1$, а затем при $t = t_2 > t_1$ на $\Delta\xi_2$. Обычно эти доменные стенки распространяются с разными скоростями. Если вторая доменная стенка быстрее первой, то в какой-то момент они сталкиваются, образуя новую доменную стенку со своей скоростью.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, мы теоретически исследовали сильнонелинейный режим оптомеханического взаимодействия между оптически накачиваемыми экситонами в полупроводниковой сверхрешетке и распространяющимися акустическими фононами. Были рассмотрены различные режимы взаимодействия в зависимости от отстройки частоты накачки от частоты экситонного резонанса.

Если частота накачки выше частоты экситонного резонанса, то структура находится в режиме оптомеханической лазерной генерации. Однако, в отличие от обычного одномодового оптомеханического лазера [8, 17, 23], была обнаружена сложная конкуренция между усиливающимися акустическими модами, которая происходит, когда структура достаточно длинная, так что несколько пространствен-

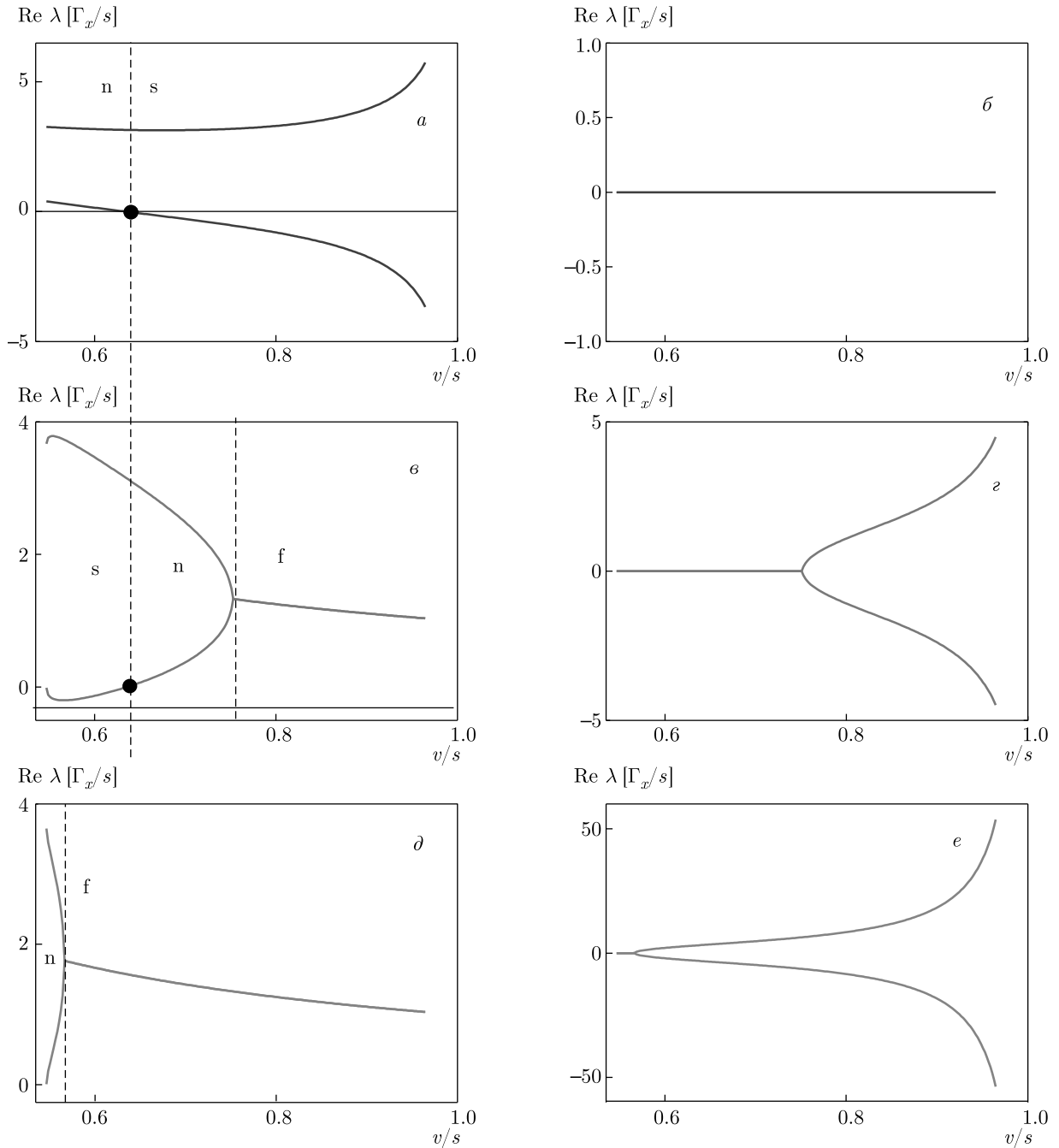


Рис. 13. (В цвете онлайн) То же что на рис. 9, но для $\omega_x - \omega_p = 0.2\Gamma_x$

ных гармоник попадают в контур усиления. Широкий спектр генерируемого акустического поля и его корреляционные функции, быстро затухающие во времени, указывают на довольно сложную и, вероятно, хаотическую динамику. Мы также показали, что спектры излучения существенно зависят от граничных условий для акустической волны на краю структуры.

В случае, когда структура накачивается с частотой ниже частоты экситонного резонанса, оптомеханическая генерация невозможна, но вместо нее могут формироваться оптомеханические доменные стенки. Был проведен подробный анализ стационарных состояний в структуре и было показано, что только дозвуковые доменные стенки могут быть стабильными и соединять динамически устойчи-

вые стационарные решения. Рассчитаны зависимости скорости стенки и амплитуды деформации от частоты накачки.

Мы надеемся, что полученные результаты будут полезны для быстро развивающейся области резонансной оптомеханики и могут быть экспериментально подтверждены для современных структур. Естественным продолжением этой работы могло бы стать исследование фоновитонного режима [7, 24, 25], когда не только экситоны и акустические волны, как в текущем исследовании, а три типа возбуждений: свет, экситон и акустические волны, испытывают сильное нелинейное взаимодействие.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 20-42-04405).

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Delsing, A. N. Cleland, M. J. A. Schuetz et al., *J. Phys. D* **52**, 353001 (2019).
2. D. L. Chafatinos, A. S. Kuznetsov, S. Anguiano et al., *Nature Comm.* **11**, 4552 (2020).
3. A. S. Kuznetsov, G. Dagvadorj, K. Biermann et al., *Optica* **7**, 1673 (2020).
4. C. Baker, W. Hease, D.-T. Nguyen et al., *Opt. Express* **22**, 14072 (2014).
5. B. Jusserand, A. N. Poddubny, A. V. Poshakinskiy et al., *Phys. Rev. Lett.* **115**, 267402 (2015).
6. A. V. Poshakinskiy, A. N. Poddubny, and A. Feinstein, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 224302 (2016).
7. A. V. Poshakinskiy and A. N. Poddubny, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 156801 (2017).
8. E. S. Vyatkin and A. N. Poddubny, *Phys. Rev. B* **104**, 075447 (2021).
9. G. Heinrich, M. Ludwig, J. Qian et al., *Phys. Rev. Lett.* **107**, 043603 (2011).
10. A. Xuereb, C. Genes, and A. Dantan, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 223601 (2012).
11. E. A. Martens, S. Thutupalli, A. Fourrière, and O. Hallatschek, *Proc. Nat. Acad. Sci.* **110**, 10563 (2013).
12. M. Bagheri, M. Poot, L. Fan et al., *Phys. Rev. Lett.* **111**, 213902 (2013).
13. B. J. Eggleton, C. G. Poulton, and R. Pant, *Adv. Opt. Photon.* **5**, 536 (2013).
14. J.-H. Gan, H. Xiong, L.-G. Si et al., *Opt. Lett.* **41**, 2676 (2016).
15. M. H. Matheny, M. Grau, L. G. Villanueva et al., *Phys. Rev. Lett.* **112**, 014101 (2014).
16. M. Kobecki, A. V. Scherbakov, S. M. Kukhtaruk et al., arXiv:2106.07019 (2021).
17. M. Aspelmeyer, T. J. Kippenberg, and F. Marquardt, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 1391 (2014).
18. E. L. Ivchenko, *Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures*, Alpha Science International, Harrow, UK (2005).
19. D. V. Vishnevsky, D. D. Solnyshkov, G. Malpuech et al., *Phys. Rev. B* **84**, 035312 (2011).
20. N. Bobrovska, M. Matuszewski, T. C. H. Liew, and O. Kyriienko, *Phys. Rev. B* **95**, 085309 (2017).
21. A. V. Yulin, V. K. Kozin, A. V. Nalitov, and I. A. Shelykh, *Phys. Rev. A* **100**, 043610 (2019).
22. I. A. Mogunov, S. Lysenko, F. Fernández et al., *Phys. Rev. Materials* **4**, 125201 (2020).
23. H. Wu, G. Heinrich, and F. Marquardt, *New J. Phys.* **15**, 123022 (2013).
24. А. Л. Иванов, Л. В. Келдыш, *ЖЭТФ* **84**, 404 (1983).
25. L. Hanke, D. Fröhlich, A. L. Ivanov et al., *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4365 (1999).
26. S. Latini, U. De Giovannini, E. J. Sie et al., *Phys. Rev. Lett.* **126**, 227401 (2021).

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ТЕМПЕРАТУРЫ ПЛАВЛЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ Ti, Ti₃Al, TiAl И TiAl₃ ОТ ИХ ДИАМЕТРА В ВАКУУМЕ И В ЖИДКОМ АЛЮМИНИИ

Г. М. Полетаев*, А. А. Ситников, В. И. Яковлев, В. Ю. Филлимонов

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

Поступила в редакцию 5 октября 2021 г.,
после переработки 5 октября 2021 г.
Принята к публикации 7 октября 2021 г.

С помощью метода молекулярной динамики проведено исследование зависимости температуры плавления наночастиц Ti, Ti₃Al, TiAl и TiAl₃ от их диаметра в вакууме и в алюминиевой матрице. Для всех рассматриваемых наночастиц температура плавления снижалась по мере уменьшения их диаметра пропорционально отношению площади поверхности частицы к ее объему. При этом значения температуры плавления частиц Ti, Ti₃Al и TiAl в алюминиевой матрице оказались ниже, чем аналогичных частиц в вакууме, что объясняется размытием и разупорядочением границы раздела вследствие взаимной диффузии. Принципиально другой результат был получен для частиц TiAl₃ — оболочка из алюминия в этом случае почти не оказывала влияния на температуру плавления частицы. По мере увеличения размера частиц в вакууме и в алюминии значения их температуры плавления стремились к одной и той же величине, что объясняется снижением роли поверхности и ее размытия вследствие взаимной диффузии с ростом диаметра частицы.

DOI: 10.31857/S00444451022020079

1. ВВЕДЕНИЕ

Сплавы и интерметаллические соединения системы Ti–Al обладают уникальным сочетанием эксплуатационных свойств, таких как малая плотность, высокий предел текучести при повышенных температурах, хорошая стойкость к окислению и коррозии [1–5]. Одним из перспективных методов их получения является предварительная механоактивационная обработка, позволяющая достичь предельной степени измельчения зерна в смеси до основной реакции синтеза [5–7]. В процессе механоактивации формируются так называемые механокомпозиты, представляющие собой матрицу из более пластичного компонента (алюминия), в объеме которой находятся наноразмерные частицы более хрупкого компонента смеси [6, 7]. Такая система характеризуется высокой степенью неравновесности из-за высо-

кой концентрации дефектов, поверхностей раздела и внутренних напряжений. Отмечается, что начало реакции горения в такой неравновесной системе начинается при температурах существенно ниже температуры плавления алюминия [6, 7]. Кроме того, известно, что температура плавления наноразмерных частиц снижается из-за высокой доли поверхности по отношению к их объему [8–13]. Строго говоря, истинным фазовым переходом следует считать переход в бесконечно большой термодинамической системе, но, тем не менее, снижение температуры плавления наночастиц — экспериментально наблюдаемый феномен [9–11], который следует учитывать в моделях и технологических операциях.

В дореакционных механокомпозитах Ti–Al малые частицы Ti и зародыши интерметаллидов находятся в матрице алюминия, что, очевидно, изменяет связь размера частиц и их температуры плавления по сравнению с нахождением в вакууме. При этом влияние матрицы может быть неоднозначным. С одной стороны, атомы алюминия, окружающие частицу, могут приводить к понижению потенциа-

* E-mail: gmpoletaev@mail.ru

ной энергии приповерхностных атомов частицы, т. е. тем самым снижать влияние поверхности на температуру плавления. Но, с другой стороны, из-за взаимной диффузии на границе раздела возможно ее размытие, что, напротив, приводит к образованию большего количества «приповерхностных» атомов с большей по сравнению с атомами в ядре частицы потенциальной энергией. Настоящая работа посвящена исследованию методом молекулярной динамики зависимости температуры плавления наночастиц Ti, Ti₃Al, TiAl и TiAl₃ от их диаметра в вакууме и в алюминиевой матрице.

2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Частица в модели создавалась путем вырезания шара соответствующего размера из идеального кристалла. При этом частицы интерметаллидов Ti₃Al, TiAl и TiAl₃ изначально имели сверхструктурную упаковку соответственно *D0*₁₉, *L1*₀ и *D0*₂₂. Пример частицы TiAl диаметром 9 нм изображен на рис. 1а. Для моделирования алюминиевой матрицы вокруг частицы создавалась оболочка, содержащая примерно столько же атомов, сколько содержала частица (рис. 1б). Изначально оболочка тоже вырезалась из кристалла алюминия. Данной толщины оболочки было достаточно, и дальнейшее ее увеличение не влияло на результаты. В работе [14] похожая модель использовалась для моделирования растворения частицы Ti в алюминиевой матрице.

Рассматривались частицы диаметром от 2.5 до 12 нм. После создания начальной структуры частицы проводилась первичная структурная релаксация при стартовой температуре 0 К, в конце которой частица охлаждалась. Частица находилась в расчетной ячейке в виде прямоугольного параллелепипеда с периодическими граничными условиями. Для данной модели могут быть использованы и свободные условия, но мы использовали периодические, чтобы атомы, испаряющиеся при больших температурах с поверхности частицы, оставались в расчетной ячейке. Расстояние между стенками расчетной ячейки было достаточно большим для того, чтобы исключить взаимодействие частицы со своим виртуальным двойником.

Для описания межатомных взаимодействий в системе Ti–Al использовались потенциалы модели погруженного атома (embedded atom model, EAM) из работы [15], где они были получены на основе сопоставления с экспериментальными данными и *ab initio* расчетами для различных свойств и струк-

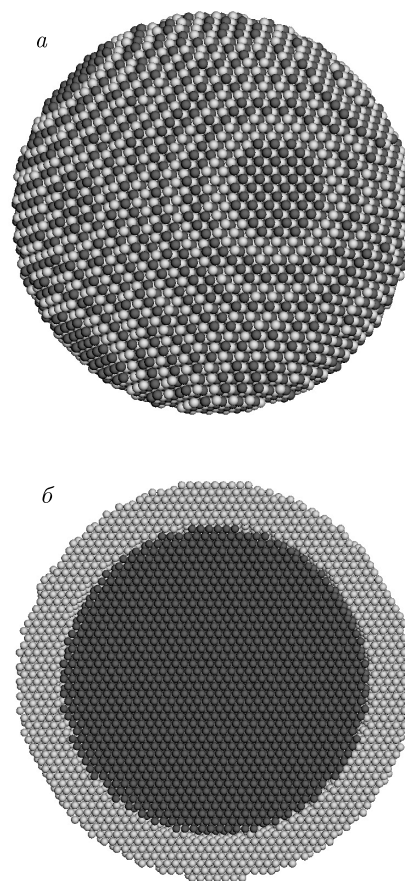


Рис. 1. Примеры начальных структур наночастиц: а — TiAl диаметром 9 нм; б — срез частицы Ti диаметром 11 нм в оболочке Al (Ti — темные атомы, Al — светлые атомы)

тур металлов Ti, Al и интерметаллидов Ti₃Al и TiAl. Они хорошо зарекомендовали себя при проведении различных исследований и прошли успешную апробацию по широкому спектру механических и структурно-энергетических свойств сплавов системы Ti–Al [15–19].

Температура в модели задавалась через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла с учетом теплового расширения. В связи с тем, что при высоких температурах диффузия на границе Ti–Al происходит активно и граница быстро размывается, метод поиска температуры плавления путем постепенного повышения температуры, как, например, в работах [12, 13], был исключен. В нашей работе мы начинали каждый эксперимент со структуры, полученной после первичной релаксации, задавая ту или иную температуру и поддерживая ее постоянной с помощью термостата Ноэе–Гувера. Один компьютерный эксперимент длился от 20 до 500 пс в зависимости от размера частицы и скоро-

сти фронта плавления. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики составлял 2 фс. Температура плавления частиц определялась по относительно резкому увеличению средней потенциальной энергии атомов (при исследовании частиц в алюминиевой матрице анализировалась энергия только атомов Ti). Кроме того, плавление, как будет показано на рисунках ниже, обычно хорошо видно визуально. Для приблизительной оценки температуры плавления сначала температура задавалась с шагом 50 К. Но вблизи точки плавления шаг изменения температуры уменьшался вплоть до 5 К.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Плавление частиц начиналось с поверхности. При этом движение фронта плавления было хорошо видно визуально, особенно в случае сравнительно больших частиц. На рис. 2а изображена частица Ti диаметром 12 нм в момент движения фронта плавления от поверхности внутрь частицы. Скорость движения фронта зависела от температуры и возрастала с повышением температуры. Согласно работам [20, 21], фронт плавления–кристаллизации движется в металлах со скоростью порядка нескольких десятков м/с, уменьшаясь почти до нуля при температуре плавления. Скорость движения фронта плавления круглой частицы не была постоянной, а увеличивалась по мере уменьшения размера кристаллического ядра.

При температурах выше температуры плавления алюминиевой оболочки (примерно 1000 К в используемой модели) начиналась интенсивная взаимодиффузия на границе раздела частицы и алюминия, скорость которой, однако, в большинстве случаев была ниже скорости движения фронта плавления (рис. 2б). Расширяющаяся диффузионная зона в значительной степени разрыхляла границу, нарушая ее кристаллическую структуру. При температурах, близких к температуре плавления частицы, диффузия интенсифицировалась еще больше из-за плавления приграничного слоя частицы. Проникающие в частицу атомы Al ускоряли движение фронта плавления, быстро занимая очередной разрушенный слой частицы.

В системах $Ti_3Al+(Al)$ и $TiAl+(Al)$ (алюминиевая оболочка обозначена как (Al)) при тех же температурах диффузия протекала слабее, чем в системе $Ti+(Al)$, что объясняется сравнительно более крепкими межатомными связями в интерметаллидах. Но вблизи температуры плавления интерме-

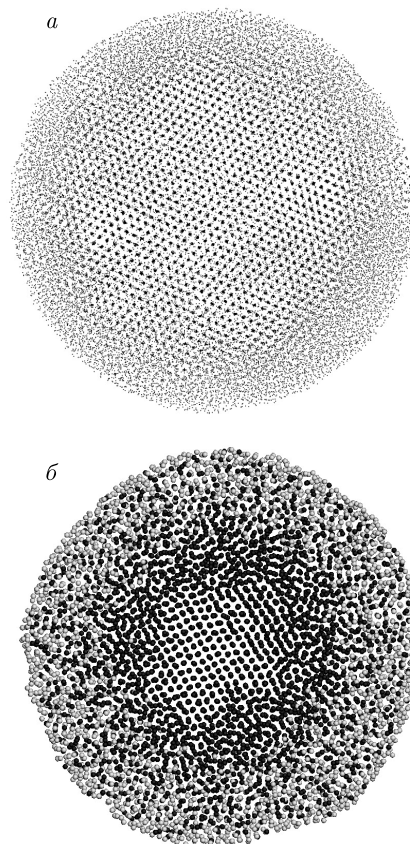


Рис. 2. Структура центрального слоя частицы в процессе плавления: а — фронт плавления, движущийся от свободной поверхности, в частице Ti диаметром 12 нм при температуре 2000 К в момент времени 150 пс; б — размытая в результате диффузии граница между Ti (черные атомы) и Al (белые атомы) в частице Ti диаметром 9 нм в оболочке Al при температуре 1970 К в момент времени 50 пс

таллических наночастиц возникала такая же ситуация, как в случае системы $Ti+(Al)$, — образующийся жидко-жидкофазный контакт на границе приводил к интенсивной диффузии и практически к такому же эффекту снижения температуры плавления частицы при наличии алюминиевой оболочки, как в случае частицы Ti.

На рис. 3 изображены полученные зависимости температур плавления частиц от их диаметра в вакууме и в алюминиевой матрице. На рисунках также штриховыми линиями приведены соответствующие аппроксимационные кривые, полученные из сопоставления, что снижение температуры плавления пропорционально отношению площади поверхности частицы к ее объему:

$$T_m(d) = T_m^0 - \frac{A}{d - \delta}. \quad (1)$$

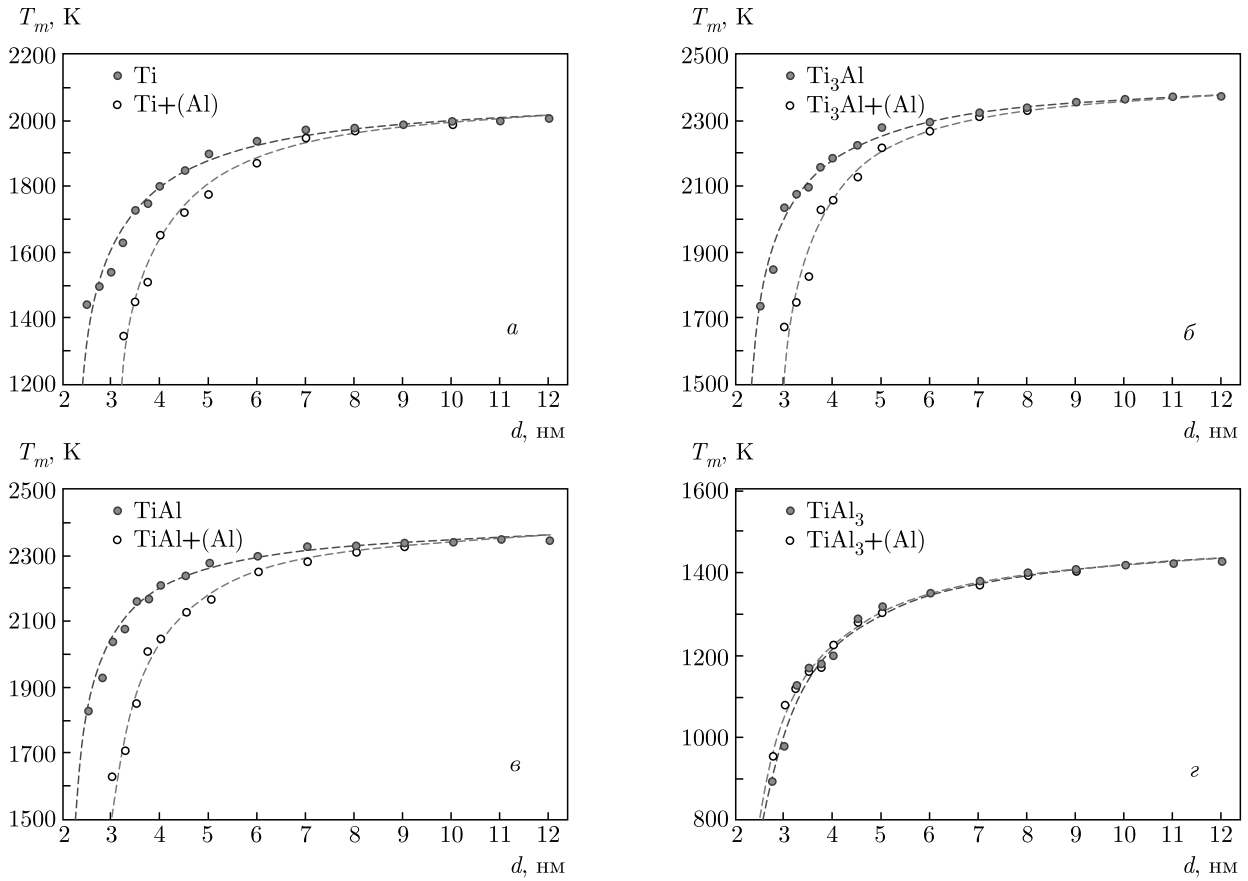


Рис. 3. Зависимости температуры плавления от диаметра частицы в вакууме (темные точки) и в алюминиевой матрице (светлые точки): а — Ti; б — Ti_3Al ; в — TiAl; г — $TiAl_3$

Здесь T_m и T_m^0 — температуры плавления соответственно частицы и массивного материала, d — диаметр частицы, A — параметр, отвечающий за степень влияния поверхности частицы на ее плавление, δ — поправка, учитывающая толщину приповерхностного слоя частицы.

Согласно полученным данным, значительное снижение температуры плавления касается действительно очень малых частиц, имеющих диаметр порядка нескольких нанометров. Формула (1) хорошо описывает все найденные зависимости, что подтверждает известный факт о снижении температуры плавления наночастиц по мере уменьшения их диаметра [8–13]. В таблице приведены значения параметров A и δ , используемых в формуле (1).

Как видно из таблицы, для всех рассмотренных частиц в вакууме приходилось учитывать поправку $\delta = 1.6$ нм для их диаметра. Это говорит о том, что эффективная толщина приповерхностного слоя частицы, влияющая на снижение температуры плавления, равна примерно 0.8 нм. Для частиц в алюми-

Таблица. Значения параметров A и δ

	A , К · нм	δ , нм
Ti	680	1.6
Ti+(Al)	770	2.3
Ti_3Al	620	1.6
$Ti_3Al+(Al)$	660	2.3
TiAl	560	1.6
TiAl+(Al)	660	2.3
$TiAl_3$	680	1.6
$TiAl_3+(Al)$	680	1.5

ниевой матрице поправка δ оказалась выше (2.3 нм) и также одинакова для всех рассмотренных частиц, кроме $TiAl_3$, что, очевидно, было вызвано размыти-

ем границы вследствие взаимной диффузии на границе частицы и жидкого алюминия. Принципиально другой результат был получен для частиц TiAl_3 — оболочка из алюминия не снижала, а в некоторых случаях даже немного повышала температуру плавления. Значения, полученные для частиц в вакууме и в алюминиевой матрице, на рис. 3г почти совпадают. По всей видимости, это связано с тем, что некоторые атомы Ti на поверхности частицы в этом случае, создавая относительно более крепкие связи по сравнению со связями атомов в алюминии, частично «укрепляют» поверхность, увеличивая эффективный диаметр частицы ($d - \delta$).

Температура плавления титана ($T_m = 1995$ К в модели) достаточно хорошо совпала со справочным значением ($T_m = 1943$ К), что является дополнительным подтверждением физической адекватности используемых потенциалов. Довольно близкими оказались значения для TiAl_3 : $T_m = 1520$ К в модели и $T_m = 1613$ К согласно фазовой диаграмме [1]. Однако для интерметаллидов Ti_3Al и TiAl потенциалы из работы [15] дают завышенное значение температуры плавления, для обоих интерметаллидов она оказалась выше 2300 К.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом молекулярной динамики проведено исследование зависимости температуры плавления наночастиц Ti, Ti_3Al , TiAl и TiAl_3 от их диаметра в вакууме и в алюминиевой матрице. Для всех рассматриваемых наночастиц температура плавления снижалась по мере уменьшения их диаметра пропорционально отношению площади поверхности частицы к ее объему. Значительное снижение температуры плавления начиналось, как правило, при диаметре частиц менее примерно 7 нм. При этом температуры плавления частиц Ti, Ti_3Al и TiAl в алюминиевой матрице оказались ниже, чем аналогичных частиц в вакууме, что объясняется размытием и разупорядочением границы раздела вследствие взаимной диффузии. Принципиально другой результат был получен для частиц TiAl_3 — оболочка из алюминия в этом случае почти не оказывала влияния на температуру плавления частицы, что, по всей видимости, объясняется «укрепляющим» действием атомов Ti, находящихся на поверхности частицы. По мере увеличения размера частиц в вакууме и в алюминии, значения их температуры плавления стремились к одной и той же величине, что объясняется сниже-

нием роли поверхности и ее размытием вследствие взаимной диффузии с ростом диаметра частицы.

Плавление частиц начиналось с поверхности. Скорость движения фронта плавления зависела от температуры и возрастала с повышением температуры. В случае частиц, находящихся в матрице алюминия при температурах, близких к температуре плавления частицы, диффузия интенсифицировалась из-за плавления приграничного слоя частицы, что приводило к ускорению движения фронта плавления.

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

ЛИТЕРАТУРА

1. С. Г. Григоренко, Г. М. Григоренко, О. М. Задорожнюк, Современная электрометаллургия **128**, 51 (2017).
2. J. Lapin, in *Proc. of the Conf. Metal 2009*, Vol. 19, No 21.5 (2009), pp. 2019–2031.
3. T. Tetsui, *Rare Metals* **30**, 294 (2011).
4. T. Voisin, J.-P. Monchoux, and A. Couret, in *Spark Plasma Sintering of Materials*, ed. by P. Cavaliere, Springer, Cham (2019), p. 713.
5. V. V. Boldyrev and K. Tkačová, *J. Mater. Synth. Process.* **8**(3), 121 (2000).
6. V. Y. Filimonov, M. V. Loginova, S. G. Ivanov, A. A. Sitnikov, V. I. Yakovlev, A. V. Sobachkin, A. Z. Negodyaev, and A. Y. Myasnikov, *Comb. Sci. Techn.* **192**(3), 457 (2020).
7. M. V. Loginova, V. I. Yakovlev, V. Yu. Filimonov, A. A. Sitnikov, A. V. Sobachkin, S. G. Ivanov, and A. V. Gradoboev, *Lett. Mater.* **8**(2), 129 (2018).
8. Э. Л. Нараев, УФН **162**(9), 49 (1992).
9. Ph. Buffat and J.-P. Borel, *Phys. Rev. A* **13**, 2287 (1976).
10. G. L. Allen, R. A. Bayles, W. W. Gile, and W. A. Jesser, *Thin Solid Films* **144**, 297 (1986).
11. T. Castro, R. Reifemberger, E. Choi, and R. P. Andres, *Phys. Rev. B* **42**, 8548 (1990).

12. V. M. Samsonov, S. S. Kharechkin, S. L. Gafner, L. V. Redel', and Yu. Ya. Gafner, *Crystallogr. Rep.* **54**, 526 (2009).
13. И. В. Чепкасов, Ю. Я. Гафнер, М. А. Высокун, Л. В. Редель, *ФТТ* **59**, 2050 (2017).
14. E. V. Levchenko, A. V. Evteev, T. Lorscheider, I. V. Belova, and G. E. Murch, *Comput. Mater. Sci.* **79**, 316 (2013).
15. R. R. Zope and Y. Mishin, *Phys. Rev. B* **68**, 024102 (2003).
16. Y.-K. Kim, H.-K. Kim, W.-S. Jung, and B.-J. Lee, *Comput. Mater. Sci.* **119**, 1 (2016).
17. Q.-X. Pei, M. H. Jhon, S. S. Quek, and Z. Wu, *Comput. Mater. Sci.* **188**, 110239 (2021).
18. Г. М. Полетаев, *ЖЭТФ* **160**, 527 (2021).
19. Г. М. Полетаев, И. В. Зоря, *ЖЭТФ* **158**, 485 (2020).
20. W.-L. Chan, R. S. Averbach, D. G. Cahill, and Y. Ashkenazy, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 095701 (2009).
21. M. I. Mendeleev, F. Zhang, H. Song, Y. Sun, C. Z. Wang, and K. M. Ho, *J. Chem. Phys.* **148**, 214705 (2018).

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ИНТЕРКАЛЯЦИИ КОБАЛЬТА ПОД БУФЕРНЫЙ СЛОЙ УГЛЕРОДА НА МОНОКРИСТАЛЛЕ SiC (0001)

С. О. Фильнов^{a}, А. А. Рыбкина^a, А. В. Тарасов^a, А. В. Ерыженков^a,
И. А. Елисеев^b, В. Ю. Давыдов^b, А. М. Шикин^a, А. Г. Рыбкин^a*

^a Санкт-Петербургский государственный университет
198504, Санкт-Петербург, Россия

^b Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе
194021, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 6 октября 2021 г.,
после переработки 26 октября 2021 г.
Принята к публикации 27 октября 2021 г.

Исследованы процессы синтеза буферного слоя углерода на монокристалле SiC (0001) и его последующей интеркаляции атомами кобальта. С помощью рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии было показано, что процесс интеркаляции сопровождается образованием поверхностного сплава силицидов кобальта под квазисвободным графеном. Данные, измеренные методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением, демонстрируют наличие конуса Дирака вблизи уровня Ферми, что подтверждает образование квазисвободного графена в результате интеркаляции. Морфология и однородность полученной системы были изучены с помощью атомно-силовой микроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния света. В рамках теории функционала плотности были исследованы особенности зонной структуры графена на возможных сплавах силицидов кобальта. Расчеты химического сдвига $2p$ -уровня Si для силицидов кобальта подтверждают наличие компонент CoSi и CoSi₂ в данных рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. При этом показано, что формирование квазисвободного графена с линейной дисперсией π -состояний возможно только на поверхности CoSi. Учитывая важность исследования графена на изолирующих подложках, а также уникальные свойства графена при контакте с магнитными металлами, мы надеемся, что данное исследование внесет вклад в дальнейшую реализацию графена в устройствах спинтроники и нанoeлектроники.

DOI: 10.31857/S0044451022020080

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение и модификация электронной структуры графена по-прежнему является одной из ключевых задач в физике конденсированного состояния [1–7]. Линейный дисперсионный спектр электронов $E(k)$ в графене обеспечивает аномально высокую проводимость [1, 2, 7], в то время как возможность открытия запрещенной зоны в точке Дирака при контакте с магнитными и тяжелыми металлами позволяет предсказать множество фундаментальных эффектов, таких как квантовый аномальный эффект Холла, квантовый долинный эффект

Холла и др. [6, 8, 9]. Более того, уникальные свойства конуса Дирака в графене и возможность его модификации открывают новые возможности для применения в элементах устройств спинтроники и нанoeлектроники [3–5].

Для реализации уникальных свойств графена необходимо использовать изолирующие подложки. Карбид кремния (SiC) — один из наиболее доступных изоляционных материалов, используемых в современной электронике, и перспективная подложка для изготовления графена [10]. Существуют два основных метода синтеза графена на монокристаллах SiC [10–12]. Первый связан с термическим отжигом поверхности SiC до получения системы Gr/Б-СГ/SiC, где БСГ — это буферный слой графена (БСГ), в котором примерно 1/3 атомов взаимодей-

* E-mail: sfilnov@gmail.com

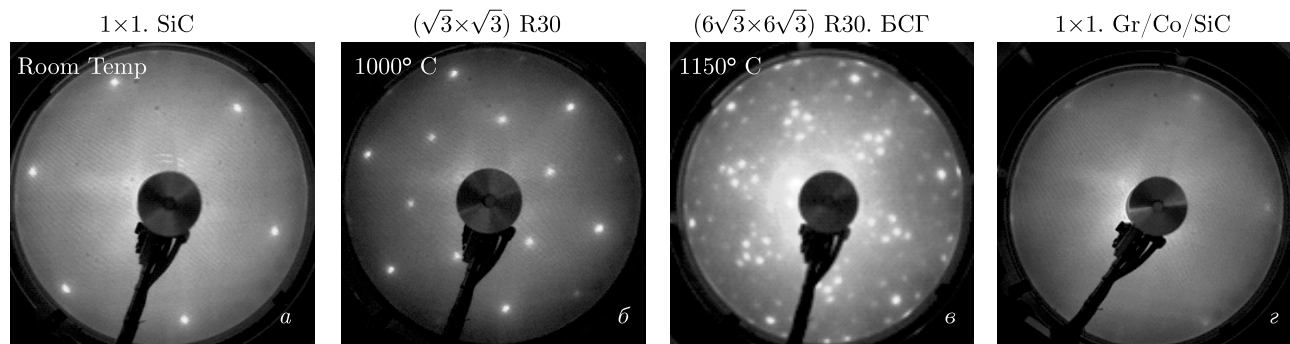


Рис. 1. Картины ДМЭ: *a* — исходная поверхность $6H$ -SiC (0001), энергия электронов 50 эВ; *б* — $(\sqrt{3} \cdot \sqrt{3})R30^\circ$ реконструкция поверхности SiC при температуре отжига 950°C , энергия электронов 57 эВ; *в* — реконструкция $(6\sqrt{3} \cdot 6\sqrt{3})R30^\circ$ поверхности SiC при температуре отжига 1150°C , энергия электронов 89 эВ; *г* — структура 1×1 , полученная после интеркаляции кобальта при 450°C

ствуют посредством ковалентной связи с атомами поверхности SiC, а Gr — квазисвободный монослой углерода, или графен. Второй способ также связан с термическим отжигом поверхности, но до получения системы БСГ/SiC с последующей интеркаляцией атомов различных элементов (Cu, Sb, Ge и др. [13–15]) под буферный слой углерода. Процесс интеркаляции в таком случае приводит к разрушению ковалентной связи между атомами углерода в БСГ и подложкой, превращая БСГ в графен. С учетом того, что электронная структура графена при контакте с металлами обладает рядом уникальных свойств [6, 8, 9], в данной работе был выбран именно второй способ получения графена на монокристалле SiC.

Кобальт — один из немногих элементов, обладающих ферромагнитным порядком при комнатной температуре [16], а также перспективная подложка для контакта с графеном [17]. В работах [5, 18] был изучен процесс интеркаляции Co под графен, выращенный с помощью первого метода синтеза на монокристалле SiC. Было показано, что Co эффективно интеркалируется под графен с образованием поверхностного сплава силицидов кобальта. Однако процесс интеркаляции Co под графен сопровождается образованием нескольких слоев графена, ввиду того, что Co также интеркалируется под БСГ. При этом получение однослойного графена при интеркаляции Co возможно только при использовании БСГ на SiC и интеркаляции атомов кобальта под него. Более того, процессы сплавления интеркалируемого металла и формирование ультратонких поверхностных пленок под графеном все еще остаются мало изученными.

В данной работе мы исследуем процесс формирования, электронную и кристаллическую структуру графена при интеркаляции атомов Co под БСГ. Процессы синтеза БСГ и интеркаляции атомов кобальта изучаются с помощью методов дифракции медленных электронов (ДМЭ) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). С помощью методов спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) и атомно-силовой микроскопии (АСМ) мы рассматриваем морфологию и кристаллическую структуру системы до и после интеркаляции. Электронная структура полученной системы изучается с помощью методов фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР) и РФЭС. С помощью расчетов в рамках теории функционала плотности мы исследуем поведение зонной структуры графена на возможных сплавах силицидов кобальта.

2. ПОЛУЧЕНИЕ БУФЕРНОГО СЛОЯ НА SiC (0001)

Известно, что термическая графитизация Si-терминированной поверхности SiC в зависимости от температуры и времени синтеза может приводить к формированию буферного слоя графена (БСГ), однослойного и многослойного графена [10, 12]. Основной целью данной работы было изучение процессов формирования силицидов кобальта под графеном. Для этого сначала был проведен синтез БСГ путем термической графитизации Si-терминированной поверхности SiC(0001) политаипа $6H$ при температурах около 1150°C , а затем с помощью интеркаляции атомов кобальта происходило превращение БСГ в графен. Атомы углерода в решетке БСГ образуют

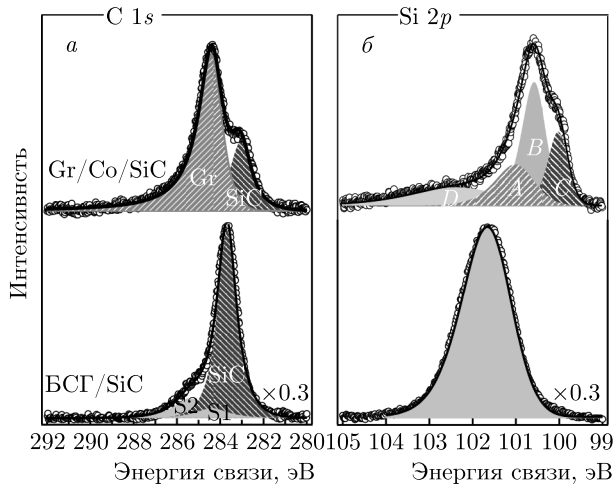


Рис. 2. РФЭС-спектры уровней $C 1s$ и $Si 2p$, измеренные для исходного монокристалла SiC с выращенным БСГ (нижние части) и после интеркаляции 20 \AA Co

структуру $(6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3})R30^\circ$, и приблизительно $1/3$ из них ковалентно связаны с подложкой. На рис. 1 показано изучение эволюции системы в результате прогрева с помощью метода ДМЭ. Изначально монокристалл SiC характеризуется структурой 1×1 с четко различимыми рефлексами в вершинах шестиугольника, рис. 1а. Затем при температурах около 1000°C происходит реконструкция поверхности до структуры $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$. И, наконец, как видно на рис. 1б, прогрев до 1150°C приводит к появлению структуры $(6\sqrt{3} \times 6\sqrt{3})R30^\circ$. Влияние прогрева на монокристалл SiC также было изучено с помощью метода РФЭС. На рис. 2 (нижние части) показаны результаты измерения РФЭС внутренних $C 1s$ - и $Si 2p$ -уровней для данной системы. Разложение спектра $C 1s$ -уровня системы характеризуется компонентами S_1 (284.60 эВ) и S_2 (285.45 эВ), соответствующими углероду в БСГ, и компонентой объемного углерода в соединении SiC (283.69 эВ). Компонента S_2 относится к химической связи внутри плоскости поверхности реконструированного слоя, а S_1 связана со взаимодействием реконструированного слоя с верхними атомами Si. Спектр $Si 2p$ -уровня (рис. 3б) представляет собой одиночный пик с энергией связи 101.66 эВ [19]. Заметим, что спин-орбитальный дублет $Si(2p_{1/2}$ и $2p_{3/2})$ не разрешается, ввиду использования немонахроматизированного излучения K_α Al [20]. Таким образом, с помощью методов ДМЭ и РФЭС было показано, что прогрев монокристалла SiC при температурах около 1150°C является эффективным методом для получения БСГ.

3. ИНТЕРКАЛЯЦИЯ КОБАЛЬТА ПОД БУФЕРНЫЙ СЛОЙ

Интеркаляция кобальта проводилась путем напыления пленки Co толщиной 20 \AA на нагретую до 450°C подложку SiC (0001). На рис. 1з показано картина ДМЭ после интеркаляции Co. Можно заметить, что система теперь характеризуется типичной для гексагональных ячеек структурой 1×1 , что свидетельствует об успешной интеркаляции кобальта под БСГ. Полученные результаты свидетельствуют о трансформации БСГ в монослой графена. На верхней части рис. 2 показаны изменения РФЭС-спектров $C 1s$ - и $Si 2p$ -уровней и их разложение на составляющие после интеркаляции атомов кобальта. Из разложения спектра $C 1s$ можно заметить, что компоненты S_1 и S_2 пропадают и появляется интенсивная компонента при энергии связи 284.4 эВ , соответствующая графену [10, 18], а компонента углерода в монокристалле SiC смещается на 0.7 эВ в сторону меньших энергий связи до 283.0 эВ , что обусловлено изгибом зон при контакте металла с полупроводником [21]. Следует отметить, что спектр $Si 2p$ уже представляет собой сложную многокомпонентную форму. Компонента B, соответствующая Si в объеме карбида кремния, оказывается так же сдвинута на 0.7 эВ в сторону меньших энергий связи до 100.9 эВ , как и компонента $C 1s$. Кроме основной объемной компоненты, в разложении присутствуют дополнительные вклады — компоненты A и C. Компонента A при энергии связи 102 эВ предположительно соответствует соединению CoSi. В работе [22] отмечалось наличие высокоэнергетической компоненты относительно объемной компоненты в спектре $Si 2p$, соответствующей соединению CoSi. Низкоэнергетическая компонента C при энергии связи 99.5 эВ может быть соотнесена с соединением $CoSi_2$ с меньшим содержанием Co [22]. Пик D, обладающий самой высокой энергией связи, мы соотносим с образованием оксидных групп кремния.

Для определения глубины залегания слоев после интеркаляции, мы провели анализ РФЭС-спектров при различных углах вылета фотоэлектронов. Известно, что интенсивность пиков, получаемых в случае РФЭС, зависит от глубины залегания исследуемого элемента. Пренебрегая дифракционными эффектами [23], из анализа зависимости интенсивности РФЭС-пиков от угла вылета фотоэлектронов можно определить очередность следования соединений в системе. На рис. 3 представлены РФЭС-спектры системы при различных углах вылета фотоэлектронов. В таблице приведены данные анализа ин-

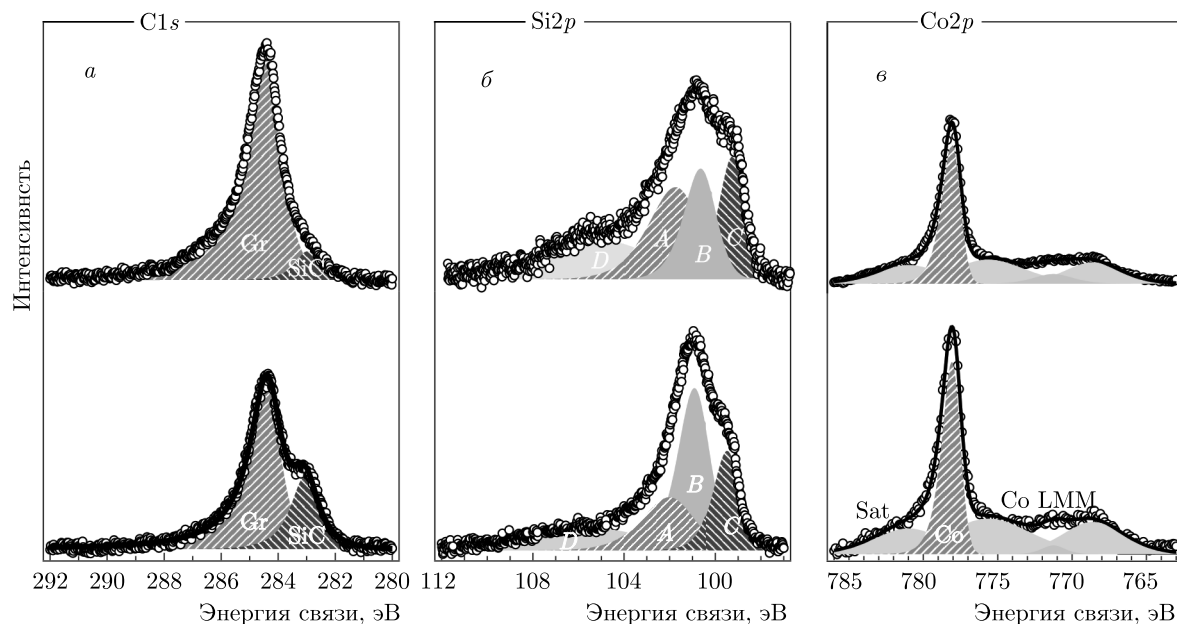


Рис. 3. Спектры РФЭС с угловым разрешением, измеренные при углах излучения 0° и 60° относительно нормали к поверхности

Таблица. Сравнения параметров рентгеновских фотоэлектронных пиков от угла эмиссии

Название пика	I_0/I_{60}	Полуширина, эВ
Gr	1.0	0.65
SiC	4.0	0.60
D	1.3	3.22
A	1.3	1.38
B	4.6	0.85
C	1.9	0.71
Co	1.9	0.76

тенсивности пиков в зависимости от угла вылета фотоэлектронов. В первой колонке показаны обозначения пиков в соответствии с указанными на рис. 2 и рис. 3. Во второй колонке показано отношение интенсивности этих пиков, измеренных при нормальной эмиссии и угле эмиссии 60° . Видно, что наиболее поверхностными пиками являются пики *A* и *D*. Как описано выше, пик *A* предположительно соответствует соединению CoSi . Более глубокое залегание имеют элементы с пиками *Co* и *C*, соответствующие кобальту и предположительно CoSi_2 . Из полу-

ченных данных можно сделать вывод о том, что в процессе интеркаляции под графеном синтезируются силициды кобальта с предположительными стехиометриями CoSi и CoSi_2 .

Стоит отметить, что в литературных данных существуют немалые противоречия относительно энергетического положения компонент $\text{Si}2p$ в соединениях Co-Si [18, 22, 24]. Это может быть связано с чувствительностью соединений Co-Si к условиям синтеза: количеству напыленного кобальта, температуре реакции и кристаллической структуре поверхности подложки.

4. ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК И МОРФОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ ГРАФЕНА

Кристаллическая структура и морфология были изучены с помощью методов ДМЭ, АСМ и КРС. На рис. 4 показаны карты топографии поверхности образца, полученные методом АСМ. Карты измерены в двух областях: в области, закрытой металлической маской — рис. 4а, и в центральной области после интеркаляции Co — рис. 4б. Закрытая область представляет собой ступенчатую поверхность, характерную для отожженного SiC [25], с множеством дефектов, которые, возможно, связаны с образованием микротрубок [26]. Видно, что интеркаляция ато-

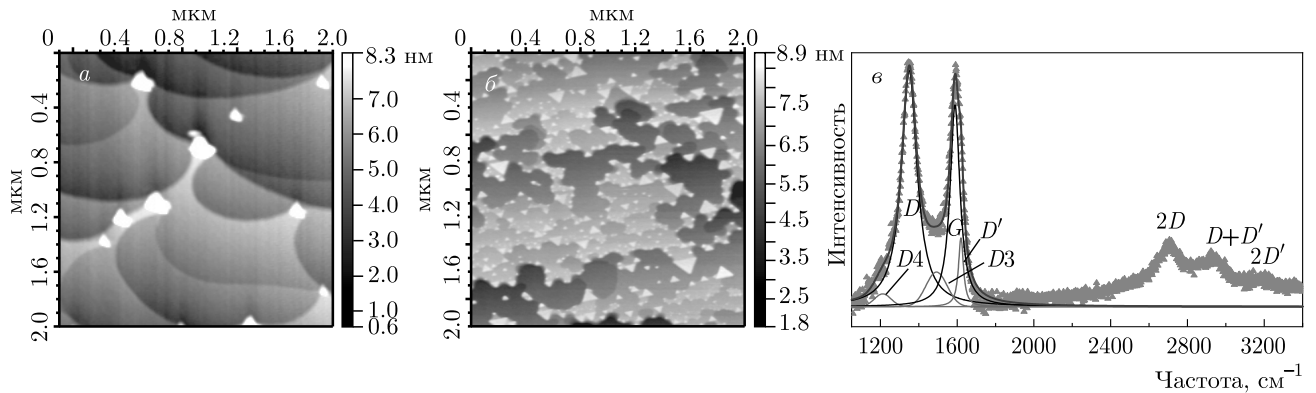


Рис. 4. АСМ-изображения поверхности отожженного 6H-SiC (0001) (а) и поверхность 6H-SiC (0001) после роста БСГ и интеркаляции Co (б). Спектр КРС, измеренный в центре образца (в). Символы — экспериментальные данные, сплошные линии — результат аппроксимации

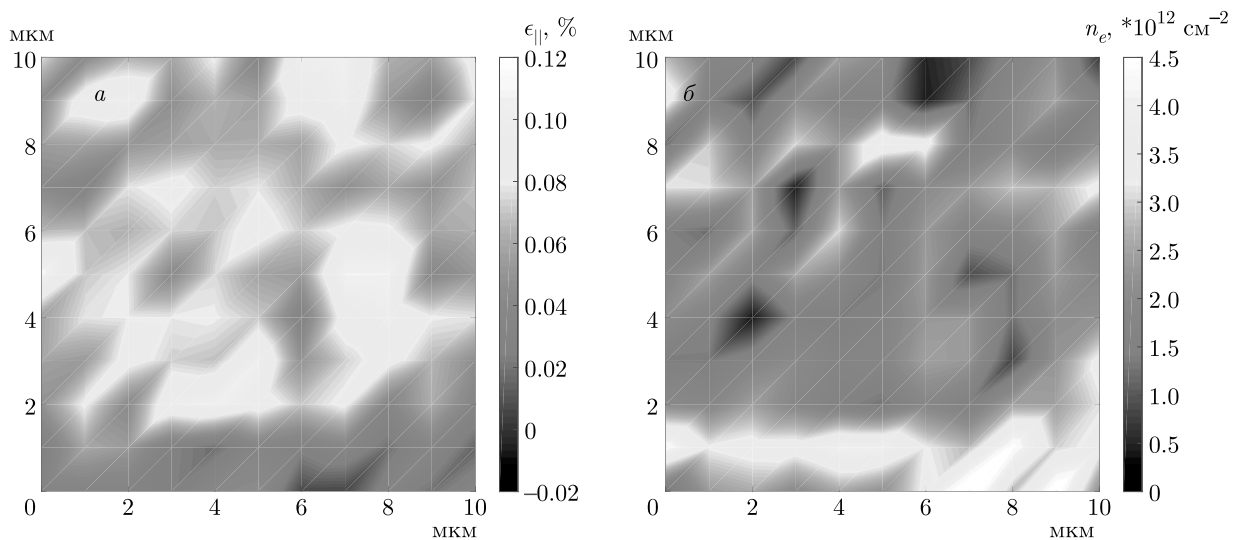


Рис. 5. Карты распределения концентрации носителей заряда (б) и величины двуслойной деформации (а), полученные в результате обработки массива спектров КРС, измеренного в области размером $10 \times 10 \text{ мкм}^2$ в центре образца Gr/CoSi_x/SiC

мов Co приводит к появлению треугольных кластеров размером от 1 до 8 нм. В работе [27] сообщалось, что осаждение Co на поверхность Si (111) приводит к образованию островков CoSi_x ($x = 1, 2$) приблизительно треугольной формы.

Спектры КРС образца после роста БСГ и интеркаляции Co были измерены в шести различных точках на его поверхности: в центре — точка 1, в середине каждой из сторон образца с отступом в 2 мм от края — точки 2–5, и в области, закрытой металлической маской, — точка 6. Спектры, измеренные в точках 1–5, слабо отличались друг от друга, что указывает на достаточно высокую однородность полученной системы. На рис. 4в представлен спектр, типичный для области образца, не закры-

той маской. В спектрах наблюдаются линии, характерные для графена: линии G (1585 см^{-1}) и 2D (2700 см^{-1}), а также дополнительные линии, связанные с дефектами: D4 (1350 см^{-1}), D' (1620 см^{-1}) и D3 (1500 см^{-1}). Наличие ярко выраженной линии 2D позволяет утверждать, что буферный слой углерода, изначально находившийся на поверхности SiC, успешно отделился от подложки и превратился в графен. Также в окрестности центра образца были измерены карты КРС. С помощью разложения каждого спектра на компоненты (аналогично представленному на рис. 4в) в автоматическом режиме были построены карты распределения различных параметров спектральных линий и производных от них величин. В частности, с помощью методики разде-

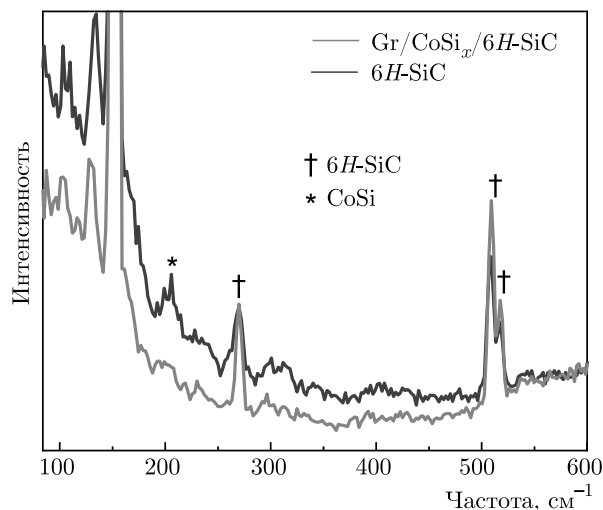


Рис. 6. Спектры КРС образца $\text{Gr}/\text{CoSi}_x/\text{SiC}$, измеренные в центральной области образца ($\text{Gr}/\text{CoSi}_x/6H\text{-SiC}$), и в области, закрытой металлической маской ($6H\text{-SiC}$)

ления вкладов деформации и допирования в положения линий G и $2D$ для графена на SiC [28, 29] были построены карты распределения концентрации электронов n_e и величины двуосной деформации $\epsilon_{||}$ — рис. 5. Средние величины деформации и концентрации электронов в двух исследованных областях оказались одинаковыми ($n_e = 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$, $\epsilon_{||} = 0.06\%$). Для эпитаксиального графена, синтезируемого на подложках SiC методом термодеструкции, характерные величины деформации находятся в диапазоне 0.2–0.4%. Полученное нами значение деформации указывает на то, что кристаллическая решетка графена не связана с подложкой SiC , как в случае графена, синтезируемого методом термодеструкции, и является еще одним подтверждением успешной интеркаляции буферного слоя наряду с наличием линии $2D$ и отсутствием вклада буферного слоя. Известно, что для силицидов кобальта характерно наличие в их спектрах КРС линий с частотами 204 см^{-1} (CoSi) и 325 см^{-1} (CoSi_2) [30]. С целью подтверждения наличия силицидов кобальта под пленкой графена были измерены спектры КРС в области $100\text{--}500 \text{ см}^{-1}$. На рис. 6 приведено сравнение спектров, измеренных в центре образца, и в области, закрытой металлической маской. В случае спектра, измеренного в центре образца, можно заметить дополнительный пик с частотой 204 см^{-1} , наличие которого можно связать с присутствием пленки CoSi . Характерный для CoSi_2 пик в спектре не наблюдается, что может быть вызвано небольшой долей CoSi_2 в сформированной под графеном пленке CoSi_x .

5. ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ГРАФЕНА

На рис. 7а приведены результаты исследования электронной структуры графена вблизи уровня Ферми методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР). Можно заметить, что вблизи уровня Ферми данная система характеризуется наличием конуса Дирака, что подтверждает трансформацию БСГ в графен в процессе интеркаляции атомов Co . Точка Дирака для данной системы располагается немного ниже уровня Ферми -0.4 эВ , что свидетельствует о допировании n -типа графена. Похожим уровнем электронного допирования и формой линий обладает графен, полученный при интеркаляции атомов Si на монокристалле Co [31]. Также можно заметить отсутствие особенностей, связанных с двуслойным графеном [32]. Состояние с энергией связи около 3 эВ относительно уровня Ферми можно соотнести с зоной электронных состояний CoSi , согласно работам [33, 34]. Данный факт, совместно с анализом РФЭС-спектров, свидетельствует о расположении CoSi под графеном.

Для изучения вида зонной структуры графена на поверхностях силицидов CoSi и CoSi_2 были проведены расчеты с помощью теории функционала плотности (ТФП) системы $\text{Gr}/\text{CoSi}/\text{CoSi}_2/\text{Gr}$ (рис. 7б и рис. 8). Объем силицида соответствовал стехиометрии CoSi_2 со структурой типа CaF_2 , а первые два верхних слоя модельной ячейки были превращены в CoSi со структурой типа CsCl в соответствии с выводами структурного анализа системы $\text{Co-Si}(111)$ [27], основанными на данных, полученных методом сканирующей туннельной спектроскопии. Согласно работе [27], поверхность CoSi_2 не является энергетически выгодной и должна испытывать реконструкцию в стехиометрию CoSi . Данный факт подтверждается проведенной структурной оптимизацией модельной системы. Если структура поверхности CoSi почти не меняется в процессе релаксации, то поверхность CoSi_2 с другой стороны модельной ячейки испытывает сильную деформацию с выдавливанием атомов кобальта на поверхность (рис. 8б). Это приводит к тому, что графен, связываясь с верхними атомами кобальта, теряет линейный характер дисперсии π -состояний вблизи K -точки (рис. 8г). При этом графен на поверхности CoSi остается достаточно свободным, хотя и испытывает некоторую корrugацию, приводящую к образованию запрещенной зоны. Эта цель, тем не менее, может и не проявляться в эксперименте, так как модельная ячейка имеет меньший период, нежели

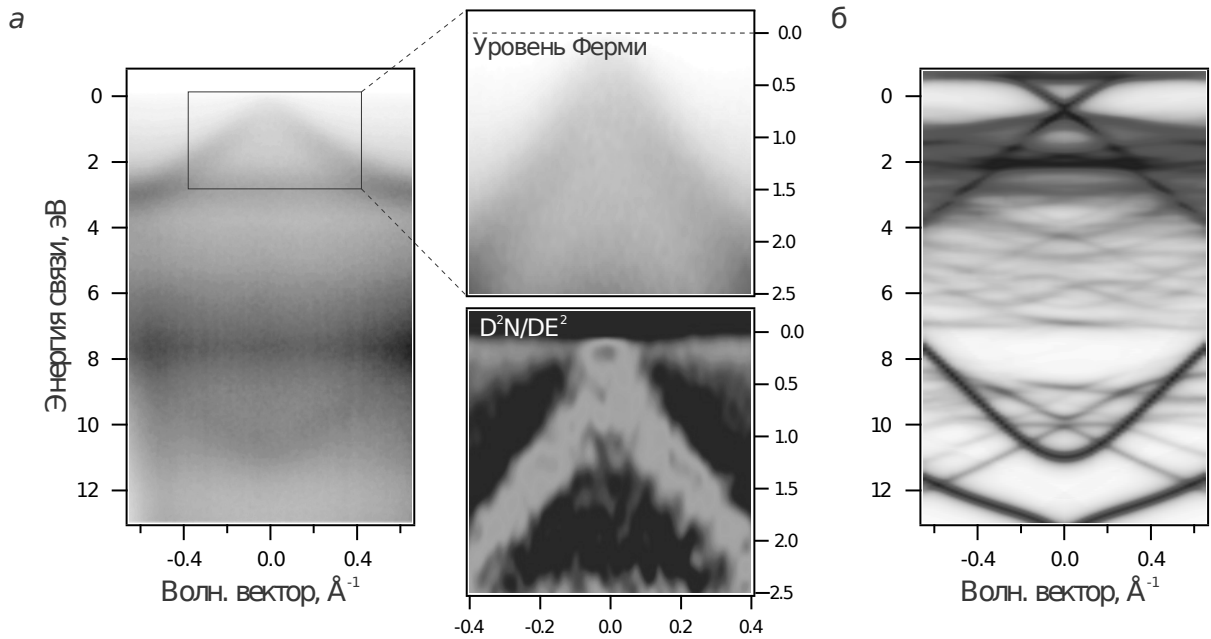


Рис. 7. а) Электронная зонная структура интеркалированной системы, измеренная в направлении, ортогональном $\bar{\Gamma}-\bar{K}$ поверхностной зоны Бриллюэна. Данные ФЭСУР были измерены при энергии фотонов 40.8 эВ (HeI_{α}) и при комнатной температуре. Для лучшей наглядности область с конусом Дирака показана в увеличенном масштабе и в виде второй производной от интенсивности по энергии. б) Теоретически рассчитанная зонная структура графена на CoSi в направлении, ортогональном направлению $\bar{\Gamma}-\bar{K}$

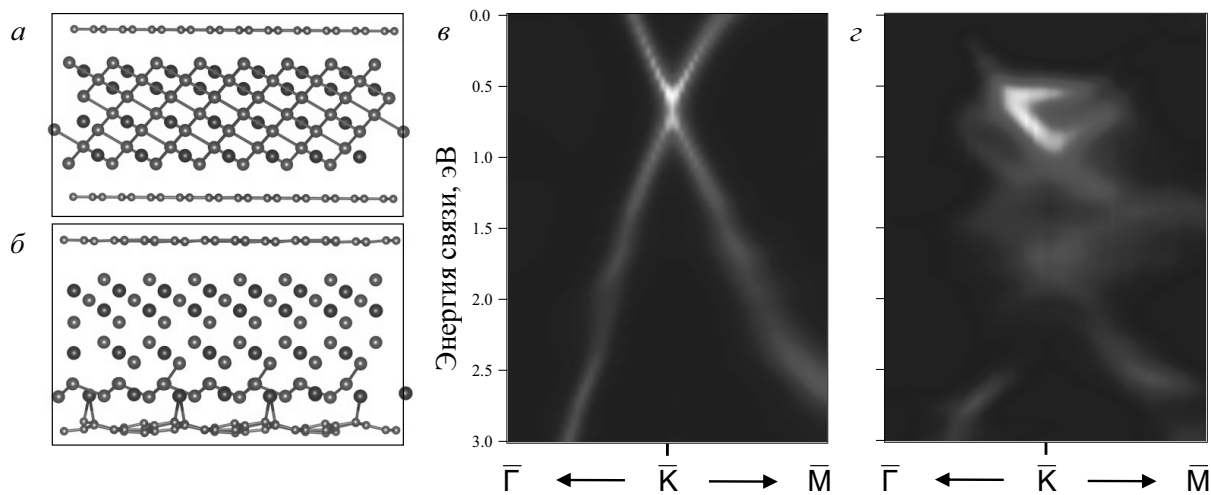


Рис. 8. Ячейка системы Gr/CoSi/CoSi₂/Gr до (а) и после (б) проведения процедуры минимизации межатомных сил. Теоретически рассчитанный вклад слоя графена в зонную структуру системы для поверхности CoSi (с) и CoSi₂ (д)

структура, имеющаяся в эксперименте. Поскольку сокращение периода сопряжено с небольшим (2%) растяжением решетки графена, корrugация реальной системы может оказаться гораздо меньше предсказываемой, что влечет за собой закрытие энергетической щели. Этим же недостатком модели можно объяснить более сильное электронное допирование системы -0.6 эВ, по сравнению с экспери-

ментальным значением -0.4 эВ (рис. 7б). Расчеты системы с ее реальным периодом крайне затруднительны, но выводы о наличии конуса Дирака в графене на CoSi и его отсутствие в графене на CoSi₂ можно считать достоверными. Для более детального сравнения результатов ТФП-вычислений с ФЭСУР-изображениями на рис. 7б представлена смоделированная картина зонной структуры систе-

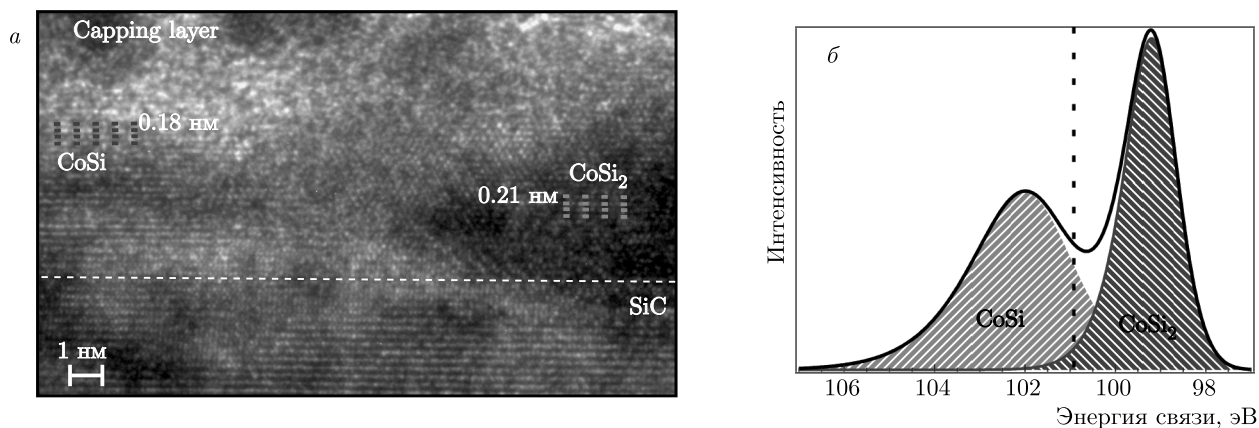


Рис. 9. *а*) ПЭМ-изображение системы PtC/Gr/CoSi/CoSi₂/SiC. *б*) Положения Si2*p*-уровней CoSi и CoSi₂, полученные из ТФП-расчетов с электронной вакансией на остоном уровне. Параметры интенсивности и полуширин для модельных пиков взяты из разложения данных РФЭС на отдельные компоненты (таблица). Штриховой линией отмечено экспериментальное положение объемной компоненты в SiC

мы Gr/CoSi посредством выделения вклада графена и двух верхних слоев ячейки Gr/CoSi/CoSi₂/Gr, представленной на рис. 8*б*. Как можно заметить, помимо состояния с энергией связи 3 эВ, которое можно наблюдать на ФЭСУР-изображениях, ярко выраженным весом обладает состояние с энергией связи 2.1 эВ. Тот факт, что его не видно в экспериментально полученном изображении зонной структуры, может быть объяснено тем, что расчет никак не учитывает вероятность фотоэмиссии для фотоэлектронов с состояний валентной зоны. Это может приводить к тому, что в эксперименте будет наблюдаться только часть валентных состояний CoSi. Второй важной особенностью рассчитанной зонной структуры является наличие состояний при энергии связи 8 эВ, что подтверждает тот факт, что состояния, наблюдаемые примерно при этой же энергии связи на ФЭСУР-изображениях относятся к CoSi.

В качестве подтверждения корректности интерпретации данных РФЭС нами была проведена процедура расчета химического сдвига уровня Si2*p* при переходе от CoSi к CoSi₂. Часто, для того чтобы воспроизвести энергии связей уровней, наблюдаемых в эксперименте, бывает недостаточно учитывать только лишь их энергетические положения, определенные для электронной системы в ТФП, поскольку такой подход может приводить к значительным ошибкам при анализе экспериментальных спектров [35]. Если мы хотим иметь хорошую точность определения изменения энергии связи, наблюдаемую в спектре, то помимо изначального положения остоного уровня в невозбужденной элект-

ронной системе необходимо учитывать релаксацию «пассивных» электронов при удалении основного электрона. Для решения данной проблемы в так называемом Δ SCF-подходе [36] на рассматриваемом остоном уровне изучаемой нами системы создается электронная вакансия, затем в ходе сведения электронной плотности в процессе ТФП-расчета происходит релаксация электронной системы и созданная дырка подвергается экранированию со стороны окружающих ее валентных электронов. После этого мы должны узнать, насколько изменилась полная энергия системы при удалении электрона, сравнив систему с вакансией и изначальную систему. Данная процедура может быть проделана для Si2*p*-уровня объемных ячеек CoSi и CoSi₂. Согласно данным, полученных методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) высокого разрешения (рис. 9*а*), были определены межслоевые расстояния и заданы соответствующие расстояния в теоретических ячейках. На рис. 9*б* показано теоретически рассчитанное взаимное положение Si2*p*-уровней этих систем совместно с экспериментальным положением Si2*p* в объеме SiC. Для моделирования пиков были использованы интенсивности и полуширины, получаемые из аппроксимации экспериментальных спектров (таблица). Как можно видеть, определенное значение химического сдвига равняется 2.8 эВ с энергией связи CoSi большей, чем в CoSi₂. Это хорошо согласуется с экспериментальным значением 2.5 эВ, а полученное расхождение может быть объяснено отсутствием учета многоэлектронных эффектов при релаксации дырки в ТФП [36].

6. МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Синтез и исследования методами фотоэлектронной спектроскопии проводились *in situ* в условиях сверхвысокого вакуума на установке «Универ-М» в ресурсном центре «Физические методы исследования поверхности» Научного парка СПбГУ. В качестве источников возбуждения использовались узкополосный высокоинтенсивный источник ультрафиолетового излучения VUV 5k с монохроматором и рентгеновский источник излучения с Al-анодом. Толщина наносимых слоев кобальта контролировалась по кварцевым микровесам. Измерения методом АСМ проводились в атмосферных условиях и при комнатной температуре в полуконтактном режиме на оборудовании NT-MDT Solver. Спектры КРС измерялись в геометрии «обратного рассеяния» на установке Horiba Jobin-Yvon T64000, оснащенной конфокальным оптическим микроскопом. Источником возбуждения служил твердотельный лазер Nd:YAG с длиной волны 532 нм. Лазерный луч фокусировался на образец с помощью линзы объектива 100× (NA = 0.9) в пятно диаметром порядка 1 мкм. Расчеты в рамках ТФП были проведены с использованием вычислительных ресурсов Ресурсного Центра «Вычислительный центр СПбГУ» (<http://www.cc.spbu.ru/>). Моделирование электронной структуры исследуемой системы было проведено в рамках псевдопотенциального метода с использованием базиса локализованных псевдоатомных орбиталей, реализованного в программном пакете OpenMX [37, 38]. Для атомов C и Si базисный набор содержал 5 функций ($s2p2d1$), а атомы Co описывались с использованием базиса из шести функций ($s3p2d1$), который можно считать достаточно полным для точного описания электронной структуры исследуемой системы. Для описания обменно-корреляционной энергии был применен потенциал PBE в рамках обобщенного градиентного приближения (GGA) [39]. В ходе расчетов была использована модель системы Gr/CoSi/CoSi₂/Gr, содержащая три блока Si-Co-Si, один блок Co-Si на верхней стороне слэба, покрытого с двух сторон слоями графена размерностью 6×6 по отношению к его элементарной ячейке. При осуществлении цикла самосогласованного поля использовалась дискретная сетка из k точек размером $2 \times 2 \times 1$. Приведение зонной структуры суперячейки к первой зоне Бриллюэна графена было выполнено в соответствии со статьей [40]. Структурная оптимизация была выполнена с использованием метода полного потенциала (FP) присоединенных плоских волн с включени-

ем локальных орбиталей (APW + lo), реализованного в программном коде WIEN2k [41]. Параметр, определяющий точность вычислений в рамках метода APW + lo, RMT × K_{max} был выбран равным 3.0, где RMT — это радиус наименьшей атомной сферы и K_{max} — граница отсечки для базиса плоских волн. Радиусы атомных сфер были выбраны равными $1.69a_0$ для кремния, $1.30a_0$ для углерода и $2.29 a_0$ для кобальта, где a_0 — радиус Бора. Положения атомов в каждой элементарной ячейке оптимизировались в скалярном релятивистском приближении до тех пор, пока силы на каждом атоме не стали меньше $2 \text{ мРи}/a_0$ ($6 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}/\text{Å}$). Расчеты химического сдвига Si2p уровня для систем CoSi и CoSi₂ были выполнены с использованием суперячеек размерностью $2 \times 2 \times 2$ и экспериментальной постоянной ячейки CoSi₂, равной 5.356 Å [42]. Применение подхода суперячейки обусловлено необходимостью предотвращения взаимодействия электронных вакансий между собой. Кроме того, в расчетах с вакансией было применено наложение фонового отрицательного заряда, обеспечивающего нейтральность системы с дыркой. Измерения с помощью просвечивающей электронной микроскопии проводились с использованием микроскопа Zeiss Libra 200FE в МРЦ «Нанотехнологии» Научного парка СПбГУ. Подготовка ламели проводилась в сканирующем электронном микроскопе со сфокусированным ионным пучком Zeiss Auriga (FIB-SEM). Аморфный пассивирующий слой PtC был нанесен с целью предотвращения повреждения поверхности при изготовлении ламели.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе было проведено экспериментальное изучение процессов формирования буферного слоя углерода на монокристалле SiC (0001) и его последующей интеркаляции атомами кобальта. С помощью метода дифракции медленных электронов было показано, что прогрев монокристалла SiC до температуры 1150°C в условиях сверхвысокого вакуума является эффективной методикой для получения буферного слоя углерода. С помощью измерения и анализа рентгеновских фотоэлектронных спектров мы изучили эволюцию системы при интеркаляции атомов кобальта, а также предположили возможное формирование стехиометрических сплавов силицидов кобальта. Изучение морфологии с помощью атомно-силовой микроскопии показало, что полученная система характеризуется ступенчатой

структурой, с размещенными на ней треугольными кластерами. С помощью измерений спектроскопии комбинационного рассеяния света вместе с анализом фотоэлектронных спектров мы сделали вывод о возможной стехиометрии данных кластеров. Измерение фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением продемонстрировало наличие конуса Дирака вблизи уровня Ферми, что подтверждает превращение буферного слоя углерода в свободный графен в процессе интеркаляции атомов кобальта. И, наконец, были проведены *ab initio*-расчеты зонной структуры графена на предполагаемых стехиометриях силицидов кобальта.

Финансирование. Работа была выполнена в рамках финансовой поддержки Министерства науки и высшего образования РФ (грант № 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024)).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. K. Geim and K. S. Novoselov, *Nature Mater.* **6**, 183 (2007).
2. Shanshan Chen, Qingzhi Wu, Columbia Mishra et al., *Nature Mater.* **11**, 203 (2012).
3. Frank Schwierz, *Nature Nanotech.* **5**, 487 (2010).
4. Wei Han, Roland K. Kawakami, Martin Gmitra et al., *Nature Nanotech.* **9**, 794 (2014).
5. Guenther Ruhl, Sebastian Wittmann, Matthias Koenig, et al., *Beilstein J. Nanotechnol.* **8**, 1056 (2017).
6. A. G. Rybkin, A. A. Rybkina, M. M. Otrokov et al., *Nano Lett.* **18**, 3 (2018).
7. S. Ghosh, I. Calizo, D. Teweldebrhan et al., *Appl. Phys. Lett.* **92**, 151911 (2008).
8. K. V. Emtsev, F. Speck, Th. Seyller et al., *Phys. Rev. B* **77**, 155303 (2008).
9. Yan Han, Jian-Guo Wan, Gui-Xian Ge et al., *Sci. Rep.* **5**, 16843 (2015).
10. N. Mishra, J. Boeckl, N. Motta, and F. Iacopi, *Phys. Stat. Sol. (a)* **213**, 9 (2016).
11. J. B. Hannon, M. Copel, and R. M. Tromp, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 166101 (2011).
12. C. Riedl, C. Coletti, and U. Starke, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43**, 37 (2010).
13. K. Yagyu, T. Tajiri, A. Kohno et al., *J. Vacuum Society Jpn* **57**, 7 (2014).
14. S. Wolff, S. Roscher, F. Timmermann et al., *J. Vacuum Society Jpn* **57**, 7 (2014).
15. K. V. Emtsev, A. A. Zakharov, C. Coletti et al., *Phys. Rev. B* **84**, 125423 (2011).
16. J. A. Betancourt-Cantera, F. Sánchez-De Jesús, A. M. Bolarín-Miró et al., *J. Mater. Res. Techn.* **8**, 5 (2019).
17. Zhenyuan Ji, Xiaoping Shen, You Song et al., *Mater. Sci. Engin. B* **176**, 9 (2011).
18. Г. С. Гребенюк, И. А. Елисеев, С. П. Лебедев и др., *ФТТ* **62**, 3 (2020).
19. C. Riedl, C. Coletti, T. Iwasaki et al., *Phys. Rev. Lett.* **103**, 246804 (2009).
20. Dai Peng Xing, Hui Zhong Zeng, Wen Xu Zhang et al., *IOP Conf. Series: Mater. Sci. Engin.* **490** (2019).
21. Yu-Long Jiang, Xin-Ping Qu, Guo-Ping Ru et al., *Appl. Phys. A* **99**, 93 (2010).
22. Jin Zhao, *Surf. Sci. Spectra* **7**, 322 (2000).
23. А. А. Гогина, А. Г. Рыбкин, А. М. Шикин и др., *ЖЭТФ* **159**, 1028 (2021).
24. M. Garcia-Mendez, F. F. Castillonl, G. A. Hirata et al., *Appl. Surf. Sci.* **161**, 61 (2000).
25. S. Doğana, D. Johnstoneb, F. Yun, S. Sabuktagin et al., *Appl. Phys. Lett.* **85**, 1547 (2004).
26. E. Emorhokpor, T. Kerr, and I. Zwieback, *RS Online Proceed. Libr.* **815**, 136 (2004).
27. V. G. Kotlyar, A. Alekseev, A. Olyanich et al., *Chem. Phys. Lett.* **372**, 1 (2003).
28. Ji Eun Lee, Gwanghyun Ahn, Jihye Shim et al., *Nature Commun.* **3**, 1024 (2012).
29. I. A. Eliseyev, V. Yu. Davydov, A. N. Smirnov et al., *Semiconductors* **53**, 1904 (2019).
30. Feng-ming Liu, Bin Rena, Yu-xiong Jianga et al., *Chem. Phys. Lett.* **372**, 1 (2003).
31. D. Yu. Usachov, A. V. Fedorov, O. Yu. Vilkov et al., *Phys. Rev. B* **97**, 085132 (2018).
32. S. Y. Zhou, D. A. Siegel, A. V. Fedorov et al., *Phys. Rev. Lett.* **101**, 086402 (2008).
33. Z. J. Pan, L. T. Zhanga, and J. S. Wu, *J. Appl. Phys.* **101**, 033715 (2007).
34. C. Pirri, J. C. Peruchetti, G. Gewinner et al., *Sol. St. Commun.* **57**, 5 (1986).
35. P. S. Bagus, *Phys. Rev. A* **639**, 1396 (1965).

36. N. P. Bellafont, P. S. Bagus, and F. Illas, *J. Chem. Phys.* **142**, 21 (2015).
37. T. Ozaki, *Phys. Rev. B* **67**, 155108 (2003).
38. T. Ozaki and H. Kino, *Phys. Rev. B* **69**, 195113 (2004).
39. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerho, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1396 (1997).
40. Chi-Cheng Lee, Yukiko Yamada-Takamura, and Taisuke Ozaki, *J. Phys.: Condens. Matter* **25**, 34 (2013).
41. Peter Blaha, Karlheinz Schwarz, and Fabien Tran, *J. Chem. Phys.* **152**, 074101 (2020).
42. P. Villars and K. Cenzual, https://materials.springer.com/isp/crystallographic/docs/sd_0452326.

НОВЫЙ КЛАСС ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ВОДОРОДЕ И ДЕЙТЕРИИ ПРИ НАЛИЧИИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ ИОНИЗАЦИИ И ДИССОЦИАЦИИ

А. Л. Хомкин^{*}, А. С. Шумихин^{**}

*Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 12 августа 2021 г.,
после переработки 9 октября 2021 г.
Принята к публикации 11 октября 2021 г.

Рассчитана ударная адиабата Пуассона (изоэнтропа) дейтерия в районе скачка плотности, зафиксированного в эксперименте. Авторы эксперимента связывают этот скачок с фазовым переходом. Отличительной особенностью расчетной модели является учет коллективной энергии связи атомов (когезии) и исключенного объема. Результаты расчета демонстрируют наличие фазового перехода и скачка плотности на изоэнтропе. Аналогичный фазовый переход — диссоциативный фазовый переход — ранее обнаружен при расчете ударной адиабаты Гюгонио для дейтерия. Выдвинута гипотеза о существовании нового класса фазовых переходов — диссоциативного и плазменного — с одинаковой топологией фазовых характеристик. Впервые этот тип фазовых переходов был рассмотрен Норманом и Старостиным [12, 13].

DOI: 10.31857/S0044451022020092

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследования свойств сжатого водорода, находящегося в конденсированном состоянии, ведутся давно и широким фронтом. При температурах ниже 1000 К измерена кривая плавления твердого молекулярного водорода и зафиксированы структурные фазовые переходы [1]. Основные усилия были направлены на поиск области существования металлического водорода. Эксперименты, в основном статические, были выполнены на алмазных наковальнях [2].

Закономерности сжатия дейтерия актуальны и в связи с проблемой управляемого термоядерного синтеза (УТС). В разных лабораториях ударно-волновыми методами были выполнены измерения ударной адиабаты Гюгонио (далее просто «адиабаты») для дейтерия [3–6]. Рост температуры при сжатии выявил ряд новых проблем. Среди них закономерности процессов диссоциации и ионизации в плотном дейтерии (водороде).

Уже первые эксперименты по динамическому сжатию дейтерия, выполненные в 90-х годах, сразу привлекли внимание полученными результатами. В работе [3] на ударной адиабате была зафиксирована область «аномального» сжатия дейтерия, объяснить существование которой долго пытались многочисленные научные группы [7]. А вот в других работах [4–6] таких аномальных сжатий зафиксировано не было. В результате исследователи разделились на две неравные группы: группу, считающую результаты эксперимента [3] и эффект аномальной сжимаемости достоверными, и группу, считающую данные эксперимента [3] ошибочными, а эффект аномального сжатия не существующим. Первая группа на сегодня составляет меньшинство и, тем не менее, авторы, приняв участие в обсуждении этой проблемы [8], приняли результаты эксперимента [3] как достоверные. Была предложена [8] физическая модель, качественно описывающая эффект аномального сжатия, в ней было рассмотрено существование необычного фазового перехода, названного авторами диссоциативным фазовым переходом (ДФП). В использованной модели рассмотрена неидеальная смесь диссоциирующего молекулярного дейтерия без процессов ионизации. Учтена ограниченная сжимаемость смеси в приближении Карнахана – Старлинга и коге-

* E-mail: alhomkin@mail.ru

** E-mail: shum_ac@mail.ru

зионное (коллективное, квантовое) притяжение свободных атомов. Модель приводила к существованию фазового перехода со скачком степени диссоциации в районе аномалии адиабаты и к бинодали, отличной от бинодали Ван дер Ваальса (ВдВ) [9]. Скажем прямо, предложенная модель, которая связывала эффект аномальной сжимаемости с существованием нового фазового перехода (ДФП), не убедила научную общественность.

Появление работы Фортова с соавторами [10] вновь оживило дискуссию о фазовых переходах в водороде (дейтерии). Была измерена ударная адиабата Пуассона (далее изоэнтропа) дейтерия и обнаружена аномалия, похожая на скачок плотности, которую авторы работы [10] назвали фазовым переходом. Совсем недавно вышла работа Мочалова с соавторами [11], где исследуется смесь дейтерия и гелия, а также измерены дополнительные точки на изоэнтропе для чистого дейтерия при сверхвысоких давлениях. Существование фазового перехода подтвердилось, при этом основное внимание в работе [11] было уделено эффекту подавления наблюдаемого скачка плотности при добавлении гелия.

Для объяснения первых экспериментов [10] привлекались две принципиально различные модели: модель плазменного фазового перехода (ПФП), предложенная Норманом и Старостиным [12, 13] и ведущая к скачку степени ионизации, и численная модель, описывающая диссоциацию молекулярного водорода и превращение его в водород атомарный при сжатии [14], но без заявки бинодали возможного фазового перехода. Обе модели указывали на скачок плотности в районе экспериментально наблюдаемого. Обращает на себя внимание тот факт, что для объяснения эксперимента в области скачка плотности использовались физические модели, основанные на совершенно различных физических эффектах: аномальной ионизации, свойственной ПФП, и диссоциации при сжатии [14]. В работе [11] используется известная модель SAHA и результаты *ab initio* расчетов. Отмечается наличие процессов диссоциации и процессов ионизации, хотя получаемые температуры в области предполагаемого перехода недостаточны для существенной ионизации. Для ожидаемого фазового перехода предложено обобщающее название: диссоциативно-ионизационный фазовый переход [11]. О бинодали нового фазового перехода не сообщается. Одним из аргументов в пользу ПФП были данные, полученные независимо Терновым с сотрудниками [15] для водорода, где фиксировался рост проводимости при сжатии. Проводимость в обсуждаемых нами

экспериментах [10, 11] не измерялась. Заметим, что при обсуждении результатов [15] возможное влияние процессов «холодной» ионизации [16, 17] на проводимость водорода [15], не рассматривалось.

Несколько слов о ПФП, который является одним из главных претендентов на объяснение полученных аномалий на изоэнтропе дейтерия и свойства которого понадобятся нам в дальнейшем при обсуждении полученных результатов. Гипотеза о существовании ПФП была выдвинута Норманом и Старостиным пятьдесят лет назад [12, 13]. Ситуация вокруг проблемы менялась радикально: от утверждения, что такой переход зафиксирован, до утверждения, что такого перехода нет. Трудность при формулировке четкого ответа была обусловлена, в частности, тем обстоятельством, что его существование ожидалось в плазме плотной (иногда даже говорят о плазме экстремальных параметров), создать которую непросто. Экспериментальные свидетельства существования перехода были в основном косвенные, таковыми были и результаты *ab initio* расчетов [18]. Тем не менее свойства ПФП на модельном уровне были исследованы достаточно подробно и качественно еще в пионерских работах [12, 13], а затем и в более поздних [19, 20]. Отметим ряд свойств модели ПФП, обнаруженных на ранних этапах в работе [13] и свойственных только ему.

1. Переход происходит в реагирующей смеси атомов и свободных зарядов. Кривая ионизационно-го равновесия (зависимость концентрации атомов от концентрации свободных зарядов) демонстрирует необычное (волнообразное) [13] поведение, допускающее сосуществование состояний с различной степенью ионизации (рис. 1а).

2. Околокритическая изотерма, качественно построенная авторами работы [13], имела необычное (возвратное) поведение, свидетельствующее о существовании метастабильных состояний (рис. 1б) в районе перехода, в отличие от околокритических волнообразных изотерм ВдВ [9].

3. Элементы бинодали ПФП рассмотрены в работе [13]. Зависимость критического давления от температуры рассчитана для атомарной плазмы с ПФП в работе [19]. Критическое давление падало с ростом температуры, что противоречило аналогичной зависимости для классического перехода ВдВ (рис. 2). Исследования в работе [20] выполнялись для плазмы инертных газов, где в области модельного поиска ПФП экспериментально зафиксирован не был [7]. Авторы работы [20], рассмотрев кварк-глю-

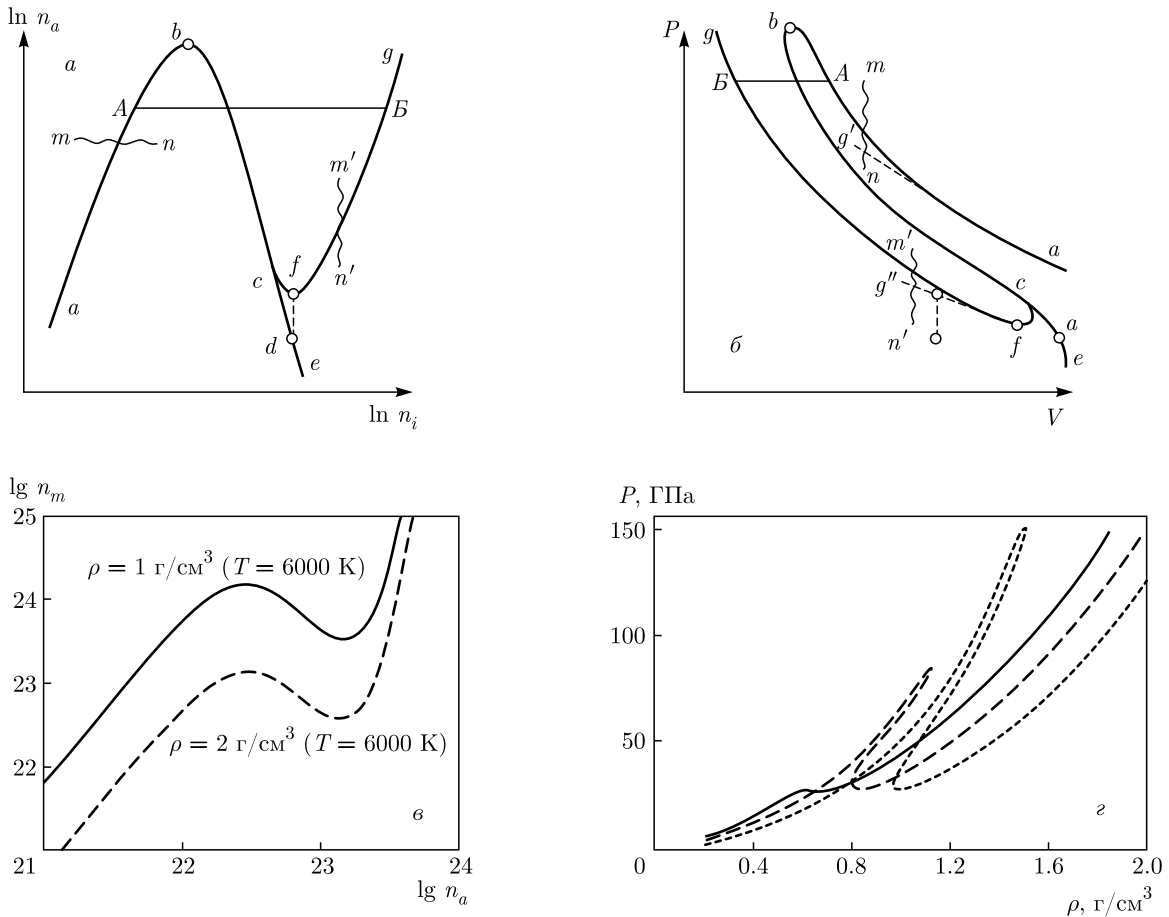


Рис. 1. Кривые ионизационного равновесия (а) и критические изотермы (б) для ПФП (оба рисунка из обзора [13]). Кривая диссоциативного равновесия (в) и околокритические изотермы (з) для ДФП (в — расчет, з — из работы [8])

онную плазму дополнительно к плазме инертных газов, назвали переход в двух последних случаях энтропийным.

В настоящей работе рассчитана изоэнтропа дейтерия с использованием модели с ДФП [8]. Следует заметить, что предварительные результаты таких расчетов были сообщены на ежегодной Сессии по неидеальной плазме под председательством ныне покойного академика В. Е. Фортова еще в 2013 году. Производственная необходимость вынудила нас прервать эту работу, хотя полученные результаты вселяли оптимизм. Итак, мы используем модель молекулярно-атомарного дейтерия с ДФП, предложенную ранее [8] для описания эффекта аномального сжатия дейтерия на адиабате, для описания скачка плотности на изоэнтропе [10, 11]. Тем самым мы выдвигаем гипотезу о существовании ДФП и связанных с ним аномалий как на адиабате, так и на изо-

энтропе дейтерия (водорода). Мы также покажем, что обнаруженный нами ДФП и предсказанный в работе [13] ПФП относятся к одному классу новых фазовых переходов со свойственными только этим переходам бинадалью, околокритическими изотермами и кривыми равновесия химических реакций. Можно утверждать, что предсказание ПФП [13], в определенном смысле, привело к предсказанию нового класса фазовых переходов (ПФП и ДФП), одна из модификаций которого (ДФП), возможно, и была обнаружена экспериментально в дейтерии.

Структура работы следующая. В разд. 2 изложены основные соотношения атомарно-молекулярной модели неидеального водорода (дейтерия), которые будут использованы в работе для расчета изоэнтропы. Далее рассмотрены результаты расчетов при варьировании некоторых (размер атома дейтерия) свободных параметров. В разд. 3 приведены уравне-

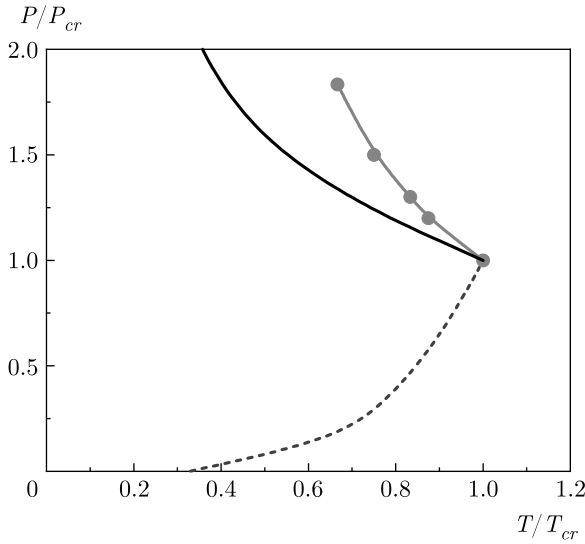


Рис. 2. (В цвете онлайн) Зависимость давления от температуры в приведенных координатах: штриховая кривая — ВдВ; красная кривая с кружками — ДФП [8]; сплошная черная кривая — ПФП [19]

ния диссоциативного и ионизационного равновесий для моделей ДФП и ПФП, а также их изотермы и бинодали для установления их топологического подобия. В Заключение представлены выводы по работе.

2. ХИМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АТОМАРНО-МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА (ДЕЙТЕРИЯ) С ДФП

Свободная энергия диссоциирующей атомарно-молекулярной смеси N_m молекул и N_a атомов, находящихся в объеме V при температуре T , предложена нами ранее [8] и имеет вид

$$F = -N_a k_B T \ln \left(\frac{eV g_a}{N_a \lambda_a^3} \right) - N_m k_B T \ln \left(\frac{eV g_m \Sigma_m}{N_m \lambda_m^3} \right) + (N_a + N_m) k_B T \frac{4\eta - 3\eta^2}{(1 - \eta)^2} + \frac{1}{2} N_a E_{coh}(y), \quad (1)$$

где $\lambda_{a(m)} = 2\pi\hbar^2/m_{a(m)}k_B T$ — тепловая длина волны атома (молекулы), $g_{a(m)}$ — их статистические веса, Σ_m — статистическая сумма молекулы, k_B — постоянная Больцмана, $E_{coh}(y)$ — коллективная энергия связи в плотном атомарном водороде как функ-

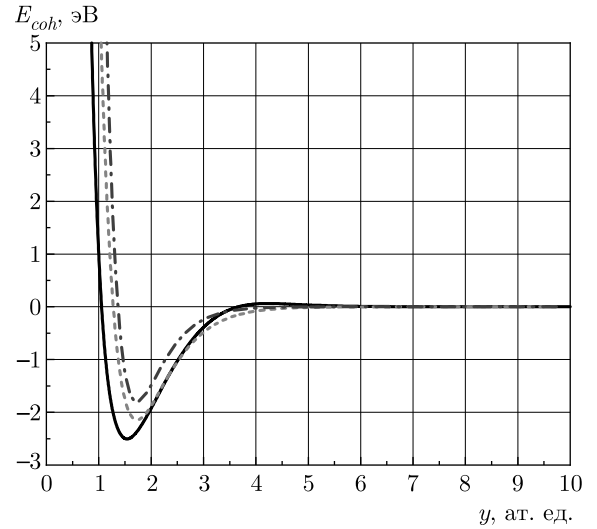


Рис. 3. Когезионная энергия в зависимости от радиуса ячейки Вигнера–Зейтца. Сплошная линия — расчет по Бардину [8]; штриховая кривая — константы UBER из LDA, штрихпунктирная кривая — константы из GGA [23]

ция безразмерного радиуса ячейки Вигнера–Зейтца $R_a = (3/4\pi n_a)^{1/3}$ в боровских радиусах, $y = R_a/a_0$,

$$\eta = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{N_a}{V} R_a^3 + \frac{N_m}{V} R_m^3 \right)$$

— суммарный параметр упаковки, выраженный через радиусы твердых сфер атомов (R_a) и молекул (R_m). Первые три члена описывают смесь атомов и молекул в приближении исключенного объема Карнахана–Старлинга для смеси твердых шаров, а последний, четвертый, член — энергию коллективного (когезионного) взаимодействия атомов.

В работе [8] для когезии используется выражение, рассчитанное для водорода на основе теории Бардина [21]. В настоящей работе для когезии используется универсальная функция UBER [22]:

$$E_{coh}(y) = E_{UBER}(\Delta E, y_0, l_0, y) = \Delta E(1 + a^*(y)) \exp[-a^*(y)],$$

где $a^*(y) = (y - y_0)/l_0$ с параметрами UBER [22, 23], рассчитанными в приближении «атом в желе» (local density approximation, LDA), $y_0 = 1.72$ ат. ед., $l_0 = 0.45$ ат. ед., $\Delta E = 2.16$ эВ. Возможен расчет необходимых параметров и методом GGA (grand gradient approximation).

На рис. 3 сравниваются выражения для когезии, полученные разными методами. Видно, что когезия, рассчитанная по теории Бардина [21] для решетки атомов, близка к таковой для атомов, погруженных

в электронное желе (LDA, GGA) [23]. Для наших вычислений мы выбрали вариант с параметрами, рассчитанными методом LDA просто потому, что он лежит между двумя другими, убедившись в тестовых расчетах в близости вариантов с параметрами, полученными методами LDA и GGA.

2.1. Уравнение состояния. Энтропия

Используя известные термодинамические соотношения, можно получить выражения для давления P , химических потенциалов атомов μ_a и молекул μ_m , а также энтропии:

$$P = k_B T \left(\frac{N_a + N_m}{V} \right) \left(1 + \frac{4\eta - 2\eta^2}{(1 - \eta)^3} \right) - \frac{1}{2} \frac{N_a}{V} \frac{y}{3} \frac{\partial E_{coh}(y)}{\partial y}. \quad (2)$$

Для химических потенциалов молекулы и атома в температурных единицах ($\beta = 1/k_B T$) имеем

$$\beta \mu_m = \beta \mu_m^0 + \beta \Delta \mu_m, \quad (3)$$

$$\beta \mu_a = \beta \mu_a^0 + \beta \Delta \mu_a. \quad (4)$$

Здесь

$$\beta \mu_{a,m}^0 = -\ln \left(\frac{V g_{a,m} \Sigma_{a,m}}{N_{a,m} \lambda_{a,m}^3} \right), \quad (5)$$

$$\beta \Delta \mu_m = \frac{4\eta - 3\eta^2}{(1 - \eta)^2} + \frac{N_a + N_m}{V} \frac{4\pi}{3} R_m^3 \frac{4 - 2\eta}{(1 - \eta)^3}, \quad (6)$$

$$\beta \Delta \mu_a = \frac{4\eta - 3\eta^2}{(1 - \eta)^2} + \frac{N_a + N_m}{V} \frac{4\pi}{3} R_a^3 \frac{4 - 2\eta}{(1 - \eta)^3} + \frac{\beta E_{coh}(y)}{2} \left(1 - \frac{y}{3E_{coh}} \frac{\partial E_{coh}(y)}{\partial y} \right). \quad (7)$$

Для энтропии имеем

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}, \quad (8)$$

$$S = S_{id}^a + S_{id}^m + (N_a + N_m) k_B \frac{4\eta - 3\eta^2}{(1 - \eta)^2}, \quad (9)$$

где S_{id}^a и S_{id}^m — энтропии идеальных газов атомов и молекул [9]. Вклад когезионного взаимодействия не входит в выражение для энтропии, поскольку он не зависит от температуры.

2.2. Уравнения диссоциативного равновесия

Используя соотношение $\mu_m = 2\mu_a$, получим уравнение диссоциативного равновесия:

$$n_m = n_a^2 \lambda_a^3 \frac{g_m}{g_a^2} 2\sqrt{2} \Sigma_m \exp(-\beta \Delta \mu_m + 2\beta \Delta \mu_a), \quad (10)$$

где

$$\Sigma_m = \exp \left(\frac{D_m}{k_B T} \right) \sigma(T), \quad (11)$$

$D_m = 4.478$ эВ — энергия диссоциации молекулы водорода, $\sigma(T)$ — внутренняя статистическая сумма (колебательная и вращательная) молекулы. Для водорода

$$\sigma(T) = \frac{T}{87.58} \frac{1}{1 - \exp(6338.2/T)}. \quad (12)$$

Достаточно подробно процедура решения уравнения диссоциативного равновесия изложена в работе [8]. В результате определяется степень диссоциативного равновесия $\gamma = n_a/n$, где $n = n_a + 2n_m$ — полная плотность ядер водорода, соответственно, $n_m/n = (1 - \gamma)/2$. График зависимости $n_m(n_a)$, рассчитанной в соответствии с выражением (10) для изотермы $T = 6000$ К, представлен выше на рис. 1в. Виден волнообразный характер этой зависимости, напоминающий таковую для ПФП (см. выше рис. 1а). При расчете изоэнтропии мы несколько модифицировали первоначальный алгоритм решения. Мы ввели в качестве внешних параметров размеры твердых сердцевин молекул R_m и атомов R_a . Для энергии когезионной связи атомов водорода мы использовали данные расчетов методом функционала плотности [23].

2.3. Расчет изоэнтропии

На рис. 4, 5 представлены результаты расчета изоэнтропии дейтерия при различных комбинациях размеров молекул и атомов.

В эксперименте энтропия меняется в интервале 22–40 Дж/г·К, что соответствует безразмерной энтропии в диапазоне 5.5–10. Нами для всех расчетов использована величина безразмерной энтропии, равная 7. Отношение радиуса твердой сердцевины молекулы к радиусу атома в наших расчетах изменялось в диапазоне $R_m/R_a = 1.67$ –1.9. При дальнейшем развитии модели, видимо, следует учесть зависимость радиуса твердой сердцевины атома от плотности.

Для достаточно простой модели, тем более уже апробированной на ударной адиабате [8], согласие с экспериментом можно считать удовлетворительным. Главный результат нашей серии модельных расчетов — это наличие ДФП на изоэнтропе с четко фиксируемым скачком плотности.

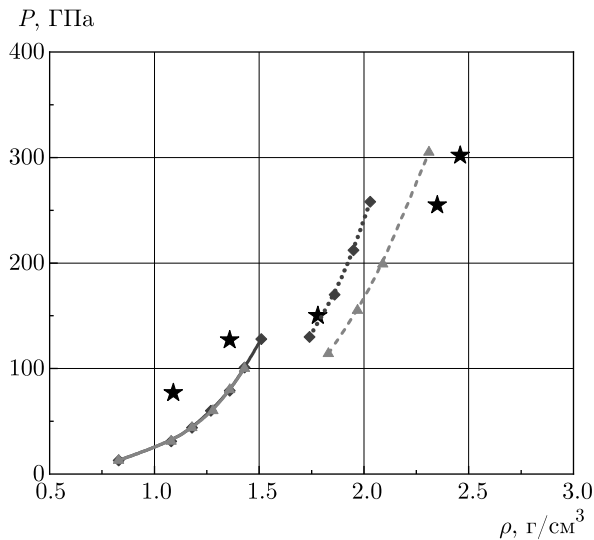


Рис. 4. (В цвете онлайн) Изоэнтропа дейтерия (безразмерная энтропия $S = 7$). Звездочки — эксперимент [10]. Наши расчеты для радиуса твердой сердцевины молекулы (в боровских радиусах) $R_m = 1.4$: синяя и красная сплошные кривые отвечают молекулярной фазе для отношений радиуса молекулы к радиусу атома соответственно $R_m/R_a = 1.67$ и $R_m/R_a = 1.86$; синяя пунктирная и красная штриховая кривые — атомарной фазе соответственно для $R_m/R_a = 1.67$ и $R_m/R_a = 1.86$

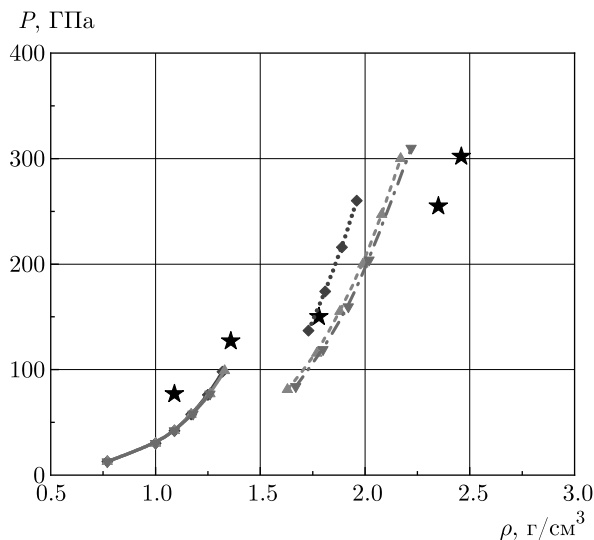


Рис. 5. (В цвете онлайн) Изоэнтропа дейтерия (безразмерная энтропия $S = 7$). Звездочки — эксперимент [10]. Наши расчеты для радиуса твердой сердцевины молекулы (в боровских радиусах) $R_m = 1.45$: синяя, красная и сиреневая сплошные кривые отвечают молекулярной фазе для отношений радиуса молекулы к радиусу атома соответственно $R_m/R_a = 1.7$, 1.86 , 1.9 ; синяя пунктирная, красная штриховая и сиреневая штрихпунктирная кривые — атомарной фазе соответственно для $R_m/R_a = 1.7$, 1.86 , 1.9

3. ДИССОЦИАТИВНЫЙ И ПЛАЗМЕННЫЙ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ — ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ЕДИНОГО, НОВОГО ТИПА

3.1. Уравнения ионизационного равновесия в химической модели атомарной плазмы с ПФП

Как уже отмечалось во Введении, характерной особенностью ДФП и ПФП является волнообразный характер кривых диссоциативного и ионизационного равновесия. Для ДФП эта кривая определяется соотношением (10), а для ПФП мы воспользуемся соотношениями из работы [13].

В работах [12, 13] рассмотрена атомарная трехкомпонентная плазма, состоящая из электронов, ионов и атомов с концентрациями соответственно n_e , n_i и n_a . Концентрация атомов связана с концентрациями свободных зарядов формулой Саха, которую, следуя [13], запишем в виде

$$n_a = n_i n_e \lambda_e^3 \frac{g_a}{2g_i} \exp[\beta I - \varphi(\Gamma_D, \beta R_y)], \quad (13)$$

где g_a и g_i — статистические веса атома и иона, I и λ_e — потенциал ионизации атома и тепловая длина волны электрона. Функция $\varphi(\Gamma_D, \beta R_y)$ описывает снижение потенциала ионизации, вызванное эффектами неидеальности свободных зарядов (дебаевское притяжение) и эффектами вырождения (квантовое отталкивание).

График зависимости $n_a(n_i)$, заимствованный из работы [13], представлен выше на рис. 1а. Соответствующая зависимость $n_m(n_a)$ для ДФП показана на рис. 1б. Хорошо видна волнообразность кривых, их топологическая похожесть. Обращаем внимание на наличие двухзначных решений $n_i(n_a)$ для ПФП и $n_a(n_m)$ для ДФП. Рассмотренные зависимости и приводят в дальнейшем к фазовым переходам.

3.2. Изотермы и бинодали ДФП и ПФП

Выше показаны изотермы ПФП (рис. 1б) и ДФП (рис. 1г). Для ПФП качественный, но верный график изотермы как функции объема взят из работы [13], а для ДФП приведены рассчитанные нами изотермы как функции плотности [8] для различных температур. Хорошо видна топологическая похожесть изотерм. Они явно принадлежат к одному классу явлений. Отметим, что для плазмы инертных газов с ПФП [20] изотермы также подобны изображенным на рис. 1б,г.

На приведенный выше рис. 2 мы дополнительно к данным из работы [8] нанесли элемент бинадали ПФП, рассчитанный в работе [19] и приведенный к переменным, предложенным в [8]. Нанесенная бинадаль ПФП только подтверждает обсуждаемое нами топологическое подобие ПФП и ДФП.

3.3. Новый тип фазовых переходов

Выводы, к которым мы пришли, необычны. Мы не считаем себя сторонниками ПФП [24], и во многих своих работах мы предлагали альтернативные варианты интерпретации полученных «свидетельств» его существования. Следует признать, однако, весьма высокий уровень проработки многочисленных проявлений возможного существования ПФП, выполненный авторами работы [13]. Столкнувшись в работах по дейтерию с совершенно иной системой — атомарно-молекулярной реагирующей смесью — мы с удивлением обнаружили «подобие» многих характеристик, о которых мы рассказали в данной работе. Можно сказать, что, предсказав ПФП, существование которого пока дискутируется, авторы работы [13] одновременно заявили о существовании нового типа фазовых переходов, одна из модификаций которого (ДФП), возможно, обнаружена экспериментально. Предложенная в работе модель подтверждает существование фазового перехода нового типа (ДФП) на адиабатах дейтерия.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассчитана изоэнтропа дейтерия с использованием ранее предложенной модели неидеальной атомарно-молекулярной смеси. Отличительной особенностью модели является учет коллективной энергии связи атомов (когезии) и исключенного объема. Результаты расчета демонстрируют наличие фазового перехода и скачка плотности на изоэнтропе. Аналогичный фазовый переход — ДФП — имеет место и на адиабате Гюгонио для дейтерия [3].

Выдвинута гипотеза о существовании нового класса фазовых переходов (ПФП и ДФП) с одинаковой топологией фазовых характеристик, на существование одного из которых (ДФП) указывают данные ударно-волновых экспериментов [3,10]. Впервые этот тип фазовых переходов был рассмотрен Норманом и Старостиним [13].

ЛИТЕРАТУРА

1. E. Gregoryanz, A. F. Goncharov, K. Matsuishi et al., Phys. Rev. Lett. **90**, 175701 (2003).
2. P. Loubeyre, F. Occelli, and R. LeToullec, Nature **416**, 613 (2002).
3. L. B. Da Silva, P. Celliers, G. W. Collins et al., Phys. Rev. Lett. **78**, 483 (1997).
4. M. D. Knudson, D. L. Hanson, J. E. Bailey et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 225501 (2001).
5. N. C. Holmes, M. Ross, and W. J. Nellis, Phys. Rev. B **52**, 15835 (1995).
6. С. И. Белов, Г. В. Борисков, А. И. Быков и др., Письма в ЖЭТФ **76**, 508 (2002).
7. В. Е. Фортов, А. Г. Храпак, И. Т. Якубов, *Физика неидеальной плазмы*, Физматлит, Москва (2010).
8. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, ЖЭТФ **146**, 518 (2014).
9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, Москва (1976).
10. V. E. Fortov, R. I. Ilkaev, V. A. Arinin et al., Phys. Rev. Lett. **99**, 185001 (2007).
11. М. А. Мочалов, Р. И. Ильяев, В. Е. Фортов и др., ЖЭТФ **159**, 1118 (2021).
12. Г. Э. Норман, А. Н. Старостин, ТВТ **6**, 410 (1968).
13. Г. Э. Норман, А. Н. Старостин, ТВТ **8**, 413 (1970).
14. S. Scandolo, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **100**, 3051 (2003).
15. V. Y. Ternovoi, A. S. Filimonov, V. E. Fortov et al., Physica B **265**, 6 (1999).
16. A. L. Khomkin and A. S. Shumikhin, Contrib. Plasma Phys. **61**(10), e202100072 (2021); DOI: 0.1002/ctpp.202100072.
17. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, ЖЭТФ **155**, 869 (2019).
18. V. S. Filinov, M. Bonitz, V. E. Fortov et al., Contrib. Plasma Phys. **44**, 388 (2004).
19. W. Ebeling and W. Reichert, Phys. Lett. A **108**, 80 (1985).
20. I. L. Iosilevskiy, J. Phys.: Conf. Ser. **653**, 012077 (2015).
21. J. Bardeen, J. Chem. Phys. **6**, 367 (1938).
22. J. H. Rose, J. R. Smith, F. Guinea, and J. Ferrante, Phys. Rev. B **29**, 2963 (1984).
23. U. Yxklinten, J. Hartford, and T. Holmquist, Physica Scr. **55**, 499 (1997).
24. А. Л. Хомкин, А. С. Шумихин, Вестник ОИВТ РАН **4**, 4 (2020).

СПИН-ВОЛНОВЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ NiFe/Cu/IrMn С ВАРЬИРУЕМОЙ ТОЛЩИНОЙ РАЗДЕЛИТЕЛЬНОГО СЛОЯ Cu

М. В. Бахметьев ^a, В. А. Губанов ^b, А. В. Садовников ^b, Р. Б. Моргунов ^{a,c*}

^a *Институт проблем химической физики Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

^b *Саратовский национальный исследовательский университет
410012, Саратов, Россия*

^c *Тамбовский государственный технический университет
392000, Тамбов, Россия*

Поступила в редакцию 26 августа 2021 г.,
после переработки 26 августа 2021 г.
Принята к публикации 4 октября 2021 г.

В гетероструктурах NiFe/Cu/IrMn с варьируемой толщиной прослойки меди t_{Cu} исследованы спиновые волны методом мандельштам-бриллюэновской спектроскопии (BLS). Обнаружено перераспределение вкладов зерен различного размера, которое приводит к сдвигу кривых дисперсионных соотношений по частоте по мере изменения толщины прослойки Cu. Резонансные частоты стоксовой и антистоксовой линий при инверсии внешнего магнитного поля сдвигаются, и этот сдвиг, характеризующий величину обменного смещения, монотонно уменьшается с ростом t_{Cu} и полностью исчезает при образовании сплошного слоя меди $t_{Cu} > 1$ нм. С ростом толщины слоя меди гетероструктура становится более однородной, что приводит к ослаблению флуктуаций плотности энергии обменного взаимодействия между NiFe и IrMn и уменьшает ширину линий в спектрах BLS.

DOI: 10.31857/S0044451022020109

1. ВВЕДЕНИЕ

Многослойные гетероструктуры ферромагнетик (ФМ)–антиферромагнетик (АФМ) являются основой инженерии датчиков Холла [1], устройств магнитной памяти [2] и других приборов, в которых используется эффект обменного смещения. Сдвиг центра петли магнитного гистерезиса вдоль оси поля называется обменным смещением H_B и объясняется обменным взаимодействием между слоями ФМ и АФМ. Одним из информативных экспериментальных методов исследования обменного смещения является метод мандельштам-бриллюэновской спектроскопии (BLS), который чувствителен к поверхностным спиновым волнам, в том числе на интерфейсе ФМ/АФМ.

Исследования гетероструктур NiFe/АФМ методом BLS проводились во многих работах (например, [3–5]). В работе [3] при увеличении толщины слоя NiFe в гетероструктурах NiFe/NiO линии Стокса и анти-Стокса сдвигались по частоте. При этом с ростом толщины слоя NiFe уменьшались ширины этих линий, которые были на порядок больше ширины линии, наблюдаемой в одиночных слоях NiFe, приготовленных в тех же условиях. Это говорит о том, что параметры спектров BLS чувствительны к неоднородности интерфейса NiFe/АФМ. Авторы [3] объясняли уширение линий с помощью представлений о локальных флуктуациях обменной связи, вызванных неоднородностью интерфейса NiFe/NiO. При увеличении эффективной толщины ферромагнитного слоя роль этих флуктуаций маскируется доминирующим вкладом спиновых волн в совершенной части NiFe. Аналогичная убывающая зависимость ширины линии в спектре BLS от толщины ферромагнитного слоя NiFe наблюдалась в работе [4] в гетероструктурах NiFe/Co. Как будет показано далее,

* E-mail: morgunov2005@yandex.ru

в нашей работе качество интерфейса NiFe/Cu/IrMn зависит не от толщины ФМ- или АФМ-слоев, а от толщины спейсера. Это меняет подход к интерпретации обнаруженных в [3, 4] явлений и ставит в качестве одной из целей нашей работы анализ влияния диамагнитной прослойки (спейсера) на спектры BLS. Под эффективной толщиной спейсера здесь и далее мы понимаем толщину однородного слоя, который бы образовался из данного количества атомов, если бы они распределялись равномерно, т. е. величина t_{Cu} при ее малых значениях (когда нет полного покрытия) характеризует количество атомов меди, сгруппированных в островки между ФМ- и АФМ-слоями, а не реальную толщину идеализированного сплошного спейсера.

В работе [5] в гетероструктурах NiFe/IrMn метод BLS используется для исследования угловой зависимости резонансной частоты $\omega(\phi_H)$ спиновой волны при разных толщинах антиферромагнитного слоя IrMn. При увеличении внешнего магнитного поля, в котором записывались спектры BLS, угловая зависимость $\omega(\phi_H)$ смещалась в сторону больших частот. Авторы объясняли этот сдвиг тем, что оба слоя (ФМ и АФМ) были поликристаллическими и характеризовались распределениями по размерам зерен NiFe и IrMn. От размера зерен зависела как величина однонаправленной анизотропии зерен H_B , так и величина вращающейся анизотропии H_{RA} . С ростом магнитного поля баланс зеемановской энергии и упомянутых энергий анизотропии менялся так, что с помощью спектроскопии BLS начинали выявляться вклады все более крупных зерен, так что частота линии BLS соответственно возрастала. Таким образом, к настоящему времени известно, что одним из определяющих факторов спиновой динамики в гетероструктурах ФМ/АФМ, управляющих шириной линии ферромагнитного резонанса и BLS, является распределение зерен ферромагнетика и антиферромагнетика по размерам. При этом о влиянии толщины и свойств разделительного диамагнитного слоя НМ на спин-волновые процессы в структурах ФМ/НМ/АФМ известно сравнительно мало.

Дисперсионные соотношения (зависимости частоты максимума BLS от проекции волнового вектора света на плоскость образца) для тепловых спиновых волн исследовались в гетероструктурах NiFe/Cu/NiFe и Fe/Cr/Fe [6]. Была разработана теория, учитывающая различные типы взаимодействий между ферромагнитными слоями: магнитное дипольное взаимодействие, линейное, билинейное и биквадратичное обменные взаимодействия [6]. Кроме того, были учтены поверхностная, одноосная маг-

нитная анизотропия, возникающая на интерфейсе, а также объемная кубическая анизотропия в ферромагнетике. Было установлено, что параметр билинейного обмена сильно зависит от толщины спейсера, а параметр биквадратного обмена от толщины спейсера не зависит. В случае структур ФМ/НМ/АФМ к управляющим параметрам добавляется также величина однонаправленной анизотропии зерен H_B , величина вращающейся анизотропии H_{RA} . Эти параметры структурно чувствительные, т. е. они зависят от совершенства ферромагнитных слоев и качества интерфейса. При этом в поликристаллических образцах величина H_B и H_{RA} зависит от размера зерен и доли контакта между ними, от их взаимной ориентации, текстуры поликристаллического слоя [3–5, 7–9].

Цели данной работы заключались в установлении роли обменного смещения в формировании спектров BLS, а также в обнаружении изменений однонаправленной анизотропии с ростом эффективной толщины спейсерного слоя Cu, структура которого изменяется от отдельных островков до фрагментальных структур и полного покрытия медью интерфейса NiFe/Cu/IrMn на конечных стадиях напыления.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДИКА

В опытах использовались многослойные гетероструктуры Ta(5 нм)/NiFe(10 нм)/Cu(t_{Cu})/IrMn(10 нм)/Ta(5 нм). Эффективная толщина медного слоя t_{Cu} варьируется в диапазоне 0.08–5 нм. Образец без меди $t_{Cu} = 0$ является эталонным образцом. Коммерчески изготовленные гетероструктуры были напылены на подложках Si/SiO₂ методом магнетронного напыления на постоянном токе по методике, сходной с описанной в работах [10, 11].

Измерения спектров рассеяния света методом BLS выполнялись при комнатной температуре в геометрии Дэмона–Эшбаха с обратным рассеянием (рис. 1). Внешнее магнитное поле H направлено в плоскости образца размерами 5×5 мм² перпендикулярно плоскости падения света (рис. 1). В плоскости образца магнитное поле лежало в направлении, в котором поле обменного смещения, выявленное в независимых измерениях в СКВИД-магнетометре, было максимальным (т. е. в направлении поля обменного смещения). Запись спектров Манделштама–Бриллюэна проводилась в двух ориентациях внешнего магнитного поля $H = 3$ кЭ и $H = -3$ кЭ относи-

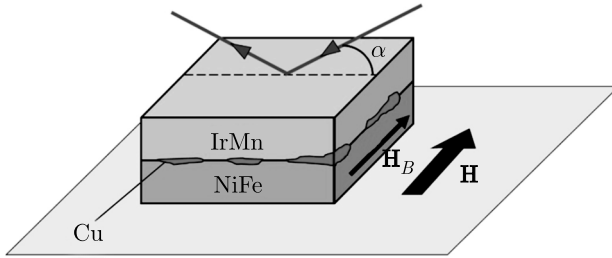


Рис. 1. Схема эксперимента при записи спектров рассеяния Мандельштама–Бриллюэна

тельно направления поля обменного смещения H_B в образце. Угол падения луча α составлял 15° относительно нормали к плоскости образца.

Если требовалось менять величину проекции волнового вектора на плоскость образца, то измерения дисперсионных соотношений $\omega(k)$ проводились при углах падения лазерного луча $\alpha = 10^\circ\text{--}45^\circ$ с шагом 5° (k — проекция волнового вектора света на плоскость образца вдоль оси x). Внешнее магнитное поле в этой серии экспериментов было направлено против направления поля обменного смещения H_B . Варьируемый угол падения света позволял получать величины проекции волнового вектора падающего света на поверхность образца $k = 40976\text{ см}^{-1}$, 61074 см^{-1} , 80708 см^{-1} , 99728 см^{-1} , 117990 см^{-1} , 135355 см^{-1} , 151691 см^{-1} и 166874 см^{-1} . В качестве источника света использовался лазерный луч с длиной волны 532 нм , генерируемый одночастотным лазером Excelsior (Spectra Physics) EXLSR-532-200-CDRH. Диаметр сфокусированного на поверхности образца лазерного пятна составлял 25 мкм . Мощность лазерного излучения составляла 20 мВт , что исключало нагрев образца и сколь-нибудь существенное изменение его температуры в процессе измерений. Глубина проникновения лазерного луча составляет $30\text{--}40\text{ нм}$ [12], что больше суммарной толщины всех слоев исследуемых гетероструктур.

Поле обменного смещения H_B определялось из петель магнитного гистерезиса, записанных при комнатной температуре с помощью СКВИД-магнитометра Quantum Design XL.

Изображения поперечного сечения образцов без меди и с медью толщиной $t_{\text{Cu}} = 0.83\text{ нм}$ (рис 3а,б) получались с помощью просвечивающего электронного микроскопа высокого разрешения JEOL (HR TEM) при ускоряющем напряжении 200 кВ .

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Зависимости частоты линии BLS от волнового вектора k спиновых волн (дисперсионные зависимости) для образцов с толщинами меди $t_{\text{Cu}} = 0$ (1), 0.5 нм (2), 1 нм (3), 2.5 нм (4) и 5 нм (5) представлены на рис. 2а. Дисперсионные зависимости являются симметричными по отношению к волновому числу k для всей серии образцов с медью. Видно, что с ростом толщины спейсера Cu наблюдается сдвиг дисперсионных кривых по частоте. Согласно геометрии эксперимента угол между приложенным магнитным полем и намагниченностью образца равен $\phi_H = 0$, а угол между намагниченностью ФМ-слоя и направлением одноосной анизотропии этого слоя равен $\phi_{FM} = 0$ (рис. 1). Угол между главной осью намагниченности слоя АФМ и направлением намагниченности ФМ, $\phi_{FM} = 0$. Тогда уравнение для частоты спиновой волны запишется в виде [5]

$$\left(\frac{\omega}{\gamma}\right)^2 = \left[H + H_U + H_{RA} + 2\pi M_S k t_{FM} + Dk^2 + \frac{H_W}{H_W/H_B + 1} \right] \left[H + 4\pi M_{eff} + H_U + H_{RA} - 2\pi M_S k t_{FM} + Dk^2 + \frac{H_W}{H_W/H_B + 1} \right], \quad (1)$$

где γ — гиромагнитное отношение (для NiFe $\gamma = 17.6\text{ ГГц/кЭ}$ [5]), H — приложенное магнитное поле, H_U — поле одноосной анизотропии, H_{RA} — поле вращающейся анизотропии, $M_S \approx 780\text{ ед. СГСМ/см}^3$ — намагниченность насыщения для NiFe [5], k — волновое число, t_{NiFe} — толщина пленки NiFe (10 нм), D — обменная жесткость $D \approx 2 \cdot 10^{-9}\text{ Э} \cdot \text{см}^2$ [6], H_W — поле доменной стенки, H_B — поле обменного смещения, M_{eff} — эффективная намагниченность, определяемая из формулы $4\pi M_{eff} = 4M_S - H_S$, где H_S — поле поверхностной анизотропии.

С помощью выражения (1) мы аппроксимировали дисперсионные соотношения $\omega_k(k)$ и определили параметры H_U , H_{RA} , H_B . На рис. 2б–г представлены зависимости поля обменного смещения H_B (б), поля вращающейся анизотропии H_{RA} (в), поля одноосной анизотропии H_U (г) от толщины медной прослойки. При этом значения намагниченности насыщения, обменной жесткости и эффективной намагниченности варьировались от образца к образцу в диапазонах $4\pi M_{eff} \approx 7.4\text{--}9.8\text{ кЭ}$, $D \approx 1 \cdot 10^{-9}\text{--}8 \cdot 10^{-9}\text{ Э} \cdot \text{см}^2$,

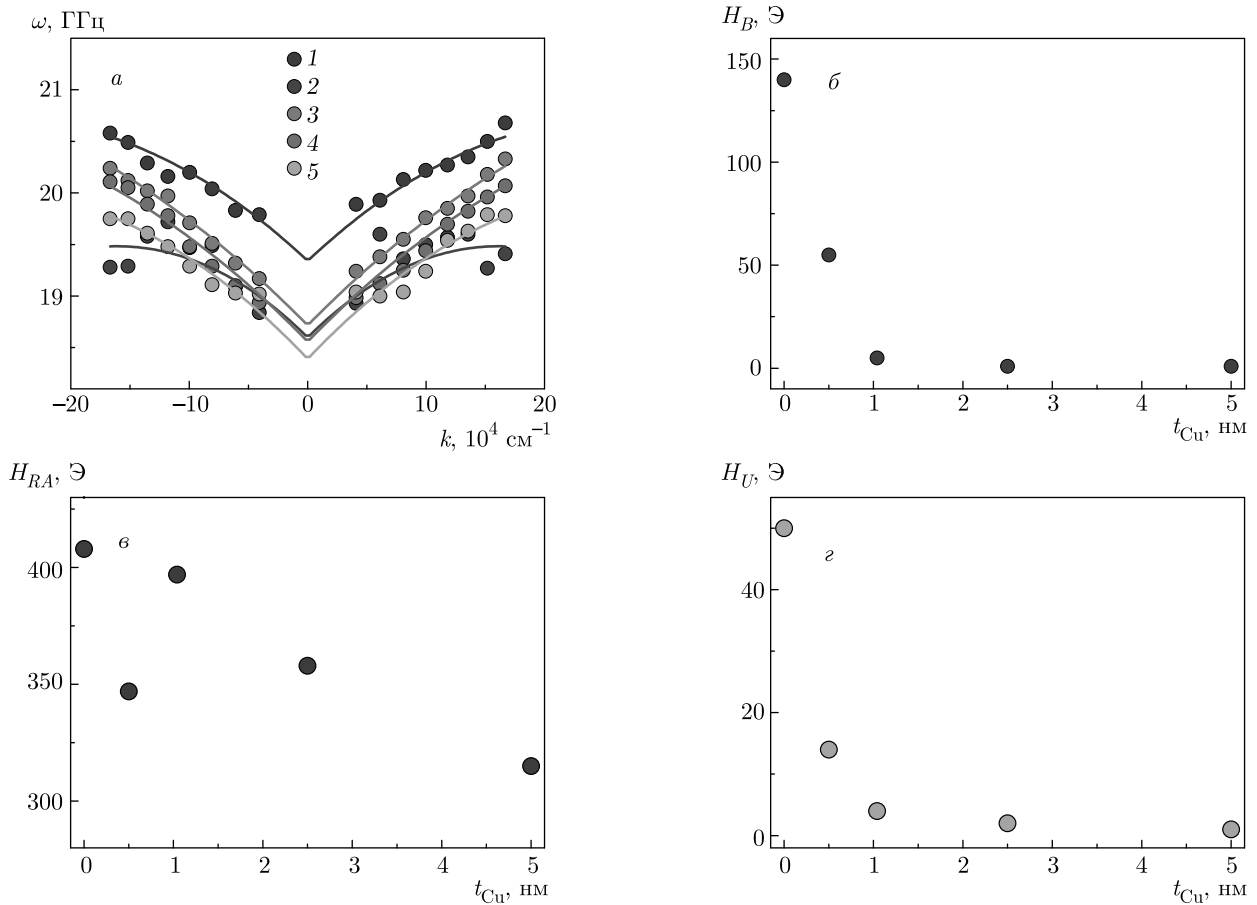


Рис. 2. Зависимость частоты пиков BLS от волнового числа k (а) для толщин меди $t_{Cu} = 0$ (1), 0.5 нм (2), 1 нм (3), 2.5 нм (4) и 5 нм (5). Зависимости поля обменного смещения H_B (б), поля вращающейся анизотропии H_{RA} (в), поля одноосной анизотропии H_U (г) от толщины медной прослойки

$M_S = 780\text{--}950$ ед. СГСМ/см³, что согласуется с литературными данными о возможных вариациях этих параметров [5, 6]. Поле доменной стенки принималось равным $H_W = 1$ кЭ, как это было определено для доменной стенки в аналогичной гетероструктуре NiFe/IrMn [13].

Поле вращающейся анизотропии можно представить как анизотропию, наведенную обменным смещением. Действие этого поля заключается в том, что интерфейсный слой, в дополнение к прочим видам анизотропии, обладает разными по величине барьерами переключения намагниченности в зависимости от направления внешнего поля. Эта неэквивалентность высоты барьера зависит от намагниченности самого интерфейсного слоя и, таким образом, регулируется внешним полем, следуя за его направлением. В литературе [5, 7–9] описаны вариации поля вращающейся анизотропии в зависимости от геометрии локального контакта зерен на границе

раздела NiFe/IrMn, т. е. от их размера и ориентации кристаллографических плоскостей IrMn и NiFe.

Согласно [5, 7–9], при этом имеется распределение зерен IrMn и NiFe по размеру. Крупные зерна с высокими анизотропией и барьером перемагничивания влияют на поле вращающейся анизотропии H_{RA} , а мелкие зерна не влияют на величину H_{RA} , так как они легко перемагничиваются во внешнем поле. И мелкие, и крупные зерна одинаково влияют на величину H_B . Таким образом, мы можем судить о влиянии крупных или мелких зерен IrMn и NiFe по значению определенных параметров H_{RA} и H_B из выражения (1).

Для анализа поликристаллической структуры слоев IrMn и NiFe были получены изображения ТЕМ поперечного сечения образцов без меди и с медью толщиной $t_{Cu} = 0.83$ нм (рис. 3а, б).

Видно, что слой IrMn и NiFe являются поликристаллическими и состоят из зерен, которые имеют

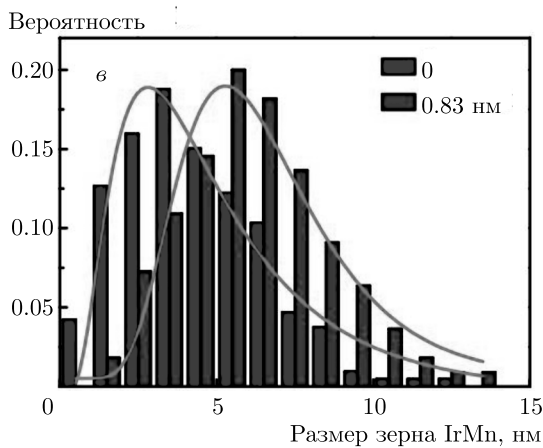
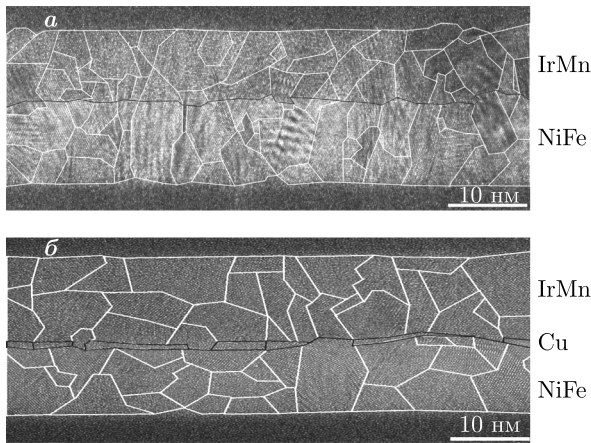


Рис. 3. ТЕМ-изображение образца без меди (а). ТЕМ-изображение образца с толщиной $t_{Cu} = 0.83$ нм (б). Распределения размеров зерен в слоях IrMn и NiFe (в). Сплошные линии — аппроксимация логнормальной функцией с параметрами, указанными в тексте

распределения по размеру. Эти распределения задают распределение площади контакта каждого зерна с другим слоем. Напыление атомов Cu не влияет на зерна NiFe, поскольку к моменту напыления слоя меди слой NiFe уже был сформирован напылением на слой Ta. Однако из-за того, что адгезия меди не равна адгезии NiFe, напыление меди способно изменить распределение зерен IrMn, поскольку этот слой напыляется на медную прослойку. Распределение зерен IrMn по линейным размерам, определяемым вдоль одного и того же направления, было оценено с помощью статистического анализа образцов без меди и с толщиной $t_{Cu} = 0.83$ нм. Гистограммы, построенные на основе 100–200 измерений, представлены на рис. 3в. Эти распределения хорошо описываются логнормальной функцией со средним

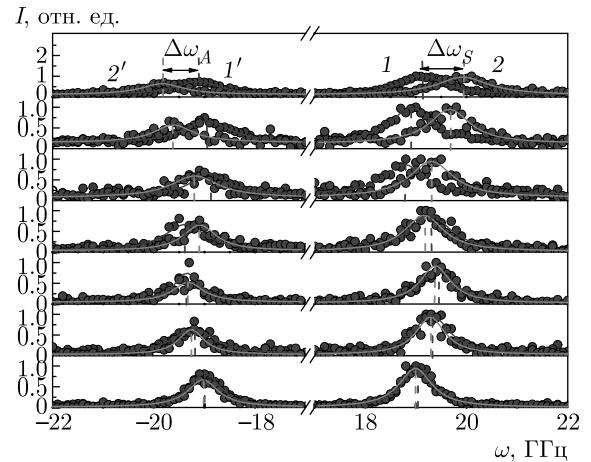


Рис. 4. Спектры Бриллюэна для образцов $t_{Cu} = 0$ (а), 0.08 нм (б), 0.25 нм (в), 0.5 нм (г), 1 нм (д), 2.5 нм (е) и 5 нм (ж) при угле падения лазерного луча $\alpha = 15^\circ$ ($k = 6.1 \cdot 10^4 \text{ см}^{-1}$). Пики Стокса (1) и анти-Стокса (1') соответствуют $H = 3$ кЭ, пики Стокса (2) и анти-Стокса (2') — $H = -3$ кЭ. Пунктир — смещение резонансных частот $\Delta\omega_S$ и $\Delta\omega_A$ при инверсии внешнего магнитного поля H

размером зерна для образца без меди $d = 4.3$ нм и средним размером зерна $d = 6.2$ нм в образце с медью. Следовательно, медь способствует увеличению среднего размера зерна у слоя IrMn в 1.5 раза.

Поле вращающейся анизотропии H_{RA} уменьшается с увеличением толщины Cu в диапазоне от 0 до 5 нм (рис. 2в). Значение H_{RA} не обращается в нуль при толщине $t_{Cu} > 1$ нм, когда исчезает прямое обменное взаимодействие, оставаясь равной $H_{RA} \approx 320$ Э при толщине меди $t_{Cu} = 1\text{--}5$ нм. Таким образом, вклад крупных зерен в H_{RA} остается ненулевым во всем диапазоне толщин Cu, в отличие от их вклада в поле H_B , которое становится равным нулю при полном покрытии меди интерфейса NiFe/Cu/IrMn. Это можно объяснить тем, что поверхностный слой антиферромагнетика на границе с медью также обладает вращающейся анизотропией.

Поле одноосной анизотропии H_U в диапазоне толщины слоя t_{Cu} от 0 до 5 нм монотонно убывает с увеличением толщины слоя меди (рис. 2г). Поскольку природа этой анизотропии связана с обменным взаимодействием между слоями NiFe и IrMn, уменьшение H_U вызвано уменьшением обменного взаимодействия этих слоев через медную прослойку.

На рис. 4 приведены спектры BLS для серии образцов NiFe/Cu/IrMn с толщинами слоя меди $t_{Cu} = 0$ (а), 0.08 нм (б), 0.25 нм (в), 0.5 нм (г), 1 нм (д), 2.5 нм (е) и 5 нм (ж) во внешнем магнитном поле

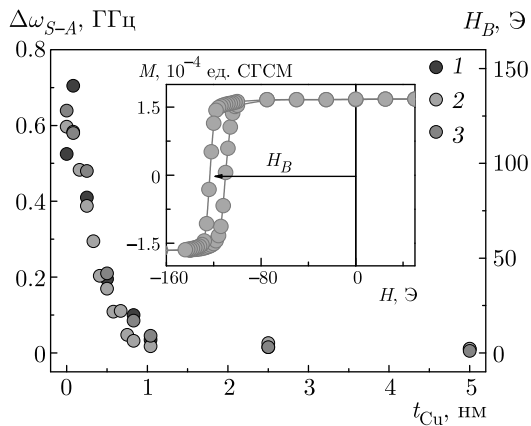


Рис. 5. Зависимость среднего смещения резонансных частот рассеяния $\Delta\omega_{S-A}$ (1), поля обменного смещения, полученного из измерений СКВИД-магнитометра (2), и поля обменного смещения, пересчитанного из смещений резонансных частот (3) с помощью выражения (1), от толщины Cu. На вставке представлена смещенная петля гистерезиса относительно нуля для образца без прослойки Cu

$H = 3$ кЭ и $H = -3$ кЭ. При $H = 3$ кЭ наблюдаются пики Стокса (1) и анти-Стокса (1'), которые меняют свои частоты при $H = -3$ кЭ. Инверсия магнитного поля приводит к смещению пиков Стокса (1) и (2) на величину $\Delta\omega_S$, а для пиков анти-Стокса (1') и (2') смещение происходит на величину $\Delta\omega_A$. Эти смещения максимальны для образца без меди и монотонно уменьшаются с увеличением толщины слоя Cu. Для определения резонансной частоты и ширины линий Стокса и анти-Стокса спектры BLS всей серии образцов аппроксимировались функцией Лоренца (сплошные линии на рис. 4).

Это позволяло кроме центров линий и их смещений $\Delta\omega_S$ и $\Delta\omega_A$ определять также ширину линии $\Delta\omega$. Для построения зависимости ширины линии от толщины спейсера ширины линий Стокса и анти-Стокса, извлеченные из аппроксимации, были усреднены в общем массиве, что позволяло уменьшить разброс. Такой же подход применялся при определении смещения линий при инверсии поля, так что в результате полученные значения сдвигов $\Delta\omega_S$ и $\Delta\omega_A$ усреднялись и давали величину $\Delta\omega_{S-A}$.

На рис. 5 (зависимость 1) представлена монотонно убывающая зависимость среднего смещения линий $\Delta\omega_{S-A}$ от толщины Cu. В независимых измерениях с помощью СКВИД-магнитометра было установлено, что образцы демонстрируют смещенный вдоль оси поля гистерезис, т.е. обладают полем обменного смещения H_B (вставка на рис. 5), которое уменьшается с увеличением толщины Cu и

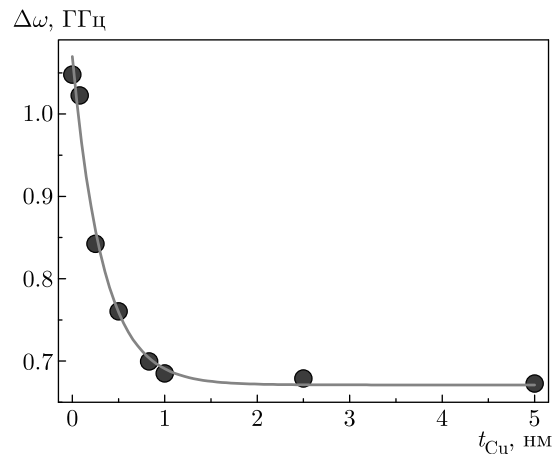


Рис. 6. Зависимость средней ширины линии пиков BLS $\Delta\omega$ от толщины меди. Линией показана аппроксимация выражением (2)

полностью исчезает при $t_{Cu} \approx 1$ нм (зависимость 2 на рис. 5). Сходство зависимостей $\Delta\omega_{S-A}(t_{Cu})$ и $H_B(t_{Cu})$ позволяет предположить наличие общих причин для изменения магнитных частот $\Delta\omega_{S-A}$ и обменного смещения. Для того чтобы пересчитать смещение резонансных частот $\Delta\omega_{S-A}$ в поле обменного смещения H_B , мы использовали выражение (1). Значения полей магнитных анизотропий были взяты из аппроксимации дисперсионных соотношений. Значения поля обменного смещения, рассчитанные из смещения резонансной частоты BLS, представлены на рис. 5 (зависимость 3) для разных толщин медного спейсера.

Видно, что значения полей обменного смещения, определенные из прямых измерений СКВИД-магнитометра (кривая 2) и из пересчета смещения частоты линии BLS (кривая 3) коррелируют между собой. Количественное различие полей обменного смещения, полученного этими двумя методиками, может быть связано с тем, что в методе BLS во внимание принимаются спиновые волны, распространяющиеся в тонком приповерхностном слое ферромагнетика, тогда как при магнитометрических измерениях измеряется интегральная характеристика всего ферромагнитного слоя NiFe.

На рис. 6 приведена зависимость средней ширины линии $\Delta\omega$ от толщины меди. Видно, что с увеличением толщины меди значение $\Delta\omega$ сначала уменьшается, а при $t_{Cu} > 1$ нм она насыщается до значения $\Delta\omega \approx 0.7$ ГГц. Поскольку метод BLS измеряет поверхностные спиновые волны в ферромагнетике, по ширине линии BLS можно судить о качестве интерфейса NiFe/Cu/IrMn. В работе [3] было показано,

что флуктуации поверхностной анизотропии, возникающие из-за неоднородности интерфейса, вносят существенный вклад в ширину линии ферромагнитного резонанса (при $k = 0$) и BLS (при $k \neq 0$) в гетероструктурах ФМ/АФМ. Средняя ширина линии BLS должна уменьшаться с увеличением толщины спейсера t_{Cu}

$$\Delta\omega = \frac{4\pi M_S \gamma^2 S_h}{2\pi D \omega_0} \left(\frac{J_B \exp(-t_{Cu}/t_0)}{M_S t_{NiFe}} \right)^2, \quad (2)$$

где t_0 — глубина неоднородностей интерфейса NiFe/IrMn, S_h — площадь неоднородностей в плоскости NiFe/IrMn, $\omega_0 = 19.4$ ГГц — средняя частота пика Стокса и анти-Стокса для контрольного образца без меди, J_B — плотность энергии обменного взаимодействия между атомами ферромагнитного слоя (NiFe) и антиферромагнитного слоя (IrMn). Поскольку для контрольного образца $H_B = 119$ Э, то $J_B = H_B M_S t_{NiFe} = 0.09$ эрг/см². На рис. 6 линией представлена аппроксимация $\Delta\omega(t_{Cu})$ выражением (2) с указанными выше параметрами. Из аппроксимации были получены значения геометрии неоднородностей интерфейса NiFe/IrMn $t_0 = 0.7$ нм и $S_h = 0.4$ нм² для контрольного образца, которые близки к литературным данным [3,4] ($S_h = 0.6$ нм²).

Таким образом, поле обменного смещения в одном и том же образце без меди было определено тремя способами: из измерений петли магнитного гистерезиса в СКВИД-магнитометре $H_B = 119 \pm 2$ Э, из аппроксимации дисперсионных соотношений $\omega(k)$ выражением (1) $H_B = 140 \pm 18$ Э и из сдвига спектров BLS при инверсии магнитного поля $H_B = 127 \pm 11$ Э. Различие этих полей обменного смещения находится почти в пределах погрешности эксперимента. Однако можно ожидать, что при измерениях динамическим методом, таким как BLS, величина обменного смещения будет отличаться от значения, установленного статическим методом [14–17]. В литературе [14–17] это различие объясняется медленной релаксацией намагниченности, связанной с движением доменных стенок в ферромагнитном слое.

4. ВЫВОДЫ

1. В гетероструктурах NiFe/Cu/IrMn обнаружено, что с ростом толщины слоя Cu увеличивается средний размер зерна IrMn. Вклад в магнитную анизотропию более крупных зерен увеличивается, а вклад мелких зерен становится меньше по мере увеличения толщины меди. При этом наблюдается

сдвиг дисперсионных кривых по частоте, что вызвано конкуренцией вкладов зерен IrMn и NiFe.

2. Установлено, что сдвиг резонансных частот рассеяния спиновых волн стоковой и антистоковой линий при инверсии внешнего магнитного поля происходит из-за поля обменного смещения. С ростом толщины Cu сдвиг уменьшается и полностью исчезает при полном покрытии слоя Cu интерфейса NiFe/Cu/IrMn.

3. Смена островковой структуры меди на сплошной слой Cu приводит к уменьшению ширины линии BLS, что ослабляет флуктуации плотности энергии обменного взаимодействия между атомами слоев NiFe и IrMn и делает гетероструктуру NiFe/Cu/IrMn более однородной.

Финансирование. Работа выполнена в рамках тематической карты Института проблем химической физики АААА-А19-119111390022-2 и в рамках программы Президента РФ для поддержки ведущих научных школ (грант № 2644.2020.2).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Nogues, J. Sort, V. Langlais, V. Skumryev, S. Surinach, J. S. Munoz, and M. D. Baro, Phys. Rep. **422**, 65 (2005).
2. V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak, Rev. Mod. Phys. **90**, 015005 (2018).
3. S. M. Rezende, A. Azevedo, M. A. Lucena, and F. M. Aguiar, Phys. Rev. B **63**, 214418 (2001).
4. A. Haldar, C. Banerjee, P. Laha, and A. Barman, J. Appl. Phys. **115**, 133901 (2014).
5. R. L. Rodriguez-Suarez, A. B. Oliveira, F. Estrada, D. S. Maior, M. Arana, O. A. Santos, A. Azevedo, and S. M. Rezende, J. Appl. Phys. **123**, 043901 (2018).
6. S. M. Rezende, C. Chesman, M. A. Lucena, A. Azevedo, and F. M. Aguiar, J. Appl. Phys. **84**, 958 (1998).
7. R. L. Rodriguez-Suarez, L. H. Vilela-Leao, T. Bueno, A. B. Oliveira, J. R. L. de Almeida, P. Landeros, S. M. Rezende, and A. Azevedo, Phys. Rev. B **83**, 224418 (2011).
8. M. Arana, M. Gamino, A. B. Oliveira, J. Holanda, A. Azevedo, S. M. Rezende, and R. L. Rodriguez-Suarez, Phys. Rev. B **102**, 104405 (2020).

9. R. A. Gallardo, S. Khanal, J. M. Vargas, L. Spinu, C. A. Ross, and C. Garcia, *J. Appl. Phys.* **50**, 075002 (2017).
10. М. В. Бахметьев, А. Д. Таланцев, Р. Б. Моргунов, *ЖЭТФ* **159**, 963 (2021).
11. A. Elzwawy, A. Talantsev, and C. Kim, *J. Magn. Magn. Mat.* **458**, 292 (2018).
12. E. R. Moog, S. D. Bader, and J. Zak, *App. Phys. Lett.* **56**, 2687 (1990).
13. M. A. Sousa, F. Pelegri, W. Alayo, J. Quispe-Marcato, and E. Baggio-Saitovitch, *Physica B* **450**, 167 (2014).
14. M. Gloanec, S. Rioual, B. Lescop, R. Zuberek, R. Szymczak, P. Aleshkevych, and B. Rouvellou, *Phys. Rev. B* **82**, 144433 (2010).
15. M. Gloanec, S. Rioual, B. Lescop, R. Zuberek, R. Szymczak, P. Aleshkevych, and B. Rouvellou, *Phys. Rev. B* **80**, 220404 (2009).
16. B. H. Miller and E. D. Dahlberg, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 3932 (1996).
17. J. Geshev, S. Nicolodi, L. G. Pereira, L. C. C. M. Nagamine, J. E. Schmidt, C. Deranlot, F. Petroff, R. L. Rodriguez-Suarez, and A. Azevedo, *Phys. Rev. B* **75**, 214402 (2007).

УСРЕДНЕНИЕ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СРЕД: НЕПРЕРЫВНОСТЬ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА

А. С. Старков^{a,b}, И. А. Старков^{a*}

^a Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина)
197376, Санкт-Петербург, Россия

^b Национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики
197101, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 23 июня 2021 г.,
после переработки 9 сентября 2021 г.
Принята к публикации 2 октября 2021 г.

Рассматривается задача о нахождении эффективных термоэлектрических характеристик композитных сред, а именно: тепло- и электропроводности, термоэдс и добротности. Предполагается, что характерный размер включений достаточно велик (больше 20–30 нм), что позволяет пренебречь туннелированием заряда и рассеянием фононов на границах различных сред. Исследованы слоистые, волокнистые и зернистые композиты. Приведено подробное обоснование выбора граничных условий, основанное на принципе Пригожина. В качестве примера исследованы свойства композитной среды, состоящей из матрицы $\text{MgAg}_{0.97}\text{Sb}_1$, в которую помещены включения из SnSe цилиндрической или сферической формы.

DOI: 10.31857/S0044451022020110

1. ВВЕДЕНИЕ

Твердотельное охлаждение по сравнению с традиционными (парокомпрессионными) методами обладает рядом преимуществ. Используемые материалы являются экологически безопасными в отличие от множества хладагентов, применяющихся в настоящее время в холодильной технике. В твердотельных охладителях нет движущихся частей, поэтому они более компактны, надежны и практически бесшумны. Существует два вида твердотельного охлаждения: на калорических эффектах [1–3] и термоэлектрическое [4–6]. Первое является гораздо более эффективным, но имеет множество существенных недостатков. Охлаждение на магнитокалорическом эффекте основано на использовании дорогостоящих материалов [2]. Электрокалорическое охлаждение требует высокоэффективных тепловых ключей [1]. Охлаждение на мультикалорическом эффекте существует только в виде теоретических разработок [7]. Термоэлектрическое преобразование энергии хоть и

используется в различных областях, но в силу необратимости термодинамических процессов, лежащих в ее основе, обладает сравнительно малой термодинамической эффективностью. Значительное увеличение эффективности термоэлектрического преобразования энергии было достигнуто в середине XX века, когда было предложено использовать полупроводниковые материалы [4]. В дальнейшем эффективность повышалась очень медленно, со средней скоростью примерно 0.5 % в год. Ввиду этого основной проблемой при разработке охлаждающих технологий XXI века является нахождение высокоэффективных калорических и термоэлектрических материалов, обеспечивающих высокую производительность устройств охлаждения и термостабилизации. Одной из возможностей устранения недостатков твердотельного охлаждения является объединение обоих способов твердотельного преобразования энергии. Вариантом совместного использования калорических и термоэлектрических явлений может служить использование термоэлектрических ключей в охладителях на калорических эффектах [8, 9]. Другим способом увеличения эффективности является наноструктурирование [10–12], в частности, использование нанокompозитов [13, 14]. Композитные материалы разделяются на слоистые, волокнистые

* E-mail: ferroelectrics@ya.ru

и зернистые. Слоистые композиты изготавливаются из чередующихся слоев различных материалов, которые могут объединяться в сверхрешетки. Волокнистые и зернистые композиты состоят из матрицы и армирующих включений (тонких волокон или частиц). Для сверхрешеток из калорических материалов влияние взаимодействия полей различной природы на ее физические характеристики легко может быть описано матричным методом усреднения (ММУ) [15–17]. Поскольку формулы для эффективной среды, получаемые ММУ, являются частным случаем формул для периодических сред, для слоистых композитов приближение эффективной среды становится все более точным при уменьшении толщины слоев. Для волокнистых и зернистых композитов строгих методов расчета не существует. Основную роль в получении усредненных характеристик играют приближенные методы, основанные на некоторых физических допущениях. Среди них отметим наиболее распространенные методы Максвелла Гарнетта и Бруггемана. Расчет же термоэлектрических композитных сред представляет собой более сложную задачу. Связано это со следующими обстоятельствами. Во-первых, уравнения, описывающие физические поля в термоэлектриках, являются нелинейными и образуют систему. И во-вторых, на границах различных термоэлектриков следует учитывать некоторые новые физические явления, которых нет в неограниченных телах. К таким явлениям следует отнести туннелирование заряда через границу [18] и дополнительное рассеяние фононов и носителей заряда [19].

В данной работе рассматриваются все три варианта композитных сред из термоэлектрических материалов. Толщина любого слоя и размер включений должны превышать некую величину, которая зависит от материала и оценивается в 20–30 нм. Это ограничение вызвано условием, чтобы характерный размер включений был больше длины свободного пробега как носителей заряда, так и фононов. При этом предположении можно пренебречь туннелированием заряда и рассеянием фононов на границе. Данное условие не выполняется для сверхрешеток со слоями толщиной 3–10 нм [13, 14], для которых были получены наилучшие результаты. Тем не менее матричный метод усреднения в силу его простоты может с успехом применяться для описания решеток с достаточно толстыми слоями. Для простоты последующих рассуждений каждый слой или включение считается изотропным, хотя обобщение на случай произвольной анизотропии легко

может быть получено, если в итоговых формулах считать основные физические характеристики слоев тензорными величинами. Основной целью является корректная постановка задачи со строгим обоснованием граничных условий и исследование эффективности композитной структуры в зависимости от процентного содержания включений (отношений толщин слоев). Для термоэлектрических материалов эффективность определяется добротностью Z (число Иоффе, figure of merit) или безразмерным фактором $ZT = T\sigma\alpha^2/k$ [4–6], где T — абсолютная температура, σ и k — коэффициенты электро- и теплопроводности соответственно, α — коэффициент Зеебека (термоэдс). Хорошо известно, что в отсутствие взаимодействия электрического и теплового полей ($\alpha = 0$) композитная среда может быть заменена на некоторую эффективную, физические характеристики которой не зависят от координаты. В этом случае нахождение усредненных (эффективных) значений электро- и теплопроводности никаких трудностей не вызывает [18, 20]. Даже для изотропных слоев слоистое тело является анизотропным, и теплопроводности вдоль k_{\parallel} и поперек k_{\perp} слоев различаются. Также не совпадают коэффициенты σ_{\parallel} и σ_{\perp} . Значения этих коэффициентов для всей структуры определяются значениями этих же коэффициентов для отдельных слоев и приведены, например, в [20, 21] (см. также ниже формулы (18)). Для термоэлектрических материалов ($\alpha \neq 0$) такие формулы для частного случая двухслойных сред были получены в [21, 22]. Общий случай многослойной среды рассмотрен в настоящей работе. Кроме структур, состоящих из произвольного числа плоских слоев, рассматривается усреднение тонких цилиндрических и сферических термоэлектрических слоев, являющихся основой для наноматрешек [23].

Следует подчеркнуть, что общий случай усреднения термоэлектрических сред рассматривался ранее в [24, 25], но для граничных условий, при которых возникают поверхностные потоки. В данной работе приводится вывод корректных условий из принципа Пригожина неравновесной термодинамики, и процедура усреднения проводится для полученных граничных условий. Подобные граничные условия использовались в [26, 27] при описании распределения термоэлектрического поля в эллипсоиде и сфероиде. Кроме того, в настоящей работе матричный метод усреднения обобщается на случай нелинейных уравнений, что позволяет без особых трудов находить усредненные значения α , σ , k в случае, когда эти величины являются тензорными.

2. УСРЕДНЕНИЕ СЛОИСТЫХ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СРЕД

2.1. Уравнения термоэлектричества

Для описания теплового и электрического полей будем использовать температуру T , потенциал электрического поля φ , а также связанные с ними величины: напряженность электрического поля \mathbf{E} , электрический ток \mathbf{j} и тепловой поток \mathbf{q} . Эти величины, согласно принципам неравновесной термодинамики [28, 29], связаны между собой соотношениями

$$\begin{cases} \mathbf{E} = \rho \mathbf{j} + \alpha \operatorname{grad} T, \\ \mathbf{q} = \alpha T \mathbf{j} - k \operatorname{grad} T, \\ \mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} - \alpha \sigma \operatorname{grad} T, \\ \mathbf{q} = \alpha \sigma T \mathbf{E} - (k + \alpha^2 \sigma T) \operatorname{grad} T, \\ \operatorname{grad} T = \frac{\alpha T}{k} \mathbf{j} - \frac{\mathbf{q}}{k}, \\ \operatorname{grad} \varphi = - \left(\rho + \frac{\alpha^2 T}{k} \right) \mathbf{j} + \frac{\alpha}{k} \mathbf{q}. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь $\rho = 1/\sigma$ — удельное сопротивление. Три системы в (1) являются эквивалентными, различаются только выбором переменных в левой части и все используются для последующих преобразований. Помимо соотношений (1) должны выполняться условия сохранения заряда и энергии:

$$\operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{q} + \mathbf{j} \cdot \operatorname{grad} \varphi = 0. \quad (2)$$

В соответствии со сказанным выше, при нахождении параметров эффективной среды отбросим джоулево тепло $\mathbf{j} \cdot \operatorname{grad} \varphi$ во втором уравнении (2). Оно квадратичным образом зависит от напряженности электрического поля, которая предполагается инфинитезимально малой. Перейдем от электрического потенциала φ к термоэлектрическому по формуле $\Phi = \varphi + \alpha T$ и будем предполагать, что коэффициенты α, σ, k не зависят от температуры и электрического поля. Это предположение означает, что эффектом Томсона будем пренебрегать. Тогда система уравнений (1), (2) упростится и запишется в виде

$$\begin{cases} \mathbf{j} = -\sigma \operatorname{grad} \Phi, \\ \operatorname{div} \sigma \operatorname{grad} \Phi = 0, \\ \mathbf{q} = -\alpha \sigma T \operatorname{grad} \Phi - k \operatorname{grad} T, \\ \operatorname{div} k \operatorname{grad} T + \frac{\mathbf{j}^2}{\sigma} = 0. \end{cases} \quad (3)$$

В системе (3) только уравнение для теплового потока содержит обе неизвестные функции T и Φ .

Термоэлектрический потенциал может быть найден независимо от теплового поля. Уравнение для его определения имеет вид $\Delta \Phi = 0$, где Δ — оператор Лапласа. После нахождения Φ для получения распределения температуры следует решить последнее уравнение системы (3), которое также является уравнением Лапласа. Таким образом, решение системы (3) сводится к последовательному решению двух уравнений Лапласа. Отсюда сразу следует, что усреднение коэффициентов тепло- и электропроводности для слоистой структуры происходит независимо друг от друга, поэтому для нахождения их эффективных значений можно использовать правила усреднения диэлектриков. Трудности могут возникать только при усреднении коэффициента термоэдс, который характеризует степень взаимодействия теплового и электрического полей.

2.2. Условия на границе двух термоэлектриков

Для корректного вывода граничных условий обратимся к одному из основных принципов неравновесной термодинамики — принципу Пригожина [30]. Теорема Пригожина утверждает, что скорость производства энтропии внутри открытой системы в стационарном состоянии положительна и минимальна. Обозначим через X_i термодинамические силы, а через J_i — термодинамические потоки. При малых отклонениях от положения равновесия потоки являются линейными функциями термодинамических сил:

$$J_i = \sum_{k=1}^n L_{ik} X_k, \quad (4)$$

причем кинетические коэффициенты L_{ik} при отсутствии магнитного поля должны удовлетворять следующему условию симметрии: $L_{ik} = L_{ki}$. В матричном виде соотношение (4) запишем как $J = LX$, где J и X — вектор-столбцы, $J = (J_1, J_2, \dots, J_n)^{tr}$, $X = (X_1, X_2, \dots, X_n)^{tr}$, а L — квадратная матрица с элементами L_{ik} . Индекс tr означает транспонирование. Производство энтропии в этом приближении квадратичным образом зависит от термодинамических сил:

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= \int_V \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n L_{ik} X_i X_k dV, \\ \frac{dS}{dt} &= \int_V X^{tr} L X dV. \end{aligned} \quad (5)$$

Согласно принципу Пригожина связь между силами и потоками (4) может быть найдена из условия ми-

нимальности производства энтропии (5). В соответствии с формулами (4), (5) производство энтропии также может быть записано в виде

$$\frac{dS}{dt} = \int_V \sum_{i=1}^n X_i J_i dV = \int_V X^{tr} J dV. \quad (6)$$

Для вывода уравнений и граничных условий удобнее формула (4), которая позволяет использовать вариационные методы. В некоторых случаях (§§ 6, 7 гл. 10 [31]) соотношение (6) позволяет проще определить силы и потоки. Если от термодинамических сил X_i перейти к новым термодинамическим силам Y_i по формулам, которые в матричной записи имеют вид $X = CY$ с симметричной матрицей C , то производство энтропии примет вид

$$\frac{dS}{dt} = \int_V Y^{tr} L' Y dV, \quad L' = C^{tr} LC. \quad (7)$$

Обычно считают матрицу C унитарной: $C^{-1} = C^{tr}$, а матрицу L' — диагональной, что позволяет упростить некоторые выкладки. Эти условия будем считать в дальнейшем выполненными. Из формулы (7) вытекают законы преобразования потоков J и производства энтропии:

$$J' = L' Y, \quad \frac{dS}{dt} = \int_V Y^{tr} J' dV. \quad (8)$$

Таким образом, в неравновесной термодинамике при изменении сил также меняются и потоки.

В дальнейшем для определенности будем полагать, что силы имеют вид $X_i = -\text{grad } U_i$, где U_i — некоторые потенциальные функции, из которых составим столбец U . Именно этот случай реализуется в теории термоэлектричества. При сделанном предположении о термодинамических силах уравнения для потоков имеют вид законов сохранения:

$$\text{div } J_i = 0, \quad J_i = - \sum_{k=1}^n L_{ik} \text{grad } U_k. \quad (9)$$

Граничные условия вытекают либо из общей формы первой вариации для интегральной части в (6) [32], либо из условия ограниченности слагаемых в (9), понимаемых в смысле обобщенных функций. И в том, и в другом случае требуется непрерывность нормальной к границе составляющей векторов потоков J_i и функций $\sum_{k=1}^n L_{ik} \text{grad } U_k$. Если же производство энтропии линейным преобразованием $U = CU'$ приведено к диагональному виду (7),

то система уравнений (9) распадается на множество отдельных уравнений, которые имеют вид

$$\text{div } L'_{kk} \text{grad } U'_k = 0. \quad (10)$$

Тогда на границах раздела должны быть непрерывны сама функция U'_k и нормальная к границе компонента вектора $L'_{kk} \text{grad } U'_k$. Для уравнений термоэлектричества, как следует из уравнений (3), в качестве U'_k выступают Φ и T . Отвечающее электрическому току слагаемое в производстве энтропии в соответствии с формулой (8) записывается в виде

$$\int \sigma \frac{(\text{grad } \Phi)^2}{2} dV. \quad (11)$$

Отсюда из принципа Пригожина вытекает непрерывность на границах различных сред как термоэлектрического потенциала Φ , так и нормальной составляющей вектора $\text{grad } \Phi$, т. е. электрического тока j . В противном случае на границе возникают поверхностные токи.

Рассмотрим теперь ситуацию, когда меняются силы, а потоки остаются неизменными [24, 25]. С точки зрения неравновесной термодинамики это методически неправильно, но ошибкой не является, хотя может приводить к некорректным результатам. Так как в подходе работы [24] потоки не меняются, то граничные условия для них совпадают с граничными условиями, вытекающими из принципа Пригожина. В свою очередь, граничные условия для потенциальных функций (непрерывность исходных потенциалов U_i) просто постулируются, а не выводятся. Требование непрерывности электрического потенциала φ приводит к разрыву термоэлектрического потенциала Φ и к появлению нефизических поверхностных токов. При этом производство энтропии не является минимальным, и принцип Пригожина не выполняется. Значит, подход [24, 25] следует считать ошибочным, а выводы этих работ — не соответствующими действительности. Ввиду этого в дальнейшем на границе раздела сред будем требовать непрерывность следующих четырех величин:

$$(\Phi, T, j_n, q_n). \quad (12)$$

Здесь j_n, q_n — нормальные составляющие соответствующих векторов.

2.3. Матричный метод усреднения для слоистых термоэлектриков

Исследование системы уравнений (1), (2) начнем с периодической слоистой структуры, изобра-

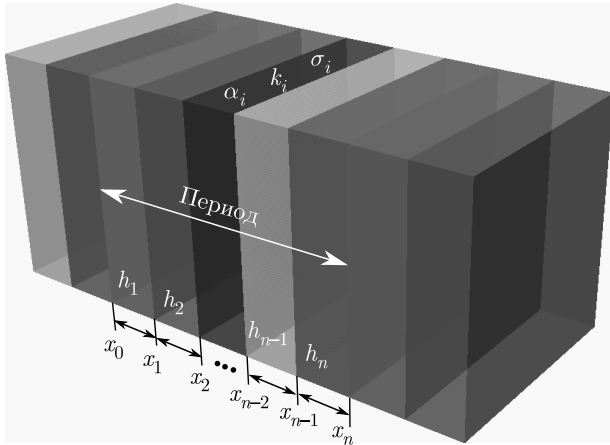


Рис. 1. Периодическая система термоэлектрических слоев

женной на рис. 1. Период состоит из n слоев. Каждый слой характеризуется постоянными σ_i, k_i, α_i , где i — номер слоя. Толщину i -го слоя обозначим через $h_i = x_i - x_{i-1}$, а относительную толщину — через $\vartheta_i = h_i/x_n, \sum \vartheta_i = 1$. Для достаточно толстых слоев $h_i > 20$ нм можно пренебречь рассеянием фононов, туннелированием и энергетической фильтрацией носителей на границах [4] и ограничиться условиями непрерывности для величин из (12) на границах $x = x_i, i = 1, 2, \dots, n - 1$.

Кроме того, величины в (12) должны быть периодическими: их значения при $x = 0$ и $x = x_n$ должны совпадать. Условия периодичности, как и любые другие граничные условия при $x = 0$ и $x = x_n$, не влияют на усредненные характеристики [15], поэтому в дальнейшем их не будем учитывать.

Для нахождения усредненных характеристик описанной периодической структуры воспользуемся ММУ [16], который изначально использовался при решении задач теории упругости [15]. Преимуществом ММУ при нахождении эффективных параметров слоистых сред является возможность ограничиться операциями с матрицами и не решать никаких дифференциальных уравнений. Ранее он использовался только для усреднения структур, описываемых линейными уравнениями. Применим этот метод к нелинейным уравнениям (1). Для этого из величин, непрерывных на границах раздела сред, составим столбец $U = (\varphi, T, j_x, q_x)^{tr}$. Из системы уравнений (1) выразим производные от компонент U по x и перепишем систему в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial x} &= -\rho j_x, \\ \frac{\partial T}{\partial x} &= \frac{\alpha T}{k} j_x - \frac{1}{k} q_x, \\ \frac{\partial j_x}{\partial x} &= \sigma \frac{\partial \Phi}{\partial y}, \\ \frac{\partial q_x}{\partial x} &= -j_x^2 \left(\rho + \frac{\alpha^2 T}{k} \right) - \\ &\quad - \frac{\alpha}{k} j_x q_x + \alpha \sigma T \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + k \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}. \end{aligned} \tag{13}$$

Здесь индекс x указывает на соответствующую компоненту вектора. В системе (13) оставлена зависимость только от одной координаты вдоль слоев — y , так как зависимость от второй продольной координаты точно такая же и не добавляет новой информации об усредненных характеристиках рассматриваемой структуры. В матричной форме система (13) может быть записана в виде

$$\frac{\partial U}{\partial x} = A(U). \tag{14}$$

Здесь $A(U)$ — операторная матрица, определяемая правой частью системы (13). Важным свойством матрицы A является то, что в нее не входят производные по координате x . Для линейных уравнений $A(U) = A_0 U$ с некоторой операторной матрицей A_0 , не зависящей от U . В этом случае решение U может быть получено при помощи матричной экспоненты [15], задаваемой своим рядом Маклорена. В рассматриваемом нелинейном случае также можно искать решение (14) в виде ряда Маклорена. Для первых членов этого ряда имеем

$$\begin{aligned} U(x) &= U(0) + A(U(0))x + \\ &\quad + \frac{dA}{dU} \Big|_{U=U(0)} A(U(0)) \frac{x^2}{2} + \dots \end{aligned} \tag{15}$$

Если же коэффициенты матрицы $A(U)$ зависят также от координаты x , то линейное слагаемое в (15) следует заменить на $\int A(U(0), x) dx$. Ограничиваясь первыми двумя слагаемыми в (15), для каждого слоя получаем приближенную формулу, связывающую значения столбца неизвестных в начале и конце периода:

$$U(x_n) = U(0) + \sum_{i=1}^n A_i(U_0) h_i + \dots \tag{16}$$

Сравнивая правую часть в (16) с аналогичным разложением для эффективной среды, для эффектив-

ного значения матрицы $A(U)$ при наличии зависимости от x и при ее отсутствии получаем следующие выражения:

$$A_{eff}(U_0) = \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} A_i(U_0, x) dx, \tag{17}$$

$$A_{eff}(U_0) = \sum_{i=1}^n A_i(U_0) \vartheta_i.$$

Если общая толщина системы остается постоянной, а число периодов стремится к бесконечности, то невыписанными слагаемыми в (16) можно пренебречь. Это утверждение доказано только в линейном случае при некоторых ограничениях на матрицу A_0 [16], но естественно ожидать, что оно остается в силе и для нелинейных задач, для которых ряд (15) сходится в некоторой норме. Если слоистую среду заменить на эффективную с постоянными физическими характеристиками, то формула (16) по-прежнему должна быть справедливой. С физической точки зрения, это предположение означает, что температура T , потенциал φ , ток \mathbf{j} и поток тепла \mathbf{q} мало меняются поперек произвольного слоя, а их зависимость от координаты в каждом слое можно приближенно считать линейной. Для нелинейной системы уравнений данный подход приводит к некоторым интегральным соотношениям, связывающим термоэлектрические характеристики с температурой и электрическим полем. Для того чтобы из этих соотношений получить искомые эффективные значения α , σ , k , сделаем несколько упрощающих предположений. Будем полагать, что задаваемые на внешних границах электрическое и температурное поля не очень велики. Тогда изменение температуры T также можно считать малым по сравнению с самой температурой. Считая данное предположение выполненным и сравнивая формулу (16) с аналогичной формулой эффективной среды, получаем искомые формулы для эффективных характеристик периодической среды:

$$\frac{1}{k_{\perp}} = \overline{\left(\frac{1}{k}\right)}, \quad \alpha_{\perp} = \overline{\left(\frac{\alpha}{k}\right)} k_{\perp}, \quad \rho_{\perp} = \overline{\rho}, \tag{18}$$

$$\sigma_{\parallel} = \overline{\sigma}, \quad \alpha_{\parallel} = \frac{\overline{\alpha\sigma}}{\sigma_{\parallel}}, \quad k_{\parallel} = \overline{k}.$$

Здесь черта над величиной означает ее взвешенное среднее по слоям. Например,

$$\overline{k} = \sum_{i=1}^n \vartheta_i k_i, \quad \overline{k} = \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} k_i(x) dx. \tag{19}$$

Первая из формул (18) справедлива в случае кусочно-постоянных физических характеристик слоистой системы, а вторая, более общая, — для коэффициентов, меняющихся вдоль координаты x . Полученные формулы (18) полностью описывают эффективную термоэлектрическую среду и позволяют вычислить ее добротности Z_{\parallel} и Z_{\perp} . Эти формулы применимы не только для периодических, но и для произвольных слоистых структур.

Если рассматриваются цилиндрические или сферические слои, уравнения которых в цилиндрической или сферической системе координат задаются уравнениями $r = r_i$, $i = 0, 1, \dots, n$, а толщины задаются соотношениями $l_i = r_{i+1} - r_i$, то и для таких структур применим ММУ. Для них усреднение проходит по кольцам или по шаровым слоям. Соответственно, при интегрировании возникает дополнительный множитель r или r^2 , который приводит к изменению правил усреднения (18), (19) [16, 20]. Достаточно простые, но громоздкие выкладки показывают, что формулы (18) остаются в силе, если правило усреднения (19) для направления, перпендикулярного слоям, заменить на одно из следующих. Для цилиндрических слоев усредненные характеристики некоторой величины a находятся по формуле

$$\hat{a} = \frac{1}{\ln(r_n/r_0)} \sum_{i=1}^n \ln(r_{i+1}/r_i) a_i. \tag{20}$$

Для сферических слоев формула нахождения средних имеет вид

$$\tilde{a} = \frac{r_0 r_n}{r_n - r_0} \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{r_i} - \frac{1}{r_{i+1}} \right) a_i. \tag{21}$$

Таким образом, при усреднении цилиндрических или сферических слоев в формуле (19) нужно правило \bar{a} для некоторой величины a заменить на правило \hat{a} (20) или \tilde{a} (21) соответственно. В качестве величины a может выступать α , ρ , σ или k . Переход от формул усреднения плоскостойких термоэлектрических сред к аналогичным формулам для цилиндрических и сферических слоев совпадает с подобной процедурой в отсутствие взаимодействия теплового и электрического полей [16, 20].

При $\alpha_i = 0$ формулы (18) переходят в хорошо известные формулы теплоемкости и электропроводности слоистых сред [20]. Наличие термоэдс не меняет теплопроводность поперек слоев k_{\perp} . Теплопроводность вдоль слоев k_{\parallel} , наоборот, зависит от коэффициентов Зеебека α_i и коэффициентов электропроводности σ_i . Кроме того, термоэлектрическая добавка к k_{\parallel} оказывается пропорциональной темпера-

туре и может быть как положительной, так и отрицательной. Коэффициенты Зеебека для разных направлений усредняются по-разному. Для направления, перпендикулярного слоям, помимо значений этого коэффициента в слоях, на усредненное значение влияют только коэффициенты теплопроводности. В направлении, параллельном слоям, коэффициент α_{\parallel} определяется через α_i и коэффициенты электропроводности. Формулы для эффективного сопротивления вдоль и поперек слоев для термоэлектрических сред полностью совпадают с формулами для нахождения сопротивления цепи при последовательном и параллельном соединении отдельных сопротивлений.

Одним из преимуществ ММУ является то, что его можно использовать и для нахождения эффективных характеристик анизотропных материалов, причем сложность расчетов при этом не сильно увеличивается. Если считать кинетические коэффициенты тензорными величинами σ_{ij} , α_{ij} , k_{ij} , $i, j = 1, 2, 3$, то для эффективных значений коэффициентов электропроводности и теплопроводности σ_{ij}^e , k_{ij}^e получаем согласно [33] следующие выражения:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sigma_{11}^e} &= \overline{\left(\frac{1}{\sigma_{11}}\right)}, & \sigma_{1i}^e &= \overline{\left(\frac{\sigma_{1i}}{\sigma_{11}}\right)} \sigma_{11}^e, \\ \sigma_{ii}^e &= \overline{\sigma_{ii}} - \overline{\left(\frac{\sigma_{1i}\sigma_{i1}}{\sigma_{11}}\right)} + \frac{\sigma_{1i}^e \sigma_{i1}^e}{\sigma_{11}^e}, \\ \frac{1}{k_{11}^e} &= \overline{\left(\frac{1}{k_{11}}\right)}, & k_{1i}^e &= \overline{\left(\frac{k_{1i}}{k_{11}}\right)} k_{11}^e, \\ k_{ii}^e &= \overline{k_{ii}} - \overline{\left(\frac{k_{1i}k_{i1}}{k_{11}}\right)} + \frac{k_{1i}^e k_{i1}^e}{k_{11}^e}, & i &= 2, 3. \end{aligned} \quad (22)$$

Если в тензорах σ_{ij} и k_{ij} отличны от нуля только диагональные элементы ($\sigma_{ij} = 0$, $k_{ij} = 0$, $i \neq j$), то формулы (22) переходят в выведенные ранее для изотропной среды формулы (18). Из формул (22) следует, что усреднение происходит по трем правилам. Коэффициенты поперек слоев (σ_{11} и k_{11}) усредняются по правилу взвешенного среднего гармонического и их среднее значение не зависит от других коэффициентов. Среднее значение коэффициентов, содержащих один индекс 1, определяется не только значениями этих коэффициентов в слоях, но и значениями коэффициентов с индексом 11. Наконец, эффективные значения кинетических коэффициентов, определяющих поведение термоэлектрика вдоль слоев, задается значениями всех компонент соответствующего тензора. Аналогичные формулы

могут быть выписаны и для анизотропных сферических и цилиндрических слоев [33]. Заметим, что учет анизотропии не приводит к заметному увеличению числа Иоффе [34].

2.4. Возможность увеличения термоэлектрической добротности для слоистых сред

Выведенные формулы (18) позволяют решить вопрос о целесообразности добавления еще одного слоя с известными термоэлектрическими свойствами. Пусть имеется изначальный слой относительной толщины ϑ_1 и к нему добавили второй слой относительной толщины $\vartheta_2 = 1 - \vartheta_1$. Введем новые термоэлектрические коэффициенты $\beta = \alpha/k$, $\kappa = 1/k$. Эффективные значения этих коэффициентов и также ρ_e линейно зависят от ϑ_2 , а именно:

$$\begin{aligned} \beta_e &= \beta_1 + (\beta_2 - \beta_1)\vartheta_2, & \kappa_e &= \kappa_1 + (\kappa_2 - \kappa_1)\vartheta_2, \\ \rho_e &= \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1)\vartheta_2. \end{aligned}$$

Тогда изменение термоэлектрической добротности при изменении ϑ_2 можно охарактеризовать коэффициентом L , который определим следующим образом:

$$L(\vartheta_1) \equiv \frac{1}{Z} \frac{dZ}{d\vartheta_2} = 2 \frac{\delta\beta}{\beta_e} - \frac{\delta\rho}{\rho_e} - \frac{\delta\kappa}{\kappa_e}. \quad (23)$$

Здесь введены обозначения $\delta\beta = \beta_2 - \beta_1$, $\delta\kappa = \kappa_2 - \kappa_1$, $\delta\rho = \rho_2 - \rho_1$. После приведения к общему знаменателю дробей в правой части равенства (23) оказывается, что числитель является линейной функцией ϑ_2 . Отсюда вытекает, что условием увеличения добротности по сравнению со значениями Z_1 и Z_2 является положительность $L(0)$ и отрицательность $L(1)$. Простой анализ выражения (23) показывает, что одновременное выполнение двух этих условий при любых физически осуществимых параметрах в (23) невозможно. А вот обратная ситуация, когда $L(0) < 0$, а $L(1) > 0$, возможна. Следовательно, зависимость $Z(\vartheta_2)$ может иметь минимум, но не может иметь максимум на промежутке $[0; 1]$. Значит, термоэлектрическая добротность двухслойной системы не превосходит большее значение из термоэлектрических добротностей каждого из слоев. Этот вывод является чрезвычайно важным. Из него следует, что увеличение термоэлектрической добротности в слоистой системе возможно, только если толщина слоев будет меньше 20 нм, когда предлагаемая модель усреднения перестает работать из-за возрастания роли фононов и носителей зарядов. Получен-

ное в работе [22] увеличение добротности для двух-слойной системы вызвано ее зависимостью от величины подаваемого напряжения, точнее, от величины джоулева тепла. Оно является весьма малым и имеет место при небольших значениях относительной толщины дополнительного слоя. Экспериментального подтверждения полученных в [22] теоретических результатов получить не удалось. Напомним, что в предлагаемом на основе ММУ подходе усредненные характеристики считались при инфинитесимально малых напряженностях. На наш взгляд, возможное увеличение добротности, вызванное конечным значением напряженности электрического поля, точнее, величиной джоулева тепла, не является устойчивым к малым возмущениям, вызываемым различными физическими факторами. Ввиду этого использование зависимости эффективных свойств композитных сред от электрического поля не может привести к увеличению Z_e реальных слоистых термоэлектрических сред.

Численные расчеты также показывают, что увеличения термоэлектрической добротности невозможно добиться для цилиндрических и сферических слоев, но строгим доказательством этого утверждения авторы не располагают. Ввиду этого структуры типа наноматрешек не являются перспективными для получения высокодобротных термоэлектрических материалов. Возможно только использование включений типа ядро-оболочка. Добавление к этому типу включений еще нескольких слоев приведет только к уменьшению эффективности композитного материала.

3. УСРЕДНЕНИЕ ВОЛОКНИСТЫХ И ЗЕРНИСТЫХ КОМПОЗИТНЫХ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СРЕД

3.1. Постановка задачи

Из вида уравнений (2) и граничных условий (12) сразу следует, что электрическая проводимость усредняется независимо от других характеристик. Для ее нахождения можно использовать хорошо известные формулы Максвелла Гарнетта и Бругемана. Ввиду этого ограничимся нахождением α_e и k_e для включений цилиндрической и сферической формы. Вначале разберем случай одиночного включения. Будем одновременно рассматривать цилиндрическое и сферическое включения в центре цилиндрической или сферической системы координат (r, θ) (см. рис. 2). Радиусы цилиндра и шара обозначим через r_0 . Термоэлектрические постоян-

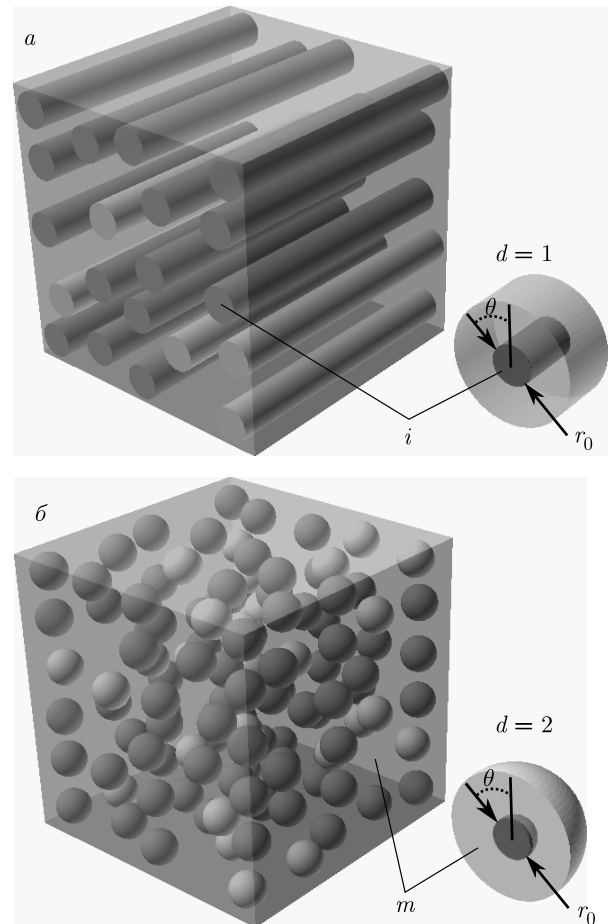


Рис. 2. Система цилиндрических (а) и сферических (б) включений в неограниченную матрицу

ные вне включений будем снабжать индексом m , внутри — индексом i . Включения располагаются во внешнем электрическом и температурном полях $\varphi_\infty = -E_\infty r \cos \theta$, $T_\infty = -q_\infty r \cos \theta$. Постоянные E_∞ и q_∞ имеют смысл напряженности электрического поля и теплового потока на большом удалении от включения. Искомые значения потенциалов φ, Φ и температуры T должны удовлетворять уравнениям (1)–(3). При удалении от включения они должны стремиться к заданным значениям:

$$\begin{aligned} \varphi &\rightarrow \varphi_\infty, & T &\rightarrow T_\infty, \\ \Phi &\rightarrow \Phi_\infty = \varphi_\infty + \alpha_m T_\infty, & r &\rightarrow \infty. \end{aligned} \tag{24}$$

На межфазной границе $r = r_0$ должны выполняться граничные условия (12), которые в рассматриваемом случае заключаются в непрерывности следующих величин:

$$(\Phi, j_r, T, q_r). \tag{25}$$

Решение поставленной задачи (24), (25) будем искать в виде

$$\begin{aligned} \Phi_m &= \left(-(E_\infty + \alpha_m q_\infty)r + A \frac{r_0^{d+1}}{r^d} \right) \cos \theta, \\ \Phi_i &= -Br \cos \theta, \\ T_m &= \left(-q_\infty r + C \frac{r_0^{d+1}}{r^d} \right) \cos \theta, \\ T_i &= Dr \cos \theta \end{aligned} \quad (26)$$

с некоторыми неизвестными постоянными A, B, C, D . Постоянная $d = 1$ для цилиндра и $d = 2$ для сферы. Неизвестные функции, записанные в виде (26), удовлетворяют уравнению Лапласа и условиям на бесконечности (24). Обратимся теперь к граничным условиям (25). При подстановке (26) в (25) получаем систему линейных уравнений, из которой находим искомые коэффициенты:

$$\begin{aligned} A &= a(E_\infty + \alpha_m q_\infty), \quad a = \frac{\sigma_i - \sigma_m}{\sigma_i + d\sigma_m}, \\ B &= b(E_\infty + \alpha_m q_\infty), \\ b &= \frac{(1+d)\sigma_m}{\sigma_i + d\sigma_m}, \\ C &= C_1 q_\infty + C_2 b(E_\infty + \alpha_m q_\infty), \\ C_1 &= \frac{k_i - k_m}{k_i + dk_m}, \quad C_2 = \frac{(\alpha_m - \alpha_i)\sigma_i T}{k_i + dk_m}, \\ D &= D_1 q_\infty + D_2 b(E_\infty + \alpha_m q_\infty), \\ D_1 &= \frac{(1+d)k_m}{k_i + dk_m}, \quad D_2 = C_2. \end{aligned} \quad (27)$$

Полученное решение (26), (27) можно использовать для нахождения эффективных характеристик композитной среды со случайно расположенными цилиндрическими или сферическими включениями типа ядро-оболочка.

Выше были описаны два различных подхода к граничным условиям. В первом требовалось непрерывность электрического потенциала φ , во втором — непрерывность термоэлектрического потенциала Φ . Для сравнения этих подходов рассчитаем радиальную составляющую тока j_r в двух случаях. Будем считать, что термоэлектрический шар помещен только в электрическое поле ($E_\infty = 5$ кВ/м, $q_\infty = 0$, $r_0 = 3$ мкм, $d = 2$). В качестве материала матрицы был выбран $\text{MgAg}_{0.97}\text{Sb}_1$ ($\alpha_m = 220$ мкВ/К, $\sigma_m = 4.76 \cdot 10^4$ Ом⁻¹ · м⁻¹, $k_m = 0.81$ Вт · м⁻¹ · К⁻¹ [35, 36]), в качестве наполнителя — p-SiGe ($\alpha_i = 115.12$ мкВ/К, $\sigma_i = 8.58 \cdot 10^4$ Ом⁻¹ · м⁻¹, $k_i = 2.37$ Вт · м⁻¹ · К⁻¹ [37])

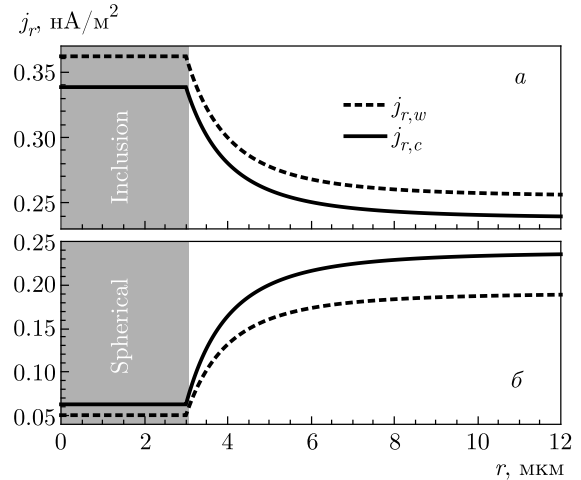


Рис. 3. Координатные зависимости радиальной составляющей тока для различных моделей граничных условий — непрерывность термоэлектрического ($j_{r,c}$) и непрерывность электрического ($j_{r,w}$) потенциалов. Расчеты выполнены для матрицы $\text{MgAg}_{0.97}\text{Sb}_1$ и сферических включений p-SiGe (а), SnSe (б). Кривая $j_{r,w}$ не является непрерывной, поскольку на границе раздела сред при $r = r_0$ имеет дельтообразную особенность, которая не отображается на графике

и SnSe ($\alpha_i = 210$ мкВ/К, $\sigma_i = 9.2 \cdot 10^3$ Ом⁻¹ · м⁻¹, $k_i = 1.1$ Вт · м⁻¹ · К⁻¹ [38]).

Результаты расчетов радиальной составляющей тока ($j_{r,c}$) и ее аналога ($j_{r,w}$) по формулам (27) представлены на рис. 3. Наибольшая относительная разность токов $j_{r,w}$ и $j_{r,c}$ при комнатной температуре составила 6.5% для включений p-SiGe и 20% для SnSe. Отметим, что эта величина пропорциональна абсолютной температуре и для высоких температур может составлять несколько десятков процентов. Графики радиальных составляющих тока для двух моделей ведут себя примерно одинаково, что приводит к близким значениям для физических характеристик усредненной среды. Более того, они могут быть получены друг из друга простой заменой кинетических коэффициентов. Тем не менее непрерывность потенциала φ приводит к разрыву термоэлектрического потенциала Φ на границе раздела двух сред. Вследствие этого нормальная составляющая тока в соответствии с формулами (1) является обобщенной функцией и содержит дельтообразную особенность на границе. При этом дивергенция тока имеет особенность в виде производной от дельта-функции. Это означает, что граница раздела является источником тока. Следовательно, непрерывность φ ведет к нефизической картине для тока и при определенных условиях (например, при вы-

соких температурах) может приводить к серьезной погрешности.

3.2. Усреднение нанокомпозитов со случайно расположенными включениями

Эффективные характеристики композитной среды будем находить по методу Бруггемана [10,11,39]. Рассмотрим некоторую элементарную ячейку. Обозначим объемы, занимаемые матрицей и включением в ячейке, через V_m и V_i , а относительные объемы — через $\nu_m = V_m/V$ и $\nu_i = V_i/V$, $\nu_i + \nu_m = 1$. Эффективная электропроводность, как показано выше, определяется только значениями σ_m и σ_i . В этом случае уравнение для определения σ_e в подходе Бруггемана хорошо известно и имеет вид

$$\nu_m \frac{\sigma_m - \sigma_e}{\sigma_m + d\sigma_e} + \nu_i \frac{\sigma_i - \sigma_e}{\sigma_i + d\sigma_e} = 0. \quad (28)$$

Обобщим данный подход для нахождения коэффициентов α_e и k_e , полагая σ_e известным. Плотность дипольных моментов включения в эффективной среде согласно (26), (27) имеет вид

$$C_i = \frac{k_i - k_e}{k_i + dk_e} q_\infty + \frac{(\alpha_i - \alpha_e)\sigma_i\sigma_e(1+d)}{(k_i + dk_e)(\sigma_i + d\sigma_e)} \times (E_\infty + \alpha_e q_\infty) T. \quad (29)$$

Совершенно аналогично находится плотность дипольных моментов для материала матрицы в эффективной среде:

$$C_m = \frac{k_m - k_e}{k_m + dk_e} q_\infty + \frac{(\alpha_m - \alpha_i)\sigma_m\sigma_e(1+d)}{(k_m + dk_e)(\sigma_m + d\sigma_e)} \times (E_\infty + \alpha_e q_\infty) T. \quad (30)$$

Потребуем вслед за Бруггеманом, чтобы полный дипольный момент ячейки равнялся 0. Отсюда получаем уравнение $\nu_i C_i + \nu_m C_m = 0$. Приравнявая коэффициенты при линейно независимых параметрах Q_∞ и E_∞ , приходим к уравнениям, позволяющим находить эффективные значения теплопроводности и термоэдс:

$$\begin{aligned} \nu_i \frac{k_i - k_e}{k_i + dk_e} + \nu_m \frac{k_m - k_e}{k_m + dk_e} &= 0, \\ \nu_i \frac{(\alpha_e - \alpha_i)\sigma_i}{(k_i + dk_e)(\sigma_i + d\sigma_e)} + & \\ + \nu_m \frac{(\alpha_e - \alpha_m)\sigma_m}{(k_m + dk_e)(\sigma_m + d\sigma_e)} &= 0. \end{aligned} \quad (31)$$

Из приведенных формул следует, что теплопроводность, так же как и электропроводность, усредня-

ется независимо от других физических характеристик. В эффективное значение коэффициента Зеебека входят как значения этого коэффициента в матрице и включении, так и теплопроводность и электропроводность.

3.3. Обсуждения и результаты

На основе формул (28) и (31) были проведены численные расчеты двухфазных композитных сред. Были рассчитаны эффективные термоэлектрические характеристики для двух возможных вариантов включений SnSe — цилиндрических и сферических — в матрицу $MgAg_{0.97}Sb_1$. Результаты расчетов зависимости эффективных значений электропроводности, коэффициента Зеебека, теплопроводности и добротности от концентрации включений представлены на рис. 4.

Как и следовало ожидать, термоэлектрическая эффективность в рассматриваемой модели эффективной среды оказалась монотонной функцией от концентрации включений и не превосходит наибольшей эффективности компонент [10, 26, 27]. Для электро- и теплопроводности композитных сред для усредненных значений этих величин могут быть получены более точные оценки. А именно, эффективная теплопроводность композита лежит между взвешенным средним и взвешенным гармоническим теплопроводностей компонент [20]. Аналогичные оценки справедливы для сопротивления и электропроводности. Важным обстоятельством является то, что эти оценки являются абсолютными и не зависят от модели усреднения. По-видимому, эффективные значения термоэдс и термоэлектрической добротности также могут быть оценены подобным образом. Отсюда следует, что для сред, которые позволяют использовать приближение эффективной среды, не следует ждать увеличения термоэлектрической добротности. Для увеличения числа Иоффе следует использовать зависимость кинетических коэффициентов от размеров для наноразмерных включений (наноструктурирование [6, 10, 11]). Так, для наноструктурированных кремниевых нанопроволок параметр ZT увеличился в 60 раз по сравнению с объемным материалом [40]. В наноструктурированном материале имеется множество границ между наночастицами, поэтому естественно ожидать существенного уменьшения фононной теплопроводности по сравнению с исходными материалом. Рассеяние фононов на границах нановключений размером 10–20 нм в твердом растворе Bi_2Te_3 может уменьшить теплопроводность кристаллической решетки на 20–30 %

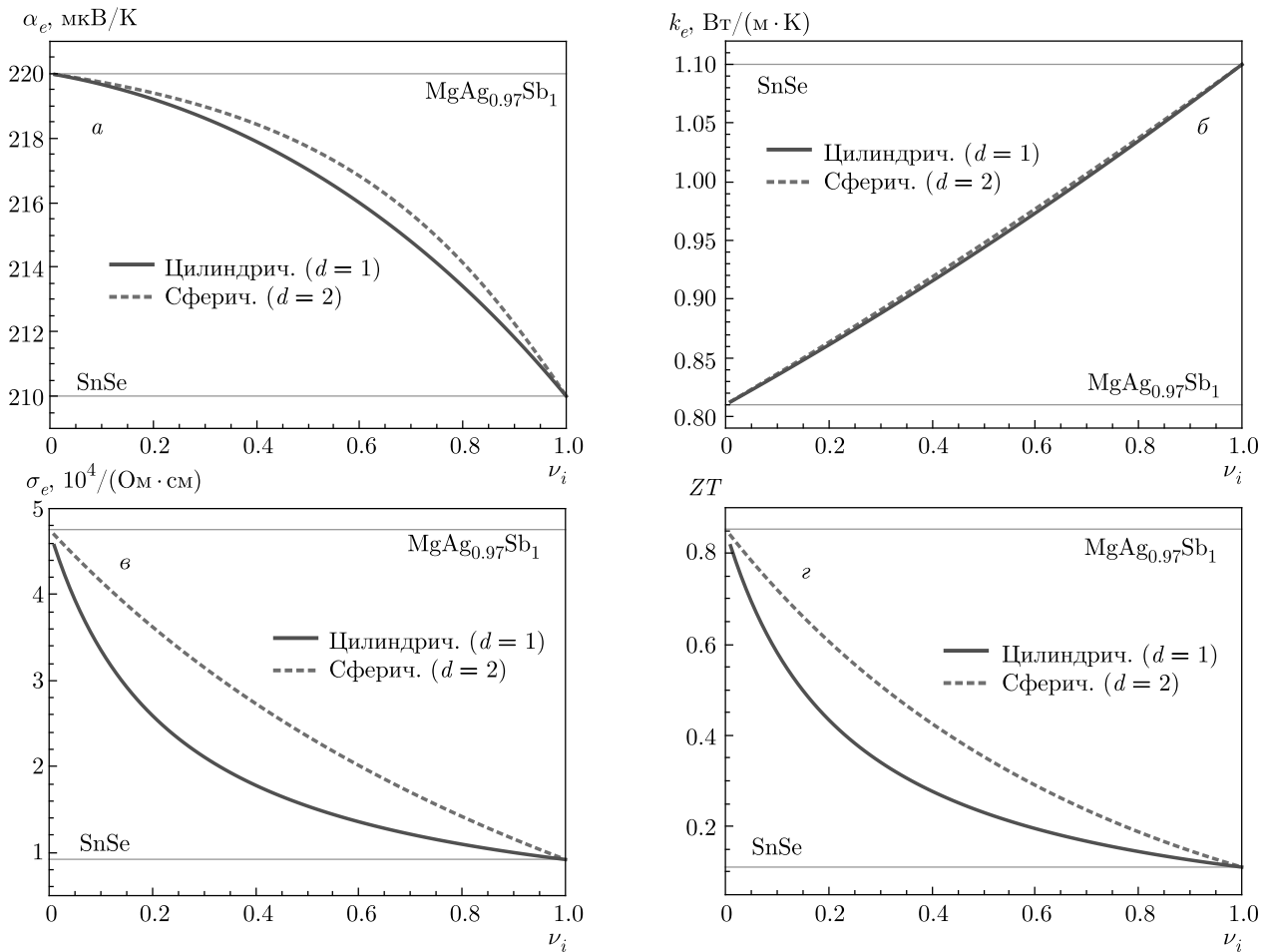


Рис. 4. Зависимости приведенной дифференциальной термоэдс α_e (а), теплопроводности k_e (б), электропроводности σ_e (в), термоэлектрической эффективности ZT (з) от концентрации включений различной формы при $T = 300$ К

[19]. При этом изменение электропроводности на 10–15 % меньше, что приводит к увеличению отношения σ/k и термоэлектрической добротности. Несомненно, что аналогичный эффект должен иметь место для случая различных материалов нановключений и матрицы.

4. ВЫВОДЫ

Систематическое использование термоэлектрического потенциала Φ позволило перейти от системы уравнений к одному уравнению, содержащему только этот потенциал. В результате удалось упростить описание различного вида включений в термоэлектрической среде. Основными преимуществами описанного выше подхода к описанию термоэлектрических явлений является простота, строгая обоснованность, возможность модификации. Пред-

ложенная модель не является полной и не объясняет зависимость свойств композитной среды от размеров включений, которая наблюдается в эксперименте. Ввиду этого первоочередной задачей теории является исследование этой зависимости. Необходимым условием является учет трех основных механизмов, способствующих увеличению термоэлектрической добротности: рассеяние фононов на границах включений, энергетическая фильтрация носителей вследствие наличия потенциальных барьеров между включениями, туннелирование электронов между наноструктурными элементами.

Задача усреднения термоэлектрических сред является более сложной, чем близкая к ней задача нахождения эффективной диэлектрической проницаемости. Вызвано это как наличием взаимодействия теплового и электростатического поля, так и нелинейностью уравнений термоэлектричества.

Основное нелинейное слагаемое, с физической точки зрения, есть джоулево тепло, пропорциональное квадрату электрического тока. В настоящей работе ток считается малым, что позволяет пренебречь указанным слагаемым. При данном допущении удается строго доказать, что эффективная термоэлектрическая добротность слоистых композитов заключена между добротностями отдельных слоев, т.е. не может быть больше, чем максимальная добротность слоя. Значит, увеличения добротности можно ожидать только от ламинатных композитов с толщиной слоев меньшей 20 нм. Для описания таких структур нужно учитывать дополнительные эффекты. Основным недостатком тонкослойных структур является трудоемкость и высокая стоимость их изготовления. Более перспективными, на наш взгляд, являются волокнистые и зернистые композиты. Проведенные расчеты показали явную зависимость усредненных свойств от геометрии включений. При выбранном соотношении термофизических характеристик матрицы и включения наибольшая эффективность достигается, когда включения имеют шарообразную форму. Таким образом, наиболее перспективным материалом для высокопроизводительных термоэлектрических охладителей и генераторов являются зернистые композитные наноструктуры.

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 19-79-10074).

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. V. Sinyavsky and V. M. Brodyansky, *Ferroelectrics* **131**, 321 (1992).
2. A. M. Tishin and Y. I. Spichkin, *The Magnetocaloric Effect and its Applications*, CRC Press, Boca Raton (2016).
3. I. A. Starkov and A. S. Starkov, *IEEE Trans. Ultrason. Ferr.* **61**, 1357 (2014).
4. А. Ф. Иоффе, *Полупроводниковые термоэлементы*, Изд-во АН СССР, Москва–Ленинград (1960).
5. D. M. Rowe, *CRC Handbook of Thermoelectrics*, CRC Press, Boca Raton (1995).
6. А. В. Дмитриев, И. П. Звягин, *УФН* **180**, 821 (2010).
7. I. A. Starkov and A. S. Starkov, *Int. J. Solids Struct.* **100**, 187 (2016).
8. N. Mathur and A. Mischenko, US Patent No. WO2006056809A1 (2006).
9. U. S. Ghoshal, U.S. Patent No. 6.595.004 (2003).
10. Л. П. Булат, В. Б. Освенский, Ю. Н. Пархоменко, Д. А. Пшеная-Северин, *ФТТ* **54**, 2036 (2012).
11. А. А. Снарский, А. К. Сарычев, И. В. Безсуднов, А. Н. Лагарьков, *ФТП* **46**, 677 (2012).
12. M. Martin-Gonzalez, O. Caballero-Calero, and P. Diaz-Chao, *Renew. Sust. Energy Rev.* **24**, 288 (2013).
13. R. Venkatasubramanian, E. Siivola, T. Colpitts, and B. O'quinn, *Nature* **413**, 597 (2001).
14. W. Xie, X. Tang, Y. Yan, Q. Zhang, and T. M. Tritt, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 102111 (2009).
15. Л. А. Молотков, *Исследование распространения волн в пористых и трещиноватых средах на основе эффективных моделей Био и слоистых сред*, Наука, Санкт-Петербург (2001).
16. А. С. Старков, И. А. Старков, *ЖЭТФ* **146**, 980 (2014).
17. I. A. Starkov and A. S. Starkov, *Sol. St. Commun.* **226**, 5 (2016).
18. Л. П. Булат, Д. А. Пшеная-Северин, *ФТТ* **52**, 452 (2010).
19. Л. П. Булат, И. А. Дробкин, В. В. Каратаев, В. Б. Освенский, Д. А. Пшеная-Северин, *ФТТ* **52**, 1712 (2010).
20. Г. Н. Дульнев, Ю. П. Заричняк, *Теплопроводность смесей и композиционных материалов: Справочная книга*, Энергия, Ленинград (1974).
21. Б. Я. Балагуров, *ФТП* **16**, 259 (1982).
22. Y. Yang, S. H. Xie, F. Y. Ma, and J. Y. Li, *J. Appl. Phys.* **111**, 013510 (2012).
23. I. A. Starkov and A. S. Starkov, *J. Nanophotonics* **10**, 033503 (2016).
24. J. P. Straley, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **14**, 2101 (1981).
25. D. J. Bergman and O. Levy, *J. Appl. Phys.* **70**, 6821 (1991).
26. P. Wang, B. L. Wang, K. F. Wang, H. Hirakata, and C. Zhang, *Int. J. Eng. Sci.* **142**, 158 (2019).
27. I. A. Starkov and A. S. Starkov, *Int. J. Solids Struct.* **202**, 226 (2020).

28. S. R. De Groot and P. Mazur, *Non-Equilibrium Thermodynamics*, Courier Corp. (2013).
29. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1992).
30. И. Пригожин, Д. Кондепуди, *Современная термодинамика*, Мир, Москва (2002).
31. А. И. Ансельм, *Основы статистической физики и термодинамики*, Наука, Москва (1973).
32. В. И. Смирнов, *Курс высшей математики*, т. IV, Наука, Москва (1974).
33. I. A. Starkov and A. S. Starkov, *Int. J. Solids Struct.* **160**, 32 (2019).
34. L. P. Bulat, I. A. Drabkin, V. V. Karatayev, V. B. Osvenskii, Y. N. Parkhomenko, D. A. Pshenay-Severin, and A. I. Sorokin, *J. Electron. Mater.* **43**, 2121 (2014).
35. Z. Soleimani, S. Zoras, B. Ceranic, S. Shahzad, and Y. Cui, *Sustainable Energy Technologies and Assessments* **37**, 100604 (2020).
36. Z. Liu, J. Shuai, J. Mao, Y. Wang, Z. Wang, W. Cai, J. Sui, and Z. Ren, *Acta Mater.* **102**, 17 (2016).
37. G. Joshi, H. Lee, Y. Lan, X. Wang, G. Zhu, D. Wang, R. W. Gould, D. C. Cuff, M. Y. Tang, M. S. Dresselhaus, G. Chen, and Z. Ren, *Nano Lett.* **8**, 4670 (2008).
38. X. L. Shi, X. Tao, J. Zou, and Z. G. Chen, *Adv. Sci.* **7**, 1902923 (2020).
39. В. И. Оделевский, *ЖТФ* **21**, 667 (1951).
40. Al. I. Hochbaum et al., *Nature* **451**, 163 (2008).

АКТИВАЦИОННЫЙ ПРЫЖКОВЫЙ ТРАНСПОРТ В НЕМАТИЧЕСКИХ ПРОВОДЯЩИХ АЭРОГЕЛЯХ

В. И. Цебро^{a,b*}, *Е. Г. Николаев*^{b**}, *Л. Б. Луганский*^b, *М. И. Кутузов*^c,
Р. А. Хмельницкий^a, *А. А. Тонких*^d, *А. И. Харьковский*^e

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

^b *Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук
119334, Москва, Россия*

^c *Metallurg Engineering Ltd.
11415, Tallinn, Estonia*

^d *Институт общей физики им. А. М. Прохорова Российской академии наук
119991, Москва, Россия*

^e *Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина Российской академии наук
142190, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 27 сентября 2021 г.,
после переработки 13 октября 2021 г.
Принята к публикации 13 октября 2021 г.

Исследованы транспортные свойства нематических аэрогелей, состоящих из нановолокон $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ с высокой степенью ориентации, покрытых графеновой оболочкой с большим количеством дефектов. Температурные зависимости электросопротивления в диапазоне 9–40 К строго следуют формуле для прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка, в которой показатель степени α меняется от 0.4 до 0.9 при уменьшении числа слоев в графеновой оболочке от 4–6 до 1–2. Зависимость α от толщины оболочки можно объяснить одновременным изменением размерности прыжкового транспорта и характера зависимости плотности локализованных состояний от энергии вблизи уровня Ферми. Приближение α к единице при минимальной толщине графеновой оболочки свидетельствует о постепенном переходе от транспорта с переменной длиной прыжка к прыжковому транспорту на ближайшие соседние места. Измеренное при $T = 4.2$ К магнитосопротивление является отрицательным, существенно возрастает с уменьшением толщины графеновой оболочки и с хорошей точностью аппроксимируется формулой для случая слабой локализации. При этом значения длины фазовой когерентности находятся в разумном соотношении с размером графеновых зерен. Исследованные проводящие аэрогели дополняют уже известный набор материалов, в которых при низких температурах наблюдается прыжковый электронный транспорт, что свойственно средам с сильной локализацией носителей заряда, и одновременно отрицательное магнитосопротивление, обычно проявляющееся в условиях слабой локализации.

DOI: 10.31857/S0044451022020122

1. ВВЕДЕНИЕ

Среди всего многообразия аэрогелей выделяются нематически упорядоченные системы, состоящие из почти параллельных друг другу наноразмер-

ных волокон диаметром 5–50 нм и длиной порядка нескольких сантиметров [1, 2]. Сильная анизотропия таких аэрогелей дает возможность исследовать ряд фундаментальных физических явлений в средах, заполняющих аэрогель, как это, например, сделано в работах, посвященных квантовым свойствам сверхтекучего ^3He [3, 4]. С другой стороны, интерес могут представлять и свойства самого нематически упорядоченного аэрогеля, если, например, сделать его токопроводящим. В упомянутых выше работах

* E-mail: v.tsebro@mail.ru

** E-mail: nikolaev@kapitza.ras.ru

речь идет об аэрогелях на основе $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$. Данный материал под названием нафен изготавливается, в частности, фирмой ANF Technology [5]. В дальнейшем эта фирма развила подобную технологию изготовления аэрогеля на основе силиката алюминия $\text{Al}_2\text{O}_3\cdot\text{SiO}_2$ (так называемый муллит). Отработанная в последнее время технология осаждения углерода на поверхность нановолокон нафена/муллита методом CVD (см. [6–8]) позволяет получить токопроводящие образцы аэрогеля. В результате такой графенизации на поверхности нановолокон аэрогеля образуется оболочка из нескольких графеновых слоев с большим числом дефектов.

В настоящей работе исследовалась проводимость образцов муллита, графенизация которых проводилась методом CVD. По аналогии с рядом исследованных ранее различных неупорядоченных углеродосодержащих систем [9–13], в которых при низких температурах имеет место электрический транспорт прыжкового типа, можно было ожидать, что и в данном случае будет наблюдаться прыжковая проводимость, которая в силу специфики структуры этих аэрогелей может иметь свои особенности.

Температурная зависимость проводимости в области низких температур при прыжковом механизме, когда преобладают прыжки с переменной длиной (VRH), описывается известным выражением [14, 15]:

$$\sigma(T) = \sigma_0 \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^\alpha \right], \quad (1)$$

$$T_0 = \frac{\beta}{g(\mu)\xi^d}, \quad (2)$$

где $\alpha = 1/(1+d)$, d — размерность системы, $g(\mu)$ — плотность локализованных состояний на уровне Ферми, ξ — изотропная длина локализации носителей, β — численный коэффициент ($\beta = 21.2$ и 13.8 соответственно для $d = 3$ и 2). Подавляющее большинство экспериментальных работ, посвященных исследованию прыжковой проводимости в различных неупорядоченных средах, относятся к случаям $d = 3$ и 2 , когда согласно (1) по величине α в поведении температурной зависимости проводимости определяют размерность исследуемой системы, и/или, зная размерность, из (2) получают величину ξ по установленной тем или иным способом в других измерениях величине $g(\mu)$, либо наоборот.

Однако уже в самых ранних работах [16, 17] при анализе экспериментальных данных для сильно легированных полупроводников было отмечено, что встречаются различные значения α от 0.25 до

0.7, хотя большинство результатов группируются в трехмерном случае прежде всего около величины 0.25. Чуть ранее в работах [18, 19] было показано, что если плотность локализованных состояний на уровне Ферми не является постоянной, но изменяется с энергией ε (отсчитываемой от уровня Ферми) по закону

$$g(\varepsilon) = g_0|\varepsilon|^n, \quad (3)$$

то в случае произвольной размерности d

$$\alpha = \frac{n+1}{n+d+1}. \quad (4)$$

Отсюда следует, что в случае сильного изменения $g(\varepsilon)$ вблизи уровня Ферми значения α могут быть существенно больше $1/4$ для $d = 3$ (или существенно больше $1/3$ для $d = 2$).

Кроме сильно легированных полупроводников неупорядоченные проводящие среды, в которых наблюдался активационный прыжковый транспорт со значениями α , отличными от «классических» значений $\alpha = 1/4, 1/3$ (или $1/2$)¹, — это прежде всего углеродосодержащие системы различного строения [9–13], проводящие полимеры [20–22], а также поликристаллический графен [23]. Так, в композитных системах «carbon black (CB)-полимер» [9, 10, 13] наблюдаемые значения α находятся в интервале от 0.5 до 0.79, чему дано объяснение в рамках модели суперлокализации электронных состояний во фрактальной структуре [24, 25]. По результатам исследования прыжковой проводимости в поликристаллическом графене [23] наряду со значением $\alpha = 0.33$, характерным для 2D-систем, наблюдались специфические значения $\alpha = 0.41$ и 0.72 . Авторы [23] предполагают, что, хотя графен является 2D-системой, проводимость в данном случае осуществляется за счет прыжков между проводящими границами кристаллитов, при этом ее поведение интерпретируется на основе квазиодномерной модели [26].

Среди работ по проводящим полимерам, низкотемпературный транспорт в которых описывается прыжковым VRH-механизмом [27], следует отметить работу [20], где исследовалась прыжковая проводимость полианилиновой (PANI) сетки в матрице полиметилметакрилата (PMMA), в которой установлено, что выше порога перколяции происходит уменьшение α от 1 до 0.25 с ростом содержания

¹ Случай $\alpha = 1/2$, как известно, это не только одномерный вариант формулы (4), но прежде всего независимо от размерности результат возникновения из-за электрон-электронного взаимодействия кулоновской щели вблизи уровня Ферми (закон Шкловского–Эфроса [14]).

PANI. Предполагается, что большие значения α в этой системе связаны с суперлокализацией волновой функции электронов из-за фрактального характера полианилиновой сетки при приближении к порогу перколяции. Непосредственно вблизи порога перколяции, где $\alpha \approx 1$, имеет место режим прыжков на ближайшие соседние места (NNH). Ниже порога перколяции поведение $\sigma(T)$ соответствует зависимости (1) с $\alpha = 1/2$, характерной для гранулированных металлов [28].

Большая величина $\alpha = 0.65\text{--}0.70$ при $T < 50$ К наблюдалась также в работе [22] для монокристаллов полидиацетилена. Результат объясняется квазиодномерной прыжковой проводимостью с влиянием кулоновского взаимодействия. Выше $T = 50$ К доминирует прыжковый NNH-транспорт ($\alpha = 1$).

В сильно анизотропных образцах проводящих полимеров, таких как тонкие пленки PEDOT:PSS, было обнаружено [29], что $\alpha = 0.25$ для латерального направления (σ_{\parallel}), в то время как $\alpha = 0.81$ для перпендикулярного (вертикального) направления (σ_{\perp}) при отношении $\sigma_{\parallel}/\sigma_{\perp} = 10\text{--}10^3$. Такое поведение было интерпретировано как проявление в латеральном и вертикальном направлениях двух различных режимов прыжкового механизма: VRH для σ_{\parallel} и NNH для σ_{\perp} (несмотря на то, что в последнем случае α заметно меньше единицы). Однако в работе [30] с помощью численного моделирования показано, что по мере того как волновые функции локализованных состояний становятся анизотропными, σ в направлении, где длина локализации становится меньше, в рамках механизма VRH следует формуле (1), при этом величина α может находиться в интервале от $1/4$ до 1, что и объясняет экспериментальные данные для PEDOT:PSS [29].

Нематические проводящие аэрогели, исследованные в настоящей работе, также представляют собой сильно анизотропные материалы, и поэтому интересной задачей несомненно является изучение их транспортных свойств и выяснение соотношения между этими свойствами и строением данных объектов. Электронно-микроскопический анализ показал, что хорошо упорядоченную нановолоконную структуру нематических аэрогелей можно представить как сильно сжатую в поперечном направлении волнистую сетку проводящих нановолокон, контакты между которыми осуществляются на расстояниях, намного превышающих их диаметр. В результате измерений на объемных образцах установлено, что анизотропия удельного сопротивления $\rho_{\perp}/\rho_{\parallel}$ находится в интервале 25–40. Температурная зависимость проводимости этих аэрогелей в интервале

температур от 9 до 40 К весьма строго следует формуле (1) для прыжковой проводимости как в продольном (вдоль наноразмерных волокон), так и в поперечном направлениях. При этом оказалось, что α независимо от направления принимает разные значения, от 0.4 до 0.9, в зависимости от содержания углерода (толщины графеновой оболочки на поверхности нановолокон). В этом смысле данная ситуация принципиально отличается от вышеупомянутого случая анизотропных проводящих полимеров, где установлено наличие двух различных режимов прыжковой проводимости с сильно различающимися значениями α для разных направлений [29, 30]. Понятно, что, поскольку покрытые проводящей оболочкой нановолокна аэрогеля соприкасаются друг с другом на расстояниях, намного превышающих их диаметр, величина α определяется исключительно транспортом вдоль нановолокон, и, следовательно, от направления не зависит.

2. ОБРАЗЦЫ АЭРОГЕЛЕЙ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДЕТАЛИ

В настоящей работе исследовались графенизированные образцы муллита — аэрогеля на основе силиката алюминия ($\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{SiO}_2$). Графенизация образцов, как было выше отмечено, проводилась методом CVD, подобно тому, как это делалось в работах [6–8]. В зависимости от времени CVD-процесса приготавливались образцы с различным содержанием углерода, которое определялось методом XPS в процессе электронной микроскопии образцов, при этом за окончательную величину принималось усредненное по многим точкам значение содержания углерода. В результате были исследованы образцы с содержанием углерода: 14 ат. % (AG-14), 20 ат. % (AG-20), 31 ат. % (AG-31) и 44 ат. % (AG-44).

Хорошая проводимость графенизированных образцов позволяла получать их изображения методом сканирующей электронной микроскопии, не прибегая к использованию дополнительных токопроводящих покрытий. Как видно на таких изображениях (рис. 1), волнистые и слегка скрученные между собой нановолокна, на нижней границе масштаба имеющие диаметр 10–15 нм, расположены примерно на таких же расстояниях между собой и практически параллельны друг другу. Следует отметить фрактальный характер упаковки нановолокон аэрогеля, который хорошо виден на изображениях торца отдельного нановолоконного фрагмента. Так, на рис. 2 показаны электронно-микро-

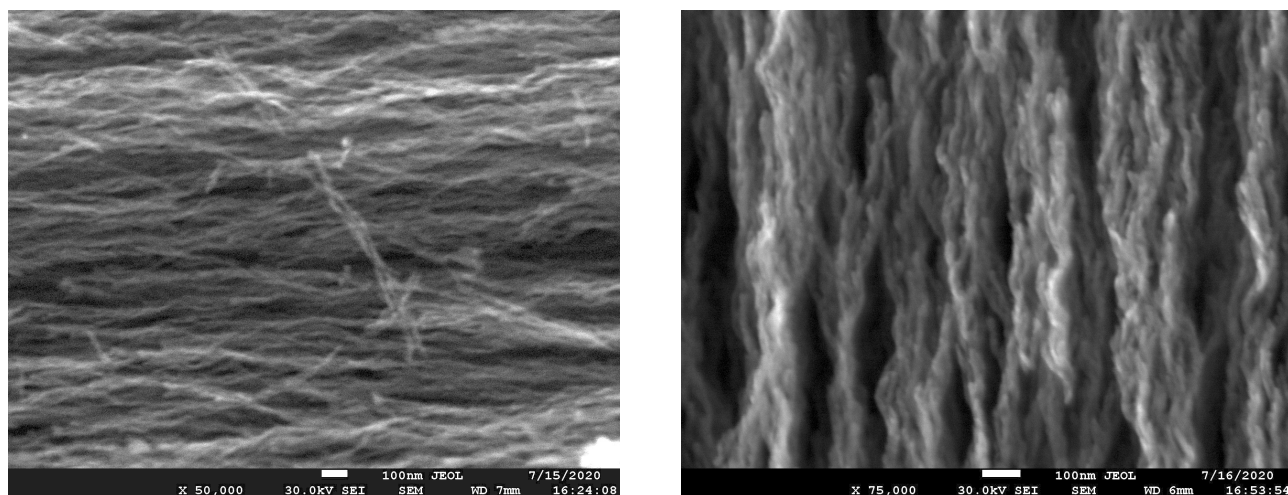


Рис. 1. Электронно-микроскопические изображения нановолоконной структуры образцов аэрогелей AG-14 (слева) и AG-44 (справа)

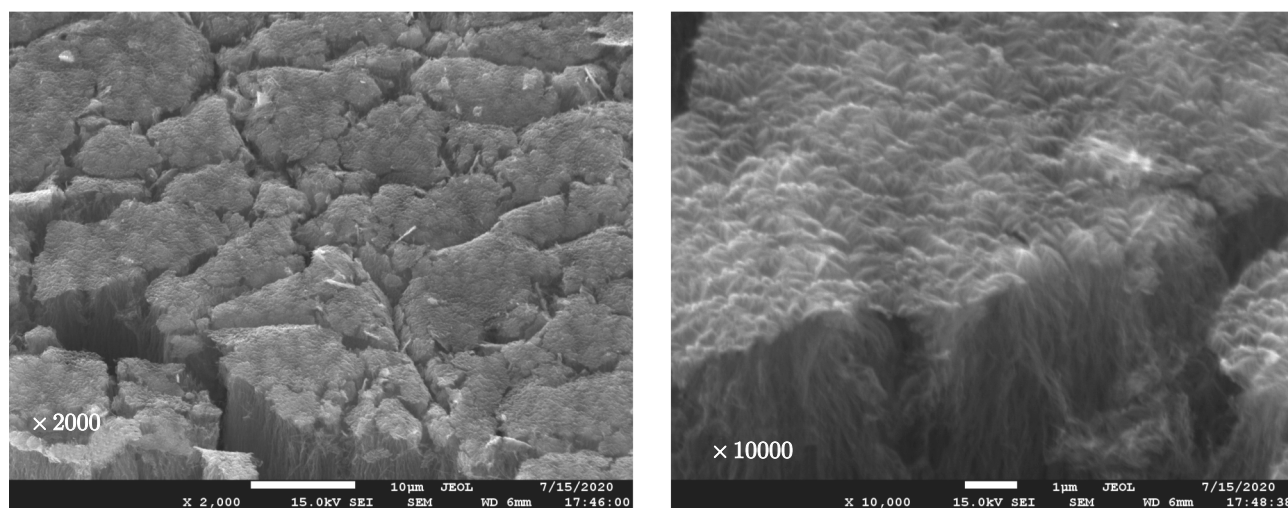


Рис. 2. Электронно-микроскопические изображения торца нановолоконного фрагмента аэрогеля AG-44 при различном увеличении, свидетельствующие о фрактальном характере упаковки нановолокон

скопические изображения торца такого фрагмента диаметром порядка 150 мкм при разном увеличении. Конусные образования, хорошо видные на месте разлома при увеличении 10000, образованы смыкающимися в одной фрактальной группе нановолокнами. Как видно на рис. 1 и рис. 2, между группами собранных в пучок нановолокон существуют объемные пустоты, и такая картина воспроизводится при изменении масштаба на два порядка величины.

Если, исходя из полученных методом XPS данных по содержанию в образцах углерода и среднего диаметра нановолокон, оценить толщину графеновой оболочки, то получается, что она составляет

1–2 графеновых слоя для образцов с минимальным содержанием углерода (AG-14) и 4–6 слоев для образцов с максимальным содержанием (AG-44).

Как известно, мощным инструментом характеристики дефектного состояния в различных графеноподобных системах является спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС) [31–37]. На рис. 3 представлены спектры КРС для исследованных нами образцов аэрогелей. Как видно, на полученных спектрах присутствуют характерные фоновые моды для sp^2 -модификаций углерода (графит, графен, углеродные нанотрубки и т. п.) [31]. Такие особенности спектра, как положение мод, их отно-

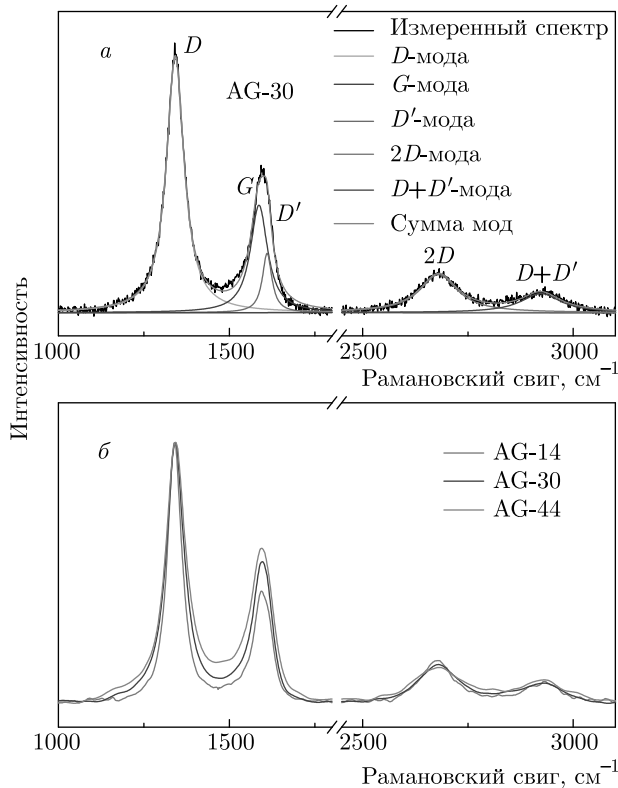


Рис. 3. Спектры комбинационного рассеяния света: *a* — спектр образца AG-30: измеренный спектр (черная линия), цветными линиями показаны вклады отдельных мод при их аппроксимации лоренцианами, итоговое приближение спектра показано красной линией; *б* — нормализованные спектры КРС трех образцов аэрогелей с различным содержанием углерода, $\lambda = 532$ нм

сительные интенсивности и ширины пиков, обычно используются для определения конкретной модификации графитоподобной системы, в том числе и наноглерода. В нашем случае наблюдаются основные характерные пики графена: *D*-мода с частотами около 1340 см^{-1} , *G*-мода с частотами около 1588 см^{-1} и *2D*-мода около 2680 см^{-1} . Высокая относительная интенсивность *D*-моды обычно говорит о большом количестве дефектов, как одиночных, так и протяженных [7, 32–34]. Маркером высокой дефектности (или нанодисперсности) является также низкая относительная интенсивность *2D*-моды [35].

Для характеристики степени дефектности в углеродном материале аэрогелей и оценки среднего размера графеновых зерен на поверхности нановолокон L_a нами использовалась величина отношения интенсивностей *D*-полосы к *G*-полосе (I_D/I_G) [31, 36, 37]. Для оценки L_a применялась формула [36]

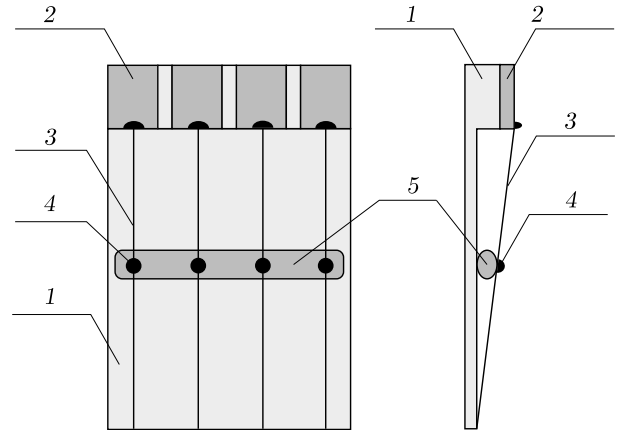


Рис. 4. Конструкция держателя образцов в форме нановолоконного фрагмента: 1 — основание держателя (стеклотекстолит); 2 — контактные площадки; 3 — контактные провода; 4 — самотвердеющая проводящая серебряная паста; 5 — образец аэрогеля

$$L_a(\text{нм}) = 2.4 \cdot 10^{-10} \lambda^4 (I_D/I_G)^{-1}, \quad (5)$$

где λ — длина волны возбуждения КРС (в нашем случае 532 нм). Как следует из табл. 1, в образцах AG-14 и AG-30 отношение (I_D/I_G) имеет близкие значения, а именно 2.6 и 2.4 соответственно, в то время как величина (I_D/I_G) для образца AG-44 составляет 1.8. Согласно (5) оценка L_a дает значение 7.4 нм для AG-14, которое увеличивается до 10.7 нм для AG-44. Из данных, представленных в табл. 1, следует также отметить заметное уширение *D*-, *G*- и *2D*-мод по мере перехода от образцов AG-14 к AG-44, что может быть интерпретировано как следствие повышения слоистости графеноподобной системы. Однако численная оценка количества графеновых слоев не представляется возможной из-за высокой дефектности.

Измерения электросопротивления образцов аэрогелей проводились нами в двух вариантах:

- 1) стандартным четырехконтактным методом на отдельных фрагментах материала с большим отношением длины к его поперечному размеру;
- 2) модифицированным методом Шнабеля [38] на больших объемных образцах сантиметрового размера, имеющих форму прямоугольного параллелепипеда.

В первом варианте измерения проводились на отдельных фрагментах, представляющих собой образование с большим числом нановолокон. Поперечное сечение таких фрагментов было порядка 0.05 мм^2 при длине 6–8 мм. Для каждого образ-

Таблица 1. Результаты анализа представленных на рис. 3 спектров КРС для образцов аэрогелей с различным содержанием углерода. Приведены параметры пиков D , G , D' и $2D$ при их аппроксимации лоренцианами, отношение интенсивностей D -полосы к G -полосе (I_D/I_G), а также оценка значений среднего размера графеновых зерен L_a согласно формуле (5)

	AG-14			AG-30			AG-44		
мода	центр	ширина	высота	центр	ширина	высота	центр	ширина	высота
D	1339.5	48.9	28.3	1341.5	62.8	27.5	1343.1	77.6	19.1
G	1589.7	54.7	10.9	1586.3	61.0	11.6	1588.0	81.0	10.5
D'	1614.5	24.5	4.4	1610.1	33.4	6.4	1608.8	30.6	2.5
$2D$	2677.6	84.6	4.7	2680.0	108.6	4.1	2681.3	131.5	2.5
$D + D'$	2929.0	99.5	2.1	2923.3	114.4	2.1	2923.6	112.3	1.5
I_D/I_G	2.6			2.4			1.8		
L_a , нм	7.4			8.1			10.7		

ца изготавливался отдельный специальный держатель (рис. 4) из натянутых под малым углом к плоскости основания держателя (1) тонких (диаметром 0.06–0.08 мм) луженых медных проволок (3), которые служили подводами к токовым и потенциальным контактам к образцу. После помещения образца (5) в пространство между контактными проволоками и плоскостью основания держателя с обратной стороны контактных проволок наносилась малая капля проводящей самотвердеющей серебряной пасты (4) для образования стабильного контакта. Понятно, что в такой геометрии эксперимента измеряемая величина электросопротивления определяется, главным образом, продольной (вдоль направления нановолокон) компонентой удельного сопротивления ρ_{\parallel} .

Второй вариант измерений ρ модифицированным методом Шнабеля [38] на больших объемных образцах аэрогелей, имеющих форму прямоугольного параллелепипеда, позволил определить абсолютные значения компонент удельного сопротивления, как в продольном (ρ_{\parallel}), так и поперечном (ρ_{\perp}) направлениях. В известном методе Шнабеля [39, 40] предлагалось решение для образца в виде плоскопараллельной проводящей пластины заданной толщины и ширины, но бесконечной длины. При этом два точечных контакта на одной стороне образца и два на противоположной стороне расположены по центру точно друг против друга. Описанная нами ранее в методической работе [38] модификация этого метода состоит в нахождении способа решения задачи о величине удельного сопротивления ρ для анизотроп-

ного образца конечных размеров. Основные особенности использования этой методики в применении к нашему случаю изложены в Приложении.

Следует отметить, что если до графенизации образцы муллита являются достаточно прочными образованиями, которым механической обработкой при необходимости можно придать необходимые размеры и форму, то после процесса графенизации они становятся предельно непрочными, распадающимися на отдельные фрагменты при слабом механическом воздействии. Это является следствием того, что связь между нановолокнами графенизированного муллита после того, как они покрываются графеновой оболочкой, становится очень слабой. Придать такому высокопористому проводящему материалу необходимые размеры и форму, а также осуществить в нужных местах надежные, стабильные во времени, электрические точечные контакты представляло определенную проблему, которую, в известной мере, в данной работе удалось решить.

Для измерений были приготовлены объемные образцы AG-14 размером $10 \times 3 \times 2.7$ мм³, AG-30 ($14 \times 7 \times 6$ мм³) и AG-44 ($9.8 \times 3 \times 2.7$ мм³). Для каждого из этих образцов изготавливалась отдельная контактная сборка с размерами, определяемыми размерами объемного аэрогеля. Конструкция такой сборки представлена на рис. 5. В данной конструкции образец аэрогеля (5) помещался между двумя накладками (2) с коническими отверстиями для размещения медных конических контактов (3). Перед размещением контакта в крышке на его острие помещалось небольшое количество самотвердеющей се-

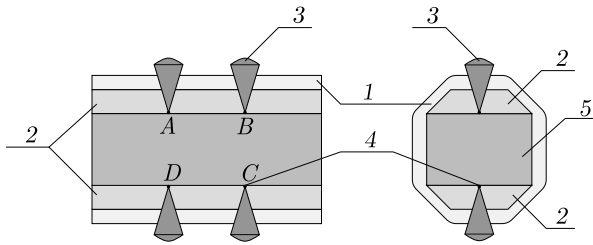


Рис. 5. Конструкция контактной сборки для измерений двух компонент удельного сопротивления по модифицированному методу Шнабеля: 1 — термоусадочная оболочка; 2 — накладки с контактами; 3 — конические контакты; 4 — самотвердеющая проводящая серебряная паста; 5 — объемный образец аэрогеля, A, B, C, D — обозначения точечных контактов, используемые в Приложении

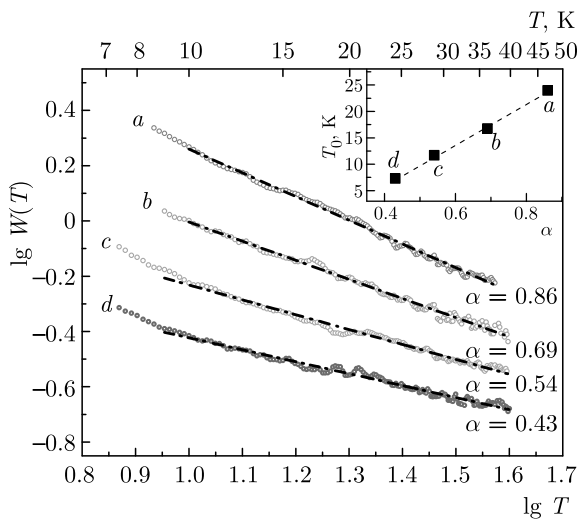


Рис. 6. Температурные зависимости логарифмической производной кондактанса для четырех образцов нановолоконных фрагментов с разным содержанием углерода: a — AG-14, b — AG-20, c — AG-31, d — AG-44. На вставке показана зависимость T_0 от α

ребряной пасты (4). В результате поперечный размер области точечного контакта к образцу не превышал 0.1 мм. Для удержания всей конструкции, придания ей целостности и необходимой прочности, контактная сборка помещалась в термоусадочную оболочку (1).

Сборки с образцами крепились на массивном медном термоблоке, который размещался в камере с теплообменным газообразным гелием при давлении 5–10 Торр в криостате для промежуточных температур. Температурные зависимости условных сопротивлений $R_1(T)$ и $R_2(T)$ (см. Приложение) измерялись при очень медленном нагреве термоблока с коммутацией измерительного тока для исклю-

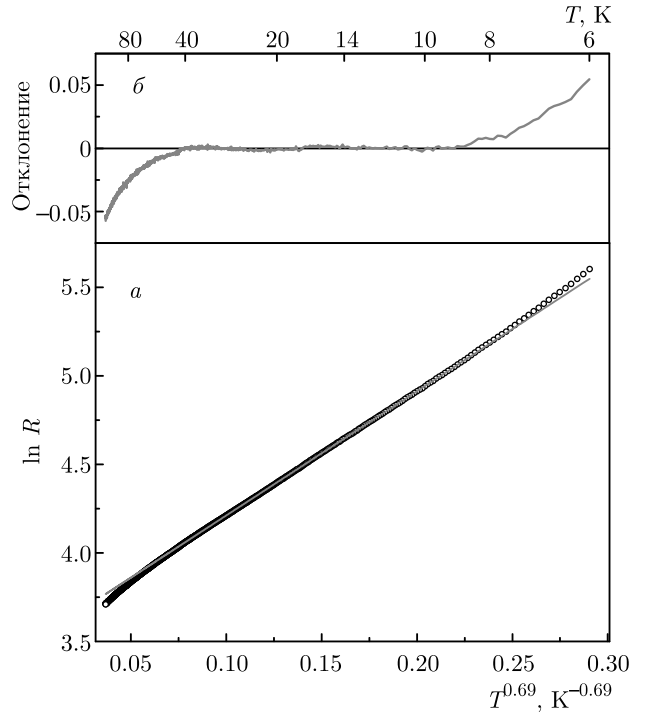


Рис. 7. Образец нановолоконного фрагмента AG-20: a — зависимость логарифма сопротивления от $T^{-0.69}$; б — отклонение экспериментальных точек от линейной зависимости

чения термо- и контактных эдс. Скорость отогрева менялась от 0.05 К/мин. вблизи $T = 5$ К до 0.2 К/мин. вблизи $T = 40$ К. Несмотря на малые скорости отогрева, при измерениях на больших объемных образцах в интервале температур от 20 до 26 К из-за плохой теплопроводности высокопористого аэрогеля имело место переохлаждение образцов вследствие десорбции теплообменного газа. Поэтому измеренные в этом интервале данные исключались из рассмотрения (см. ниже рис. 9). При измерениях на фрагментах AG с малым поперечным размером переохлаждения образцов в области десорбции теплообменного газа не наблюдалось (рис. 6 и 7).

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Температурные зависимости проводимости аэрогелей измерялись в интервале температур от 5 до 50 К, поскольку именно в этой области температур они следуют выражению (1) с различными значениями α и T_0 . Для обработки данных с целью определения величин α и T_0 использовался подход, впервые предложенный в работах [17, 41] для систем, в

Таблица 2. Параметры α и T_0 для четырех образцов нановолоконных фрагментов: AG-14, AG-20, AG-31 и AG-44.

	α	T_0, K
AG-14	0.86	24.0
AG-20	0.69	16.8
AG-31	0.54	11.7
AG-44	0.43	7.3

которых прыжковый VRH-транспорт наблюдается в сравнительно небольшом интервале температур. При этом подходе в логарифмических координатах строится температурная зависимость логарифмической производной проводимости $W(T)$, определяемой как

$$W(T) = T[d \ln \sigma(T)]/dT = \Delta \ln \sigma(T)/\Delta \ln T. \quad (6)$$

Прямолинейный участок зависимости $W(T)$ определяет область температур, в которой строго выполняется закон (1), а требуемые параметры α и T_0 находятся из уравнений

$$\begin{aligned} \lg W(T) &= A - \alpha \lg T, \\ A &= \alpha \lg T_0 + \lg \alpha. \end{aligned} \quad (7)$$

На рис. 6 приведены температурные зависимости логарифмической производной кондактанса

$$W(T) = \Delta \ln G(T)/\Delta \ln T,$$

где $G = R^{-1}$, для четырех фрагментов AG с разным содержанием углерода. Как следует из приведенных данных, величина α , определяемая, согласно (7), наклоном прямолинейных участков на рис. 6, монотонно увеличивается по мере уменьшения толщины графеновой оболочки нановолокон аэрогеля (при переходе от образца AG-44 к образцу AG-14). В табл. 2 приведены параметры α и T_0 для всех четырех образцов. Связь между этими параметрами носит хорошо выраженный линейный характер (см. вставку на рис. 6). Отметим, что для всех образцов строгое следование температурной зависимости проводимости выражению (1) наблюдается в температурном интервале от 9 до 40 К, что в качестве примера иллюстрируется данными, приведенными на рис. 7 для образца AG-20, где показаны зависимость $\ln R$ от $T^{-0.69}$ и отклонение экспериментальных точек от соответствующей линейной зависимости.

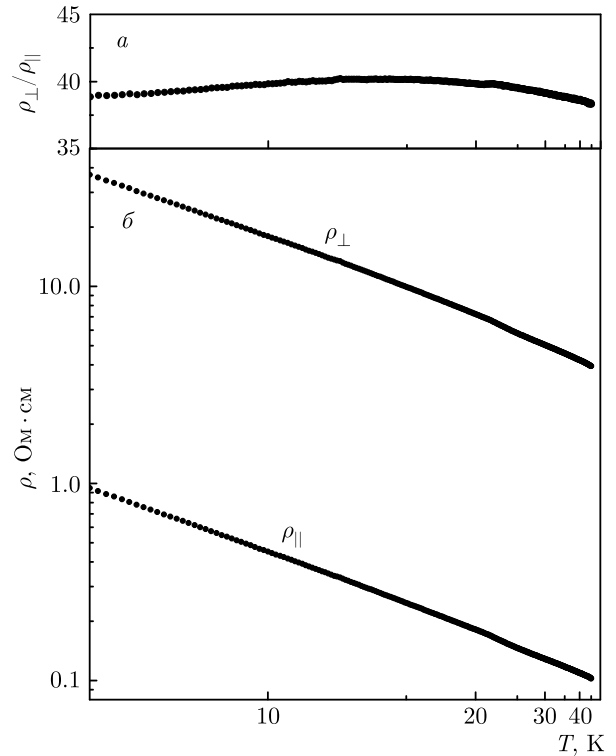


Рис. 8. Измеренные методом Шнабеля температурные зависимости анизотропии удельного сопротивления (а) и его двух компонент ρ_{\parallel} и ρ_{\perp} (б) для объемного образца AG-14

Как было отмечено выше, измерения температурных зависимостей удельного сопротивления на больших объемных образцах аэрогелей, имеющих форму прямоугольного параллелепипеда, проводились по модифицированному методу Шнабеля на образцах составов AG-14, AG-31 и AG-44. На рис. 8 в логарифмических координатах приведены температурные зависимости продольной (ρ_{\parallel}) и поперечной (ρ_{\perp}) компонент удельного сопротивления, а также величины анизотропии проводящей среды $\rho_{\perp}/\rho_{\parallel}$ для объемного образца AG-14. Видно, что обе компоненты, сильно различающиеся по величине, изменяются с температурой подобным образом, и величина анизотропии зависит от температуры слабо.

На рис. 9 в качестве примера обработки данных, полученных на объемных образцах, приведены температурные зависимости логарифмической производной поперечной компоненты проводимости

$$W(T) = \Delta \ln \sigma_{\perp}(T)/\Delta \ln T$$

для образца AG-14. Видно, что за исключением участка температур, где происходит переохлаждение образца из-за десорбции теплообменного газа (от 20 до 26 К), данные хорошо укладываются на

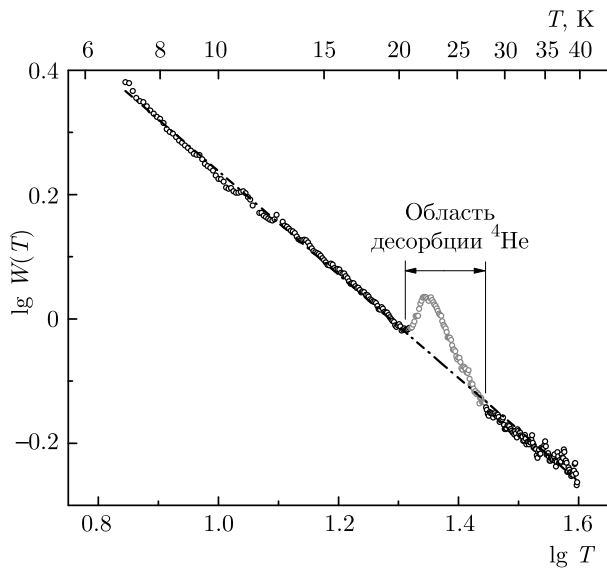


Рис. 9. Температурные зависимости логарифмической производной поперечной компоненты проводимости для объемного образца AG-14

Таблица 3. Параметры α_{\parallel} , α_{\perp} , T_0^{\parallel} и T_0^{\perp} для объемных образцов AG-14, AG-31 и AG-44

	α_{\parallel}	α_{\perp}	T_0^{\parallel} , К	T_0^{\perp} , К
AG-14	0.90	0.81	22.6	27.6
AG-31	0.58	0.58	25.7	27.1
AG-44	0.49	0.49	5.8	6.9

прямую линию, наклон которой определяет величину $\alpha_{\perp} = 0.81$.

В табл. 3 приведены значения параметров α и T_0 для обеих компонент проводимости объемных образцов аэрогелей всех трех исследованных составов, а в табл. 4 абсолютные значения удельного сопротивления и величины анизотропии при двух температурах в начале и в конце температурного интервала, где температурная зависимость проводимости следует формуле (1).

На рис. 10 собраны воедино значения α , полученные на четырех фрагментах AG и на объемных образцах для обеих компонент проводимости. Видно, что все данные группируются вокруг единой зависимости α от содержания углерода. На объемных образцах значения α_{\parallel} и α_{\perp} в точности совпадают друг с другом, кроме образца AG-14, где наблюдается некоторое различие, внутрь которого попадает значение α для образца в виде длинноразмерного фрагмента (ясно, что в этом случае измеряется

Таблица 4. Значения ρ_{\parallel} , ρ_{\perp} и величины анизотропии $\rho_{\perp}/\rho_{\parallel}$ при температурах 4.5 К и 45 К для объемных образцов AG-14, AG-31 и AG-44

	T , К	ρ_{\parallel} , Ом·см	ρ_{\perp} , Ом·см	$\rho_{\perp}/\rho_{\parallel}$
AG-14	4.5	3.28	130.7	39.8
	45	0.103	3.94	38.3
AG-31	4.5	4.99	137.5	27.5
	45	0.58	15.3	26.3
AG-44	4.5	0.81	39.0	48.2
	45	0.35	15.9	45.4

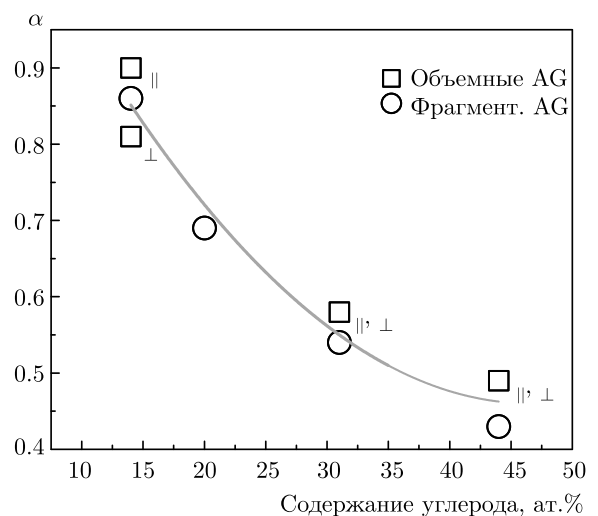


Рис. 10. Зависимость величины α от содержания углерода

преимущественно величина α_{\parallel}). Равенство значений α_{\parallel} и α_{\perp} для объемных образцов указывает на то, что величина α определяется транспортом по графеновой оболочке вдоль поверхности нановолокон аэрогеля. Анизотропия же эффективной объемной проводимости, измеренная модифицированным методом Шнабеля, определяется морфологией волокнистой структуры, а именно, фактором пересечения нановолокон друг с другом на расстояниях, значительно превышающих их диаметр.

Таким образом, исследованные в настоящей работе нематические проводящие аэрогели из графенизированного муллита являют собой крайне редкий случай системы, в которой в рамках неизменной морфологии наблюдается монотонное изменение α в зависимости от одного параметра — содержания в образцах углерода или, другим словами, толщи-

ны графеновой оболочки нановолокон аэрогеля²⁾. Для объяснения этой зависимости следует предположить, что, по-видимому, и в нашем случае справедлива приведенная выше формула (4), при этом по мере увеличения толщины графеновой оболочки значения d и n в формуле (4) меняются от $d = 1$ и $n = 2$ (AG-14) до $d = 3$ и $n = 1$ (AG-44). Если это так, то для самых тонких графеновых оболочек следует рассматривать квазиодномерный VRH-механизм. Теоретически такое рассмотрение для отдельной одномерной цепочки и многих взаимодействующих параллельных цепочек было сделано, например, в работе [26] (так называемая модель FTS), где отмечены случаи $d = 1, 2, 3$ и $n = 0, 1, 2$. На основе FTS-модели были интерпретированы, например, экспериментальные данные по прыжковой проводимости в полупроводниковом поликристаллическом графене с размером кристаллитов от нескольких нанометров до нескольких десятков нанометров [23]. При этом предполагается, что прыжковый квазиодномерный транспорт носителей происходит за счет прыжков между проводящими границами (краями) кристаллитов. Существование таких проводящих границ (преимущественно края в форме “zigzag”) экспериментально показано в работе [42].

В нашем случае одномерный режим прыжковой проводимости может реализовываться, если принять во внимание следующее обстоятельство. Для образца с минимальным содержанием углерода (толщина покрытия 1–2 слоя) средний размер графеновых зерен по результатам КРС составляет 7–8 нм. При этом диаметр нановолокна оказывается сравним с размером зерна. Если рассматривать движение носителей заряда в такой системе как перескоки между зернами (или, как это отмечалось выше, между проводящими границами зерен), то очевидно, что прыжковый транспорт в данном случае должен иметь преимущественно одномерный характер. С увеличением толщины углеродного покрытия движение носителей заряда по графеновой оболочке, по-видимому, уже нельзя рассматривать как одномерное. При этом, как следует из приведенных ниже данных по отрицательному магнитосопротивлению, несмотря на рост среднего размера зерна, общая дефектность системы растёт.

²⁾ В этой связи, из других систем прежде всего следует отметить упомянутую выше работу [20], где величина α возрастала от 0.25 до 1 по мере уменьшения объемной доли полианилиновой сетки в матрице полиметилметакрилата. Кроме того, по результатам работы [23] некоторый набор значений α наблюдался в серии образцов поликристаллического графена.

Большое значение показателя α для образцов с минимальным содержанием углерода может означать, что система приближается к переходу от проводимости в режиме VRH к режиму прыжков на ближайшие соседние места NNN. Аналогичный случай наблюдался в работе [20] при исследовании полианилиновой сетки PANI в матрице PMMA, где увеличение α до единицы происходило при уменьшении содержания полианилина вплоть до порога перколяции. В этой работе установлено, что режим NNN в исследованной ими системе реализуется, когда диаметр нитей PANI уменьшается до величины, сравнимой с характерной длиной прыжка.

В другой работе, где исследованы образцы углеродных аэрогелей с проводящими цепочками углеродных гранул [11], в отличие от нашего случая и упомянутой выше работы, при уменьшении плотности аэрогеля поперечный размер проводящих цепочек остается неизменным, но увеличивается их длина. По мнению авторов, данная система описывается в рамках модели гранулированного металла [28] и величина $\alpha = 1/2$ для всех образцов обусловлена наличием кулоновской щели. При этом переход к одномерному характеру движения носителей происходит, когда при увеличении температуры характерная длина прыжка становится меньше, чем средняя длина проводящих цепочек без самопересечения (средняя длина цепочек между узлами)³⁾. Переход же от режима VRH к режиму NNN происходит, когда длина прыжка становится меньше, чем удвоенный размер гранул.

Обращает на себя внимание полученная нами линейная связь между α и T_0 в формуле (1) (см. вставку на рис. 6). Это означает, что зависимости α и T_0 от эффективной размерности имеют подобный вид. Насколько нам известно, одновременный рост α и T_0 при изменении параметров системы не отмечался ни в одной из опубликованных ранее работ. Единственным исключением является работа [13], где в композитной системе “carbon black (CB)-полимер” при изменении концентрации CB наблюдалась корреляция значений α и T_0 для двух групп образцов с CB разного происхождения. При этом величины α и T_0 в каждой из групп практически не зависят от кон-

³⁾ Здесь следует упомянуть еще одну углеродную систему — так называемые карбины, которые, как предполагается, состоят из цепочек углеродных атомов с *sp*-связями. В образцах карбинов в зависимости от температуры синтеза наблюдается прыжковая проводимость с $\alpha = 1/2, 1/3$ и $1/4$, при этом случай $\alpha = 1/2$ объясняется не наличием кулоновской щели, а одномерным характером прыжкового транспорта (см. работу [43] и ссылки в ней).

центрации СВ, а также не указано, в чем именно состоит различие этих двух групп, и причины такой корреляции не обсуждаются.

Следует отметить также довольно низкие значения T_0 (см. табл. 2, 3), которые (особенно для образцов с большим содержанием углерода) находятся вблизи нижней границы температурного интервала (9–40 К), где температурная зависимость проводимости следует формуле (1). Это может свидетельствовать о большой величине длины локализации носителей ξ . В большом числе случаев для систем с VRH-механизмом прыжковой проводимости оценить величину ξ позволяют измерения магнитосопротивления, поскольку, согласно теории VRH [14, 15], магнитосопротивление положительно (в силу сжатия с полем волновой функции локализованных носителей), и (в не очень сильных магнитных полях)

$$\ln[\rho(B)/\rho(0)] \propto (\xi/L_B)^4 (T_0/T)^{3/(d+1)}$$

(L_B — магнитная длина). Положительное магнитосопротивление в системах с сильной локализацией носителей и VRH-механизмом прыжкового транспорта наблюдалось в самых разных неупорядоченных средах, что позволяло определять величину ξ . Представляло интерес и в нашем случае измерить поведение магнитосопротивления образцов аэрогелей в не очень сильных магнитных полях.

Такие измерения при $T = 4.2$ К в магнитных полях до 2.4 Тл были выполнены на образцах аэрогелей в виде длинноразмерных фрагментов, поскольку в этой геометрии измеряемое магнитосопротивление будет преимущественно поперечным, когда ток через образец течет перпендикулярно вектору магнитного поля. На рис. 11а приведены измеренные зависимости $\Delta R(B)/R(0)$ для образцов AG-14 и AG-44. Видно, что магнитосопротивление в нашем случае является отрицательным, весьма значительным по величине и существенно уменьшается при увеличении содержания углерода.

Как известно (см., например, [44]), отрицательное магнитосопротивление характерно для систем со слабой локализацией носителей при диффузионном транспорте, когда $k_F l \gg 1$ (k_F — квазифермиевский импульс, l — длина пробега носителей), а $\sigma(T) \propto \ln(T)$. Эффект обусловлен расфазировкой в магнитном поле самопересекающихся траекторий диффузионного движения носителей в прямом и обратном направлениях. Однако известны многочисленные случаи, когда отрицательное магнитосопротивление наблюдается в различных системах и в случае сильной локализации с прыж-

ковым VRH-механизмом, когда температурная зависимость $\sigma(T)$ при низких температурах следует формуле (1). Среди таких систем отметим гетероструктуры GaAs/AlGaAs [45] и GaAs/InGaAs [46], пленки Ge [47], фторированный графен [48], пленки $\text{In}_2\text{O}_{3-x}$ [49, 50], сильно разупорядоченное углеродное нановолокно [51], сетчатые пленки из однослойных углеродных нанотрубок [52].

Теоретически механизм отрицательного магнитосопротивления в случае сильной локализации носителей и VRH-механизма прыжкового транспорта был предложен в известной работе [53] (дальнейшее развитие см. в работах [54–56]), где было показано, что интерференция между всеми возможными различными прыжковыми траекториями с одного центра локализации на другой может в зависимости от условий существенно менять вероятность туннелирования носителей (так называемая модель NSS). Отрицательное магнитосопротивление возникает в этой модели в результате разрушения магнитным полем такой интерференции подобно тому, как это происходит в системах со слабой локализацией в диффузионном режиме. При этом были получены разные зависимости магнитокондуктанса G от магнитного поля. Так, в не очень сильных магнитных полях $\Delta G(B) \propto B$ [53], в то время как в [54–56] $\Delta G(B) \propto B^2$.

Однако среди перечисленных выше экспериментальных работ [45–52] выделяются такие (отметим, например, работу [51] по углеродному нановолокну и работу [52] по нанотрубным сеткам), в которых в достаточно широком интервале магнитных полей зависимость магнитокондуктанса от величины магнитного поля хорошо описывается выражением, характерным для систем со слабой локализацией и диффузионным режимом электронного транспорта [44]:

$$\Delta G(B) = A(T) \left[\Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{B_\phi}{B} \right) + \ln \left(\frac{B}{B_\phi} \right) \right], \quad (8)$$

где $A(T)$ — зависящая от температуры константа, определяемая параметрами системы, Ψ — дигамма-функция, $B_\phi = \hbar/4eL_\phi^2$ (L_ϕ — длина фазовой когерентности).

Оказалось, что и в нашем случае выражение (8) очень хорошо описывает полевые зависимости магнитокондуктанса для образцов аэрогелей с различным содержанием углерода (см. рис. 11б, где показаны результаты такой аппроксимации). Результаты аппроксимации дают значения $B_\phi = 0.745$ Тл для AG-14 и 1.012 Тл для AG-44, откуда следуют соответственно значения $L_\phi = 14.9$ нм и 12.8 нм. Если

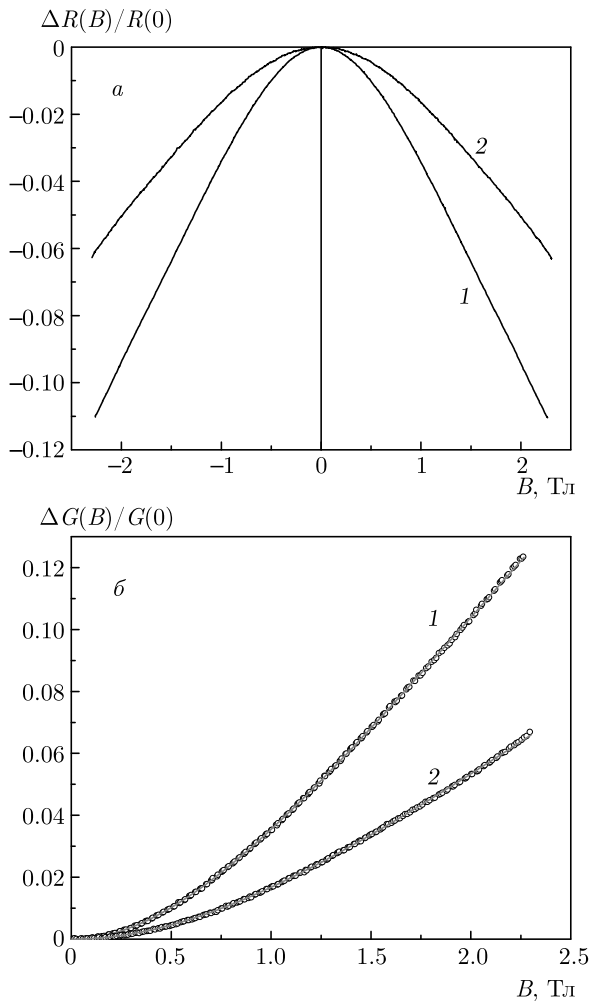


Рис. 11. Образцы AG-14 (1) и AG-44 (2): *a* — приведенные зависимости магнитосопротивления $\Delta R(B)/R(0)$; *б* — аппроксимации экспериментальных зависимостей магнитокондуктанса $\Delta G(B)/G(0)$ выражением (8), $T = 4.2$ К

сравнить эти значения со средним размером графеновых зерен L_a из оптических данных по КРС (см. табл. 1), видно, что для образцов с минимальной толщиной графеновой оболочки нановолокон аэрогеля (AG-14) величина L_ϕ примерно в два раза больше L_a , тогда как для максимальной толщины (для AG-44) L_ϕ лишь ненамного превышает L_a . Отметим также, что если по оптическим данным с ростом толщины графеновой оболочки величина L_a увеличивается, то величина L_ϕ , напротив, несколько уменьшается. Таким образом, получается, что, если применение выражения (8) для описания отрицательного магнитосопротивления образцов аэрогелей правомерно, то это означает, что увеличение эффективной размерности системы при увеличении числа графеновых слоев в оболочке нановолокон приводит

к уменьшению длины фазовой когерентности, т. е. несмотря на то, что с ростом толщины оболочки средний размер графенового зерна увеличивается, общая дефектность системы также растет.

Оправданность использования выражения (8) для описания отрицательного магнитосопротивления обусловлена в нашем случае не только тем, что из него следуют разумные значения электронных параметров исследованных систем, как это показано в упомянутых выше работах [51, 52], но и специальными экспериментами [46], где на примере одиночной квантовой ямы в гетероструктуре GaAs/In_xGa_{1-x}As/GaAs с одной заполненной носителями двумерной подзоной размерного квантования показано, что квантовые поправки к проводимости весьма существенны не только в заведомо диффузионном режиме при $k_F l = 2-25$, но и при существенно меньших длинах свободного пробега в интервале $k_F l = 0.5-2$. Сюда же можно отнести и работу по транспорту в сильно разупорядоченных многослойных углеродных нанотрубках [57], где при $l < 10$ нм поведение магнитосопротивления в зависимости от поля с хорошей точностью следует выражению (8).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате исследования транспортных свойств нематических проводящих аэрогелей установлено, что температурная зависимость проводимости этих материалов в области температур от 9 до 40 К строго следует выражению (1) для прыжкового транспорта с переменной длиной прыжка. Проводящей средой, в которой такой транспорт происходит, является графеновая оболочка волокон аэрогеля, а ее толщина и есть основной параметр, от которого зависят значение α в формуле (1) и величина отрицательного магнитосопротивления. При уменьшении числа слоев углеродной оболочки от 4–6 до 1–2 величина α растет от 0.4 до 0.9. В соответствии с формулой (4) рост α до 0.75 можно объяснить уменьшением размерности системы и увеличением показателя степени n в зависимости плотности локализованных состояний от энергии вблизи уровня Ферми. Это согласуется с тем фактом, что при минимальном содержании углерода диаметр нановолокон становится сопоставим с размером графеновых зерен. В результате прыжковый транспорт приобретает преимущественно одномерный характер. Дальнейший рост α вплоть до 0.9 фактически означает приближение системы к переходу в режим прыжков на ближайшие сосед-

ние места. Транспортные измерения в магнитном поле показали, что магнитосопротивление образцов аэрогелей с углеродным покрытием является отрицательным и существенно уменьшается при увеличении содержания углерода. Наблюдаемую зависимость $R(H)$ с хорошей точностью удалось аппроксимировать формулой (8) для случая слабой локализации. Полученные в результате значения длины фазовой когерентности находятся в разумном соотношении с размером графеновых зерен углеродного покрытия волокон. Таким образом, исследованные в настоящей работе аэрогели дополняют уже известный набор систем, в которых при низких температурах наблюдается прыжковый электронный транспорт, что свойственно средам с сильной локализацией носителей заряда, и одновременно отрицательное магнитосопротивление, обычно проявляющееся при диффузионном режиме транспорта в условиях слабой локализации.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № РНФ-20-42-08004).

ПРИЛОЖЕНИЕ

В методе Шнабеля возможны два способа измерения. В 1-й геометрии Шнабеля ток подводится к контактам A и D и измеряется разность потенциалов V_{BC} между контактами B и C (см. обозначения контактов в левой части рис. 5). Во 2-й геометрии Шнабеля ток идет через контакты A и B , а разность потенциалов V_{CD} измеряется между контактами C и D . Из таких измерений определяются величины условных сопротивлений $R_1 = V_{BC}/I_{AD}$ и $R_2 = V_{CD}/I_{AB}$. Значения V_{BC} или V_{CD} могут быть выражены аналитически из решения задачи о распределении потенциала электрического поля в объеме образца при пропускании тока I через токовые контакты.

В исходных работах Шнабеля [39, 40] эта задача была решена для образца в виде бесконечной плоской пластины, где присутствуют только два геометрических параметра — толщина пластины d и расстояние между соседними контактами s , а также в виде бесконечной полосы, где добавляется еще один геометрический параметр — ширина полосы b .

В наших работах [38, 58] было найдено решение этой задачи для образцов, имеющих форму прямоугольного параллелепипеда конечных размеров. Было показано, что величины R_1 и R_2 могут быть представлены в виде

$$R_1 = \frac{\rho}{d} G(a, b, d, s), \quad R_2 = \frac{\rho}{d} H(a, b, d, s).$$

Здесь ρ — удельное сопротивление проводящей среды, a, b, d — размеры образца вдоль главных осей, s — расстояние между контактами AB и, соответственно, CD . Функции G и H выражаются аналитически в виде двойных бесконечных рядов [38, 58]. В случае изотропного образца удельное сопротивление ρ может быть найдено из одного любого из этих измерений (либо из R_1 , либо из R_2).

В анизотропном случае в работе Ван дер Пау [59] было показано, что простым линейным преобразованием координат задача о распределении потенциала в анизотропном образце может быть сведена к аналогичной задаче для гипотетического изотропного образца, который имеет другие размеры и удельное сопротивление. Приведем кратко основные заключительные выкладки, касающиеся случая анизотропных образцов нематических образцов аэрогелей, исследованных в настоящей работе.

Предполагается, что система координат выбрана таким образом, что ребра объемных образцов аэрогелей направлены по главным осям тензора удельного сопротивления, принятым за оси (x_1, x_2, x_3) , а отрезки AB и CD параллельны оси x_1 вдоль нановолокон аэрогеля (рис. 5). В этой системе координат тензор ρ_{ik} диагонален и имеет всего три компоненты (ρ_1, ρ_2, ρ_3) . Коэффициенты линейного преобразования координат выбираются таким образом, что удельное сопротивление изотропного образца ρ^* и размеры a^*, b^*, d^*, s^* оказываются следующими:

$$\begin{aligned} \rho^* &= (\rho_1 \rho_2 \rho_3)^{1/3}, \\ a^* &= (\rho_1 / \rho^*)^{1/2} a, \quad b^* = (\rho_2 / \rho^*)^{1/2} b, \\ d^* &= (\rho_3 / \rho^*)^{1/2} d, \quad s^* = (\rho_1 / \rho^*)^{1/2}. \end{aligned}$$

Здесь индекс «*» обозначает величину, относящуюся к изотропному образу реального анизотропного образца. При этом измеряемые сопротивления R_1, R_2 изучаемого анизотропного образца равны соответствующим сопротивлениям его гипотетического изотропного образа R_1^*, R_2^* .

Из аналитических формул для функций G и H (см. [38, 58]) можно увидеть, что на самом деле они зависят не от четырех (a, b, d, s) , а от трех аргументов, в качестве которых удобно взять отношения $(a/s, b/s, d/s)$ для изучаемого образца и $(a^*/s^*, b^*/s^*, d^*/s^*)$ для его изотропного образа. Тогда измеряемые сопротивления R_1 и R_2 можно записать следующим образом:

$$R_1 = R_1^* = \frac{\rho^*}{d^*} G\left(\frac{a^*}{s^*}, \frac{b^*}{s^*}, \frac{d^*}{s^*}\right) = \\ = \frac{(\rho_1\rho_2)^{1/2}}{d} G\left(\frac{a}{s}, \frac{\lambda_{21}b}{s}, \frac{\lambda_{31}d}{s}\right),$$

$$R_2 = R_2^* = \frac{\rho^*}{d^*} H\left(\frac{a^*}{s^*}, \frac{b^*}{s^*}, \frac{d^*}{s^*}\right) = \\ = \frac{(\rho_1\rho_2)^{1/2}}{d} H\left(\frac{a}{s}, \frac{\lambda_{21}b}{s}, \frac{\lambda_{31}d}{s}\right),$$

где введены обозначения $\lambda_{21} = (\rho_2/\rho_1)^{1/2}$ и $\lambda_{31} = (\rho_3/\rho_1)^{1/2}$.

В процессе измерений независимыми являются только две величины, R_1 и R_2 . Поэтому из этих измерений нельзя определить все три значения тензора удельного сопротивления. Однако, если выполняется условие, что из трех главных значений тензора удельного сопротивления два из них равны, как в нашем случае объемных образцов нематических аэрогелей, то у него имеется только два независимых главных значения, которые могут быть найдены из измерений R_1 и R_2 . Отметим, что в наших экспериментах на объемных образцах аэрогелей линии размещения зондов AB и CD (см. рис. 5) направлены вдоль направления наибольшей проводимости, принятого за ось x_1 с удельным сопротивлением ρ_1 , а удельные сопротивления по двум другим осям считаются равными, т.е. $\rho_2 = \rho_3$ и $\lambda_{21} = \lambda_{31}$.

Зная аналитические выражения для функций G и H [38,58], геометрические размеры образца (значения a, b, d) и расстояние между точечными контактами s , мы можем построить величину отношения

$$\frac{R_1}{R_2} = \frac{G(a/s, \lambda b/s, \lambda d/s)}{H(a/s, \lambda b/s, \lambda d/s)}$$

в зависимости только от одного аргумента $\lambda = \lambda_{21} = \lambda_{31}$. Для каждого измерения величин R_1 и R_2 из этой зависимости определяется параметр анизотропии λ , а затем величина ρ_1 двумя способами:

$$\rho_1 = \frac{R_1 d}{\lambda G(a/s, \lambda b/s, \lambda d/s)} \\ \text{или } \rho_1 = \frac{R_2 d}{\lambda H(a/s, \lambda b/s, \lambda d/s)},$$

после чего находим величину $\rho_3 = \rho_1 \lambda^2$.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Aghayan, I. Hussainova, M. Gasik et al., *Thermochim. Acta* **574**, 140 (2013).

2. В. Е. Асадчиков, Р. Ш. Асхадуллин, В. В. Волков и др., *Письма в ЖЭТФ* **101**, 613 (2015).
3. V. V. Dmitriev, A. A. Senin, A. A. Soldatov, and A. N. Yudin, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 165304 (2015).
4. S. Autti, V. V. Dmitriev, J. T. Mäkinen et al., *Phys. Rev. Lett.* **117**, 255301 (2016).
5. <http://www.anftechnology.com/nafen>.
6. I. Hussainova, R. Ivanov, S. N. Stamatina et al., *Carbon* **88**, 157 (2015).
7. R. Ivanov, V. Mikli, J. Kübarsepp, and I. Hussainova, *Key Engin. Mater.* **674**, 77 (2016).
8. V. S. Solodovnichenko, M. M. Simunin, D. V. Lebedev et al., *Thermochim. Acta* **675**, 164 (2019).
9. M. Mehbod, P. Wyder, R. Deltour et al., *Phys. Rev. B* **36**, 7627 (1987).
10. D. van der Putten, J. T. Moonen, H. B. Brom et al., *Phys. Rev. Lett.* **69**, 494 (1992).
11. A. W. P. Fung, Z. H. Wang, M. S. Dresselhaus et al., *Phys. Rev. B* **49**, 17325 (1994).
12. G. A. M. Reynolds, A. W. P. Fung, Z. H. Wang et al., *Phys. Rev. B* **50**, 18590 (1994).
13. P. Mandal, A. Neumann, A. G. M. Jansen et al., *Phys. Rev. B* **55**, 452 (1997).
14. Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос, *Электронные свойства легированных полупроводников*, Наука, Москва (1979).
15. B. I. Shklovskii and A. L. Efros in *Electronic Properties of Doped Semiconductors*, Vol. 45 of Springer Series in Solid-State Sciences, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg GmbH (1984).
16. R. M. Hill, *Phys. Stat. Sol (a)* **35**, K29 (1976).
17. А. Г. Забродский, *ФТП* **11**, 595 (1977).
18. M. Pollak, *J. Non-Cryst. Solids* **11**, 1 (1972).
19. E. M. Hamilton, *Phil. Mag.* **29**, 1043 (1972).
20. Reghu M, C. O. Yoon, C. Y. Yang et al., *Phys. Rev. B* **50**, 13931 (1994).
21. C. O. Yoon, Reghu M, D. Moses et al., *Synt. Met.* **75**, 229 (1995).
22. A. N. Aleshin, J. Y. Lee, S. W. Chu et al., *Phys. Rev. B* **69**, 214203 (2004).
23. J. Park, W. C. Mitchel, S. Elhamri et al., *Phys. Rev. B* **88**, 035419 (2013).

24. Y.-E. Lévy and B. Souillard, *Europhys. Lett.* **4**, 233 (1987).
25. G. Deutscher, Y. Lévy, and B. Souillard, *Europhys. Lett.* **4**, 577 (1987).
26. M. M. Fogler, S. Teber, and B. I. Shklovskii, *Phys. Rev. B* **69**, 035413 (2004).
27. A. B. Kaiser, *Rep. Prog. Phys.* **64**, 1 (2001).
28. M. Pollak and C. J. Adkins, *Phil. Mag. B* **65**, 855 (1992).
29. A. M. Nardes, M. Kemerink, and R. A. J. Janssen, *Phys. Rev. B* **76**, 085208 (2007).
30. S. Ihnatsenka, *Phys. Rev. B* **94**, 195202 (2016).
31. R. Saito, M. Hofmann, G. Dresselhaus et al., *Adv. Phys.* **60**, 413 (2011).
32. E. H. Martins Ferreira, Marcus V. O. Moutinho, F. Stavale et al., *Phys. Rev. B* **82**, 125429 (2010).
33. M. M. Lucchese, F. Stavale, E. H. Martins Ferreira et al., *Carbon* **48**, 1592 (2010).
34. M. S. Dresselhaus, A. Jorio, A. G. Souza Filho, and R. Saito, *Phil. Trans. Royal Society A* **368**, 5355 (2010).
35. A. Eckmann, A. Felten, A. Mishchenko et al., *Nano Lett.* **12**, 3925 (2012).
36. L. G. Cancado, K. Takai, T. Enoki et al., *Appl. Phys. Lett.* **88**, 163106 (2006).
37. L. G. Cancado, A. Jorio, E. H. Martins Ferreira et al., *Nano Lett.* **11**, 3190 (2011).
38. Л. Б. Луганский, В. И. Цebro, ПТЭ № 1, 122 (2015). (*Instr. and Exper. Tech.* **58**, 118 (2015)).
39. P. Schnabel, *Phil. Res. Rep.* **19**, 43 (1964).
40. P. Schnabel, *Z. Angew. Phys.* **22**, 136 (1967).
41. А. Г. Забродский, К. Н. Зиновьева, *ЖЭТФ* **86**, 727 (1984).
42. K. Ritter and J. Lyding, *Nat. Mater.* **8**, 235 (2009).
43. С. В. Демишев, А. А. Пронин, В. В. Глушков и др., *Письма в ЖЭТФ* **78**, 984 (2003).
44. P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985).
45. H. W. Jiang, C. E. Johnson, and K. L. Wang, *Phys. Rev. B* **46**, 12830 (1992).
46. G. M. Minkov, O. E. Rut, A. V. Germanenko et al., *Phys. Rev. B* **65**, 235322 (2002).
47. V. F. Mitin, V. K. Dugaev, and G. G. Ihas, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 202107 (2007).
48. X. Hong, S. H. Cheng, C. Herding, and J. Zhu, *Phys. Rev. B* **83**, 085410 (2011).
49. F. P. Milliken and Z. Ovadyahu, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 911 (1990).
50. A. Frydman and Zvi Ovadyahu, *Sol. St. Comm.* **94**, 745 (1995).
51. Yu Wang Jorge J. Santiago-Avilés, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 123119 (2006).
52. X. Wang, W. Gao, X. Li et al., *Phys. Rev. Mater.* **2**, 116001 (2018).
53. В. Л. Нгуен, Б. З. Спивак, Б. И. Шкловский, *ЖЭТФ* **89**, 1770 (1985).
54. U. Sivan, O. Entin-Wohlman, and Y. Imry, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1566 (1988).
55. O. Entin-Wohlman, Y. Imry, and U. Sivan, *Phys. Rev. B* **40**, 8342 (1989).
56. L. B. Ioffe and B. Z. Spivak, *ЖЭТФ* **144**, 632 (2013).
57. R. Tarkiainen, M. Ahlskog, A. Zyuzin et al., *Phys. Rev. B* **69**, 033402 (2004).
58. Л. Б. Луганский, В. И. Цebro, *Четырехзондовые методы измерения удельного сопротивления*, РИИС ФИАН, Москва (2012). ISBN 978-5-902622-23-9.
59. L. J. van der Pauw, *Philips Res. Rep.* **16**, 187 (1961).

ПРОБЛЕМА ПОВЫШЕНИЯ РАБОЧЕЙ ЧАСТОТЫ В ЧЕРЕНКОВСКИХ ПЛАЗМЕННЫХ ИСТОЧНИКАХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

*И. Н. Карташов**, *М. В. Кузелев***

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

Поступила в редакцию 15 сентября 2021 г.,
после переработки 11 октября 2021 г.
Принята к публикации 11 октября 2021 г.

Исследована возможность повышения рабочей частоты существующих плазменных черенковских СВЧ-излучателей на релятивистских электронных пучках большой плотности. Рассмотрены высокочастотная и низкочастотная поверхностные волны незамагниченной трубчатой плазмы большой плотности в волноводе и определены условия их возбуждения электронными пучками. Вычислены коэффициенты пространственного усиления поверхностных волн в режимах одночастичного и коллективного эффектов Черенкова. Получены нелинейные уравнения пространственного усиления волн и рассчитаны эффективности усиления поверхностных волн. Показано, что повышение на порядок рабочей частоты действующих плазменных излучателей вполне реально и достигается всего лишь повышением плотности используемой плазмы.

DOI: 10.31857/S0044451022020134

1. ВВЕДЕНИЕ

В плазменной СВЧ-электронике в качестве электродинамических систем применяются отрезки плазменных волноводов с излучателем на одном из торцов. В успешно реализованных на сегодняшний день плазменных излучателях (усилителях и генераторах) используется замагниченная плазма трубчатой геометрии. Работают такие излучатели в СВЧ-диапазоне, т.е. на частотах ω порядка 10^{10} – 10^{11} рад/с. Отличительной особенностью плазменных излучателей является то, что их рабочая частота сопоставима с электронной ленгмюровской частотой плазменного заполнения, т.е. $\omega_p \sim \alpha \cdot (10^{10}$ – $10^{11})$ рад/с, где α — несколько единиц [1–3]. По спектру выходного сигнала плазменные СВЧ-источники работают как в режиме генерации [4] и усиления [5] монохроматического сигнала с перестраиваемой частотой, так и в режиме усиления шумов [6, 7].

В настоящее время обсуждается возможность создания существенно более высокочастотных плазменных излучателей с рабочей частотой $\omega \sim 10^{12}$ рад/с и больше. Повышение рабочей частоты в реализованных на сегодняшний день плазменных излучателях неизбежно влечет за собой использование более плотной плазмы, что приводит к необходимости изменения основных теоретических моделей плазменной СВЧ-электроники. Во-первых, плотную плазму замагнитить сложно, поскольку требуется создание очень сильного внешнего магнитного поля в достаточно большом объеме плазменного волновода. Поэтому приходится исходить из того, что плазма является слабо замагниченной (или вообще незамагниченной) [8–10]. Традиционно в большинстве теоретических исследований, посвященных расчету конкретных плазменных излучателей, плазма предполагалась замагниченной полностью [2, 11]. Во-вторых, глубина проникновения поперечного электромагнитного поля в плотную незамагниченную плазму может оказаться меньше ее толщины, реализуемой в плазменных излучателях с трубчатой плазмой. Поэтому оказывается неприменимой традиционно и эффективно используемая при расчетах приборов плазменной СВЧ-электроники модель бесконечно тонкой плазмы [11–13]. Электромагнитные

* E-mail: igorkartashov@mail.ru

** E-mail: kuzelev@mail.ru

свойства волн в слоистых структурах с изотропной плазмой и в магнитоактивной плазме газового ВЧ-разряда, их возбуждение внешней неоднородной электромагнитной волной и спиральными антеннами рассматривалось в [14, 15]. Настоящее исследование в первую очередь направлено на учет конечности толщины трубчатой плазмы в традиционных схемах плазменной СВЧ-электроники при условии, что плазма является немагнитной.

В любом из известных черенковских плазменных излучателей обязательно имеется некоторое внешнее магнитное поле, необходимое для получения и транспортировки сильноточного релятивистского электронного пучка. Немагнитность плазмы предполагает выполнение неравенств

$$\Omega_e^2 \ll \omega^2, \quad \Omega_e \omega_p^2 \ll \omega^3, \quad (1)$$

второе из которых, с учетом того, что ω и ω_p одного порядка, фактически эквивалентно первому. Здесь Ω_e — электронная циклотронная частота. Чем плотнее плазма, тем выше частота ω и тем лучше выполняются неравенства (1). Напротив, плотности используемых в плазменных излучателях электронных пучков малы по сравнению с плотностями плазмы. Поэтому, предполагая выполненными неравенства

$$\Omega_e^2 \gg \omega_b^2 \gamma^{-3}, |\delta k u|^2, \quad \delta_b < c/\omega_b, \quad (2)$$

электронный пучок считаем бесконечно тонким и полностью замагниченным. Здесь ω_b — ленгмюровская частота электронов пучка, u — их скорость, $\gamma = (1 - u^2/c^2)^{-1/2}$, δ_b — толщина трубчатого пучка, а δk — пространственный инкремент резонансной черенковской пучково-плазменной неустойчивости.

2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Рассмотрим взаимодействие прямолинейного электронного пучка с волной E -типа волновода кругового поперечного сечения, в котором находится радиально неоднородная плазма. Направим ось z вдоль оси волновода, совпадающей с направлением движения пучка, и определим продольную составляющую напряженности электрического поля формулой

$$E_z(t, z, r) = \frac{1}{2} [E(r) \exp(-i\omega t + ik_z z + il\varphi) + \text{c.c.}], \quad (3)$$

где r, φ, z — цилиндрические координаты, $l = 0, 1, \dots$ — номер азимутальной моды. Тензор диэлектрической проницаемости плазмы возьмем в виде [16]

$$\varepsilon_{ij}(\omega, r) = \varepsilon_p(\omega, r) \delta_{ij}, \quad i, j = r, \varphi, z, \quad (4)$$

$\varepsilon_p(\omega, r) = 1 - \omega_p^2(r)/\omega^2$ (столкновениями и тепловым движением электронов пренебрегаем, движение ионов не учитываем). Из уравнений Максвелла с тензором диэлектрической проницаемости (4) следует уравнение для комплексной амплитуды $E(r)$ в формуле (3):

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{\varepsilon_p(\omega, r)}{\chi^2(\omega, r)} \frac{dE}{dr} \right) - \frac{\varepsilon_p(\omega, r)}{\chi^2(\omega, r)} \frac{l^2}{r^2} E - \varepsilon_p(\omega, r) E = 0, \quad (5)$$

где $\chi^2(\omega, r) = k_z^2 - \varepsilon_p(\omega, r)\omega^2/c^2$. В дальнейшем рассматривается азимутально симметричный случай $l = 0$.

Пусть трубчатая плазма с постоянной плотностью расположена в области $r \in [r_1, r_2]$. Уравнение (5) справедливо как в плазме, так и в вакуумных областях волновода $r \in [0, r_1]$ и $r \in (r_2, R)$, где R — радиус волновода. Непосредственно из уравнения (5) получаются следующие граничные условия на границах трубчатой плазмы:

$$\{E\}_{r=r_{1,2}} = 0, \quad \left\{ \frac{\varepsilon_p(\omega, r)}{\chi^2(\omega, r)} \frac{dE}{dr} \right\}_{r=r_{1,2}} = 0, \quad (6)$$

причем в вакуумных областях $\varepsilon_p(\omega, r) = 1$, а в области плазмы $\varepsilon_p(\omega, r) = \varepsilon_p = 1 - \omega_p^2/\omega^2$ с постоянной ω_p . Еще одно граничное условие $E(R) = 0$ записывается на идеально проводящей границе волновода.

Плотность тока бесконечно тонкого трубчатого замагниченного электронного пучка определим формулой

$$j_z(t, z, r) = \delta_b \delta(r - r_b) j_b(t, z; r_b), \quad (7)$$

где $j_b(t, z; r_b)$ — функция, для нахождения которой требуются уравнения динамики пучка, а параметрическая зависимость от радиуса трубчатого пучка r_b обусловлена тем, что на электроны пучка действует поле (3) именно в точке $r = r_b$. Наличие в волноводе тока с плотностью (7) приводит к следующему скачку азимутальной составляющей индукции магнитного поля волны:

$$\{B_\varphi(t, z, r)\}_{r=r_b} = \frac{4\pi}{c} \delta_b j_b(t, z; r_b). \quad (8)$$

Азимутальная составляющая индукции магнитного поля определяется формулой вида (3) с комплексной амплитудой

$$B(r) = -i\varepsilon_p(\omega, r) \frac{\omega}{c\chi^2(\omega, r)} \frac{dE}{dr}. \quad (9)$$

Подставляя формулу вида (3) с комплексной амплитудой (9) в (8) и считая, что электронный пучок проходит по одной из вакуумных областей волновода, находим следующие граничные условия для функции $E(r)$ на электронном пучке:

$$\{E\}_{r=r_b} = 0, \quad \left\{ \frac{dE}{dr} \right\}_{r=r_b} = \frac{4\pi i}{\omega} \delta_b \chi_0^2 \langle j_b(r_b) \rangle, \quad (10)$$

где

$$\langle j_b(r_b) \rangle = \frac{\omega}{\pi} \int_0^{2\pi/\omega} j_b(t, z; r_b) \exp(i\omega t - ik_z z) dt \quad (11)$$

— пространственно-временная фурье-гармоника плотности тока пучка, $\chi_0^2 = k_z^2 - \omega^2/c^2$. В (10) добавлено очевидное условие непрерывности на электронном пучке самой функции $E(r)$. В линейном приближении для вычисления функции (11) можно воспользоваться известным выражением для проводимости пучка электронов, полученным в гидродинамической модели [11, 16], что дает

$$\frac{4\pi i}{\omega} \langle j_b(r_b) \rangle = -\frac{\omega_b^2 \gamma^{-3}}{(\omega - k_z u)^2} E(r_b). \quad (12)$$

Процедура вычисления функции (11) в нелинейной теории будет описана ниже.

3. ОСОБЕННОСТИ ПОВЕРХНОСТНЫХ ВОЛН ВОЛНОВОДА С НЕЗАМАГНИЧЕННОЙ ТРУБЧАТОЙ ПЛАЗМОЙ

Перейдем теперь к выводу дисперсионного уравнения и формулы для собственной функции $E(r)$ волн плазменного волновода с трубчатой немагнитной плазмой конечной толщины. Наличие пучка пока не учитываем. Ограниченное при $r = 0$ решение уравнения (5) запишем в виде

$$E(r) = \begin{cases} AI_0(\chi_0 r), & r < r_1, \\ BI_0(\chi_p r) + CK_0(\chi_p r), & r_1 < r < r_2, \\ DF_0(\chi_0 r), & r_2 < r < R, \end{cases} \quad (13)$$

где

$$F_0(\chi_0 r) = K_0(\chi_0 r) - I_0(\chi_0 r) \frac{K_0(\chi_0 R)}{I_0(\chi_0 R)}, \quad (14)$$

$\chi_p^2 = k_z^2 - \varepsilon_p \omega^2/c^2$, а A, B, C, D — постоянные. Подстановка (13) в граничные условия (6) приводит к следующей системе уравнений:

$$\begin{aligned} AI_0(\chi_0 r_1) - BI_0(\chi_p r_1) - CK_0(\chi_p r_1) &= 0, \\ \chi_p AI_1(\chi_0 r_1) - \varepsilon_p \chi_0 (BI_1(\chi_p r_1) - & \\ - CK_1(\chi_p r_1)) &= 0, \\ BI_0(\chi_p r_2) + CK_0(\chi_p r_2) - DF_0(\chi_0 r_2) &= 0, \\ \varepsilon_p \chi_0 (BI_1(\chi_p r_2) - CK_1(\chi_p r_2)) - & \\ - \chi_p DF_1(\chi_0 r_2) &= 0, \end{aligned} \quad (15)$$

где

$$F_1(\chi_0 r) = -K_1(\chi_0 r) - I_1(\chi_0 r) \frac{K_0(\chi_0 R)}{I_0(\chi_0 R)}. \quad (16)$$

Равенство нулю определителя системы (15) дает дисперсионное уравнение для определения спектров частот плазменного волновода. Запишем его в виде [16, 17]

$$D_0(\omega, k_z) \equiv \varepsilon_p \chi_0 S_1 I_0(\chi_0 r_1) - \chi_p S_0 I_1(\chi_0 r_1) = 0, \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned} S_0 &= \varepsilon_p \chi_0 F_0(\chi_0 r_2) \times \\ &\times (I_0(\chi_p r_1) K_1(\chi_p r_2) + K_0(\chi_p r_1) I_1(\chi_p r_2)) + \\ &\quad + \chi_p F_1(\chi_0 r_2) \times \\ &\times (I_0(\chi_p r_1) K_0(\chi_p r_2) - K_0(\chi_p r_1) I_0(\chi_p r_2)), \\ S_1 &= \varepsilon_p \chi_0 F_0(\chi_0 r_2) \times \\ &\times (I_1(\chi_p r_1) K_1(\chi_p r_2) - K_1(\chi_p r_1) I_1(\chi_p r_2)) + \\ &\quad + \chi_p F_1(\chi_0 r_2) \times \\ &\times (I_1(\chi_p r_1) K_0(\chi_p r_2) + K_1(\chi_p r_1) I_0(\chi_p r_2)). \end{aligned} \quad (18)$$

Полагая далее $A = 1$, из первых трех уравнений системы (15) получаем следующие выражения для постоянных B, C, D :

$$\begin{aligned} B &= \chi_p r_1 \left(\frac{\chi}{\chi_0 \varepsilon_p} I_1(\chi_0 r_1) K_0(\chi_p r_1) + \right. \\ &\quad \left. + I_0(\chi_0 r_1) K_1(\chi_p r_1) \right), \\ C &= \chi_p r_1 \left(-\frac{\chi}{\chi_0 \varepsilon_p} I_1(\chi_0 r_1) I_0(\chi_p r_1) + \right. \\ &\quad \left. + I_0(\chi_0 r_1) I_1(\chi_p r_1) \right), \\ D &= B \frac{I_0(\chi_p r_2)}{F_0(\chi_0 r_2)} + C \frac{K_0(\chi_p r_2)}{F_0(\chi_0 r_2)}. \end{aligned} \quad (19)$$

Последние формулы вместе с формулой (13) определяют собственные функции плазменного волновода.

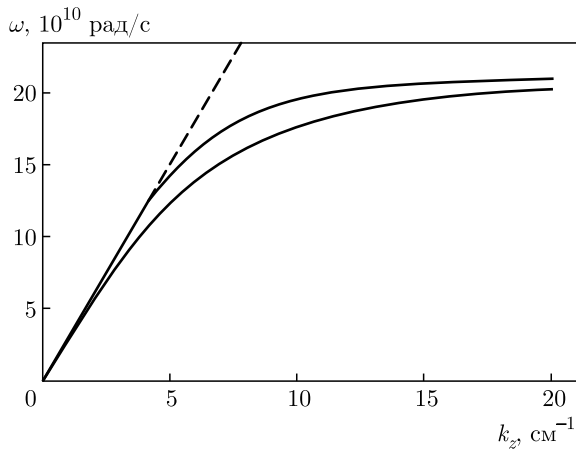


Рис. 1. Частоты поверхностных волн трубчатой плазмы «малой» плотности в волноводе. Штриховая линия — световая прямая $\omega = k_z c$

Рассмотрим характерные численные примеры. Зафиксируем следующие параметры плазменного волновода: $R = 2$ см, $r_1 = 1$ см, $r_2 = 1.2$ см, а плазму сначала возьмем небольшой плотности $\omega_p = 30 \cdot 10^{10}$ рад/с. Дисперсионные кривые $\omega(k_z)$ плазменных волн в области $\omega < k_z c$ представлены на рис. 1. Видны две дисперсионные кривые, соответствующие двум поверхностным волнам трубчатой плазмы. Верхняя кривая в неинтересующую нас область $\omega > k_z c$ не продолжена.

Поверхностные волны, дисперсионные кривые которых представлены на рис. 1 и которые будем называть низкочастотной и высокочастотной поверхностными волнами, различаются своими собственными функциями $E(r)$. Собственная функция высокочастотной поверхностной волны, рассчитанная в точке $\omega = 17 \cdot 10^{10}$ рад/с и $k_z = 6.72$ см⁻¹ дисперсионной кривой, представлена на рис. 2а. Из приведенного рисунка следует, что поляризованная плазма в высокочастотной поверхностной волне является двойным слоем, в котором заряды на внутренней и внешней границах плазменной трубки противоположны. На следующем рис. 2б изображена собственная функция низкочастотной поверхностной волны в точке $\omega = 17 \cdot 10^{10}$ рад/с и $k_z = 8.99$ см⁻¹. Из этого рисунка следует, что в низкочастотной поверхностной волне плазменная трубка поляризована как простой слой.

В интересующем нас случае более плотной плазмы ($\omega_p = 130 \cdot 10^{10}$ рад/с) наблюдается существенная особенность — разница между частотами высокочастотной и низкочастотной поверхностных волн стала весьма малой (рис. 3), что и понятно. Посколь-

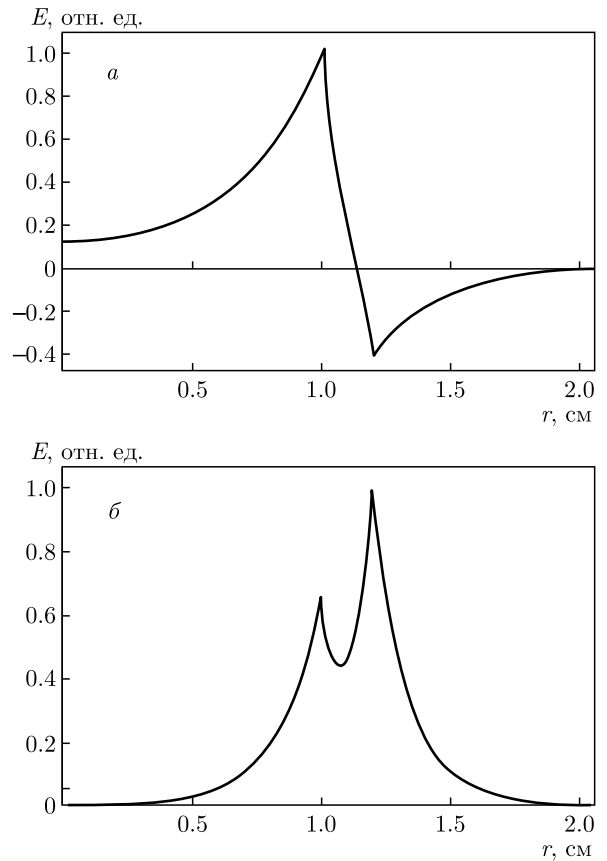


Рис. 2. Собственные функции высокочастотной (а) и низкочастотной (б) поверхностных волн в случае плазмы «малой» плотности

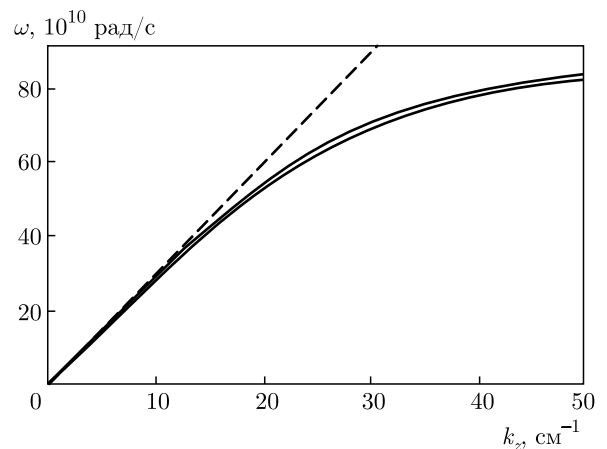


Рис. 3. Частоты поверхностных волн трубчатой плазмы «большой» плотности в волноводе

ку в случае плотной плазмы глубина проникновения поля в плазму меньше толщины плазмы ($c/\omega_p \approx 0.02$ см, $\delta_p = r_2 - r_1 = 0.2$ см), заряды на противоположных границах плазменной трубки мало влия-

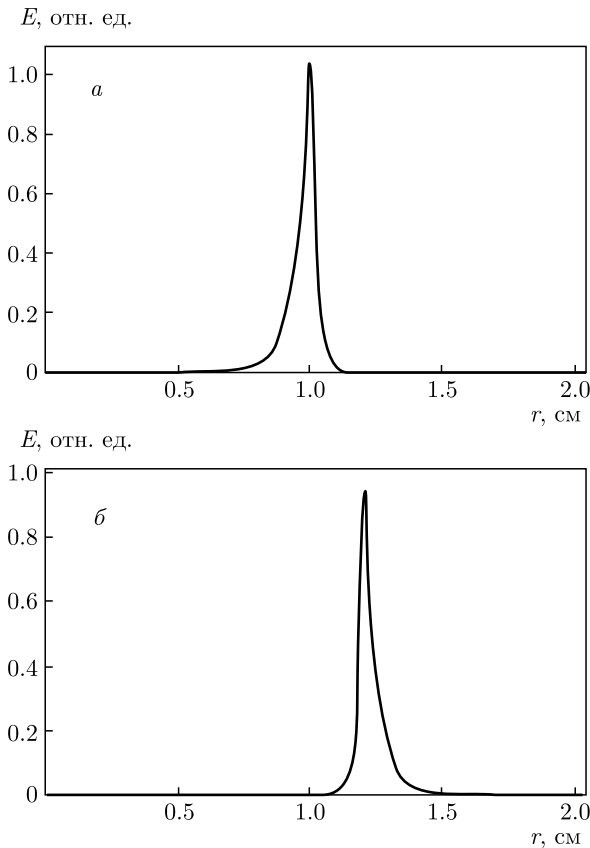


Рис. 4. Собственные функции высокочастотной (а) и низкочастотной (б) поверхностных волн в случае плазмы «большой» плотности

ют друг на друга. Поэтому характер поляризации плазмы не имеет большого значения.

Существенные изменения при большой плотности плазмы наблюдаются и в структуре собственной функции $E(r)$. На рис. 4а функция $E(r)$ представлена в случае высокочастотной поверхностной волны ($\omega = 70 \cdot 10^{10}$ рад/с и $k_z = 29.8$ см⁻¹). Видно, что поле сосредоточено вблизи внутренней границы плазменной трубки, а значит, именно на этой границе локализованы поверхностные поляризационные заряды. Поле низкочастотной поверхностной волны, рассчитанное в точке $\omega = 70 \cdot 10^{10}$ рад/с и $k_z = 30.78$ см⁻¹ дисперсионной кривой, представлено на рис. 4б. Видно, что поле поверхностной волны сосредоточено вблизи внешней границы плазменной трубки.

Если в дисперсионном уравнении (17) положить $k_z = \omega/u$, то получится уравнение относительно частоты ω , решения которого определяют возможные рабочие частоты плазменного излучателя на электронном пучке малой плотности (режим одно-

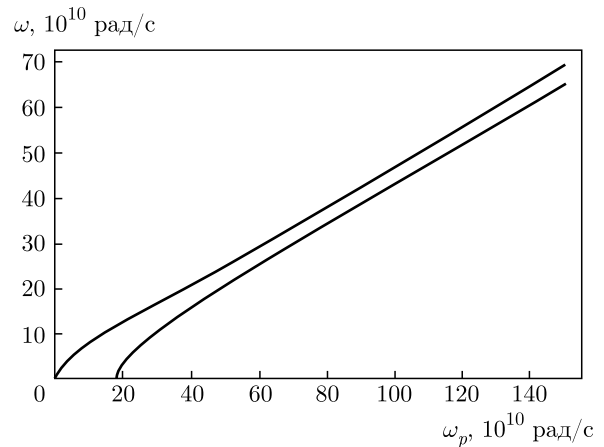


Рис. 5. Частоты одночастичного черенковского резонанса пучка с поверхностными волнами волновода с немагнитной трубчатой плазмой

частичного вынужденного эффекта Черенкова [18]). На рис. 5 приведены зависимости x этих частот для волновода с указанными выше радиусами и пучка со скоростью $u = 2.6 \cdot 10^{10}$ см/с от плазменной частоты.

Из рис. 5 следует, что с точки зрения выполнимости условий черенковского резонанса различий между высокочастотной и низкочастотной поверхностными волнами волновода с плотной трубчатой плазмой фактически нет. Однако считать, что при увеличении плотности плазмы неустойчивости на этих волнах сливаются в некую единую неустойчивость, нельзя. Дело в том, что у высокочастотной и низкочастотной поверхностных волн существенно различаются собственные функции (рис. 4). Поэтому возбуждается электронным пучком всегда только какая-то одна волна. Если пучок проходит внутри плазменной трубки, причем достаточно близко к внутренней границе плазмы, то возбуждаться будет высокочастотная поверхностная волна. Если же пучок проходит вне плазменной трубки, то будет возбуждаться низкочастотная поверхностная волна.

4. ВЫЧИСЛЕНИЕ ИНКРЕМЕНТОВ ПРОСТРАНСТВЕННОГО УСИЛЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ВОЛН НЕЗАМАГНИЧЕННОЙ ТРУБЧАТОЙ ПЛАЗМЫ

Рассмотрим геометрию плазменно-пучковой системы уже реализованную в экспериментах [19, 20]: бесконечно тонкий трубчатый электронный пучок проходит внутри плазменной трубки, т. е. $r_b < r_1 < < r_2 < R$. Запишем решение уравнения (5) в виде

$$E(r) = \begin{cases} AI_0(\chi_0 r), & r < r_b, \\ BI_0(\chi_0 r) + CK_0(\chi_0 r), & r_b < r < r_1, \\ PI_0(\chi_p r) + QK_0(\chi_p r), & r_1 < r < r_2, \\ DF_0(\chi_0 r), & r_2 < r < R. \end{cases} \quad (20)$$

Подстановка решения (20) в граничные условия (6) и (10) приводит к следующей системе уравнений:

$$\begin{aligned} AI_0(\chi_0 r_b) - BI_0(\chi_0 r_b) - CK_0(\chi_0 r_b) &= 0, \\ AI_1(\chi_0 r_b) - BI_1(\chi_0 r_b) + CK_1(\chi_0 r_b) &= \\ &= -\frac{4\pi i}{\omega} \delta_b \chi_0 \langle j_b(r_b) \rangle, \\ BI_0(\chi_0 r_1) + CK_0(\chi_0 r_1) - \\ &- PI_0(\chi_p r_1) - QK_0(\chi_p r_1) = 0, \quad (21) \\ \chi_p (BI_1(\chi_0 r_1) - CK_1(\chi_0 r_1)) - \\ &- \varepsilon_p \chi_0 (PI_1(\chi_p r_1) - QK_1(\chi_p r_1)) = 0, \\ PI_0(\chi_p r_2) + QK_0(\chi_p r_2) - DF_0(\chi_0 r_2) &= 0, \\ \varepsilon_p \chi_0 (PI_1(\chi_p r_2) - QK_1(\chi_p r_2)) - \\ &- \chi_p DF_1(\chi_0 r_2) = 0. \end{aligned}$$

Из первых двух уравнений системы (21) находим

$$\begin{aligned} B &= A + \frac{4\pi i}{\omega} \delta_b r_b \chi_0^2 K_0(\chi_0 r_b) \langle j_b(r_b) \rangle, \quad (22) \\ C &= -\frac{4\pi i}{\omega} \delta_b r_b \chi_0^2 I_0(\chi_0 r_b) \langle j_b(r_b) \rangle. \end{aligned}$$

Из последних двух уравнений системы (21) имеем

$$\begin{aligned} P &= D \frac{\chi_p r_2}{\varepsilon_p \chi_0} (\varepsilon_p \chi_0 K_1(\chi_p r_2) F_0 + \chi_p K_0(\chi_p r_2) F_1), \quad (23) \\ Q &= D \frac{\chi_p r_2}{\varepsilon_p \chi_0} (\varepsilon_p \chi_0 I_1(\chi_p r_2) F_0 - \chi_p I_0(\chi_p r_2) F_1). \end{aligned}$$

Подставляя далее (22) и (23) в третье и четвертое уравнения системы (21), получаем следующую систему:

$$\begin{aligned} AI_0(\chi_0 r_1) - D \frac{\chi_p r_2}{\varepsilon_p \chi_0} S_0 &= -\frac{4\pi i}{\omega} \delta_b r_b \chi_0^2 T_0 \langle j_b(r_b) \rangle, \quad (24) \\ AI_1(\chi_0 r_1) - D r_2 S_1 &= -\frac{4\pi i}{\omega} \delta_b r_b \chi_0^2 T_1 \langle j_b(r_b) \rangle, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} T_0 &= I_0(\chi_0 r_1) K_0(\chi_0 r_b) - K_0(\chi_0 r_1) I_0(\chi_0 r_b), \quad (25) \\ T_1 &= I_1(\chi_0 r_1) K_0(\chi_0 r_b) + K_1(\chi_0 r_1) I_0(\chi_0 r_b). \end{aligned}$$

Окончательно из (24) находим выражение для амплитуды A , определяющее по формулам (20) и (3) поле в месте нахождения пучка:

$$A = \frac{W_0(\omega, k_z)}{D_0(\omega, k_z)} \frac{4\pi i}{\omega} \delta_b r_b \chi_0^2 \langle j_b(r_b) \rangle, \quad (26)$$

где

$$W_0(\omega, k_z) = \chi_p S_0 T_1 - \varepsilon_p \chi_0 S_1 T_0, \quad (27)$$

а $D_0(\omega, k_z)$ — дисперсионная функция, определенная в (17).

Соотношение (26) можно рассматривать как уравнение возбуждения плазменного волновода электронным пучком. Если нет пучка (например, $\delta_b = 0$), то не возбуждается и волновод, т. е. $A = 0$. Исключением является случай $D_0(\omega, k_z) = 0$, что как раз и является дисперсионным уравнением (17), определяющим собственные частоты волн плазменного волновода.

Подставляя в соотношение (26) выражение (12) и учитывая, что $E(r_b) = AI_0(\chi_0 r_b)$, получаем следующее дисперсионное уравнение для комплексных спектров исследуемого плазменного волновода с пучком:

$$\begin{aligned} D_0(\omega, k_z) &= -\delta_b r_b \chi_0^2 I_0(\chi_0 r_b) W_0(\omega, k_z) \times \\ &\times \frac{\omega_b^2 \gamma^{-3}}{(\omega - k_z u)^2}. \quad (28) \end{aligned}$$

Имея задачу исследовать пространственное усиление поверхностных волн в плазменном волноводе с пучком, будем решать уравнение (28) относительно комплексного волнового числа $k_z(\omega)$ при вещественной частоте ω . Полагая, как это обычно делается при черенковском взаимодействии пучков с волнами любой природы [11, 18]

$$k_z = \omega/u + \delta k, \quad |\delta k| \ll \omega/u, \quad (29)$$

преобразуем уравнение (28) к кубическому уравнению для комплексного коэффициента усиления δk :

$$\begin{aligned} \left(D_0(\omega, k_{z\omega}) + \frac{\partial D_0(\omega, k_{z\omega})}{\partial k_{z\omega}} \delta k \right) \delta k^2 &= \\ &= -\delta_b r_b \left(W'_0(\omega, k_{z\omega}) + \frac{\partial W'_0(\omega, k_{z\omega})}{\partial k_{z\omega}} \delta k \right) \times \\ &\times \frac{\omega_b^2 \gamma^{-3}}{u^2}, \quad (30) \end{aligned}$$

где $k_{z\omega} = \omega/u$, а $W'_0(\omega, k_z) = \chi_0^2 I_0(\chi_0 r_b) W_0(\omega, k_z)$.

Пусть выполнено условие одночастичного черенковского резонанса (т. е. плазменная волна находится в черенковском резонансе с электроном [18, 21])

$$D_0(\omega, k_{z\omega}) = 0, \quad (31)$$

и плотность пучка настолько мала, что вторым слагаемым в скобках в правой части дисперсионного

уравнения (30) можно пренебречь. Тогда для комплексного коэффициента усиления на частоте одночастичного черенковского резонанса получаем следующее выражение:

$$\delta k(\omega_0) = \frac{1 - i\sqrt{3}}{2} \frac{\omega_0}{u} \left| \delta_b r_b \frac{\omega_b^2 \gamma^{-3}}{\omega_0^2} \times \right. \\ \left. \times W'_0(\omega_0, k_0) \left(k_0 \frac{\partial D_0(\omega_0, k_0)}{\partial k_0} \right)^{-1} \right|^{1/3}, \quad (32)$$

где ω_0 — решение уравнения (31) (т. е. одна из частот, представленных на рис. 5), а $k_0 = \omega_0/u$. Коэффициент усиления (32) имеет обычную для любого одночастичного вынужденного эффекта Черенкова структуру. Условием применимости решения (32), т. е. условием одночастичности усиления, является неравенство

$$\left| \frac{1}{W'_0(\omega_0, k_0)} \frac{\partial W'_0(\omega_0, k_0)}{\partial k_0} \delta k(\omega_0) \right| \ll 1. \quad (33)$$

Последующие расчеты покажут, что левая часть (33) меньше единицы, хотя и незначительно (для тех параметров, которые, исходя из экспериментальных данных, мы выбрали при расчетах).

В принципе, уравнение (28) описывает и коллективный вынужденный эффект Черенкова на высокочастотной и низкочастотной поверхностных плазменных волнах. Действительно, используя выражения (17) и (27), преобразуем это уравнение к виду

$$D_0(\omega, k_z) D_b(\omega, k_z) = -\delta_b r_b \chi_0^2 \omega_b^2 \gamma^{-3} \theta(\omega, k_z), \quad (34)$$

где

$$D_b(\omega, k_z) = (\omega - k_z u)^2 - \Omega_b^2(\omega, k_z) \quad (35)$$

есть дисперсионное уравнение, определяющее частоты волн тонкого замагниченного электронного пучка в волноводе [2], а

$$\Omega_b^2(\omega, k_z) = \delta_b r_b \chi_0^2 \omega_b^2 \gamma^{-3} I_0^2(\chi_0 r_b) \times \\ \times \left(\frac{K_0(\chi_0 r_b)}{I_0(\chi_0 r_b)} - \frac{K_0(\chi_0 R)}{I_0(\chi_0 R)} \right), \\ \theta(\omega, k_z) = I_0^2(\chi_0 r_b) \left(\varepsilon_p \chi_0 S_1 I_0(\chi_0 r_1) \times \right. \\ \times \left(\frac{K_0(\chi_0 r_b)}{I_0(\chi_0 r_b)} - \frac{K_0(\chi_0 r_1)}{I_0(\chi_0 r_1)} + \right. \\ \left. + \frac{K_0(\chi_0 R)}{I_0(\chi_0 R)} \left(\frac{K_0(\chi_0 r_b)}{I_0(\chi_0 r_b)} - 1 \right) \right) + \\ \left. + \chi_p S_0 I_1(\chi_0 r_1) \times \right. \\ \times \left(\frac{K_0(\chi_0 r_b)}{I_0(\chi_0 r_b)} + \frac{K_1(\chi_0 r_1)}{I_1(\chi_0 r_1)} - \right. \\ \left. - \frac{K_0(\chi_0 R)}{I_0(\chi_0 R)} \left(\frac{K_0(\chi_0 r_b)}{I_0(\chi_0 r_b)} - 1 \right) \right) \Bigg). \quad (36)$$

Левая часть дисперсионного уравнения (34) записана в «канонической» форме уравнения связанных волн — волн плазмы и волн пучка [2]. Коэффициент связи волн содержится в величине $\theta(\omega, k_z)$, но выделить его аналитическое выражение, так же как и аналитические выражения для частот плазменных волн (аналогов Ω_b), не удастся.

При выполнении неравенства $\Omega_b^2 \ll \omega^2 \sim |k_z u|^2$ спектр медленной волны плотности заряда пучка можно определить формулой¹⁾

$$k_z^b(\omega) = k_{z\omega} \left(1 + \frac{\Omega_b(\omega, k_{z\omega})}{\omega} \right). \quad (37)$$

Частота резонанса волн ω_0^b определяется из уравнения $D_0(\omega, k_z^b(\omega)) = 0$. На резонансной частоте решение уравнения (34) ищется в виде

$$k_z(\omega_0^b) = k_0^b + \delta k, \quad (38)$$

где $k_0^b = k_z^b(\omega_0^b)$. Подставляя (38) в уравнение (34), находим следующее выражение для резонансного коэффициента усиления в режиме коллективного вынужденного эффекта Черенкова:

$$\delta k(\omega_0^b) = -i \left| \frac{1}{2} \delta_b r_b \chi_0^2 \frac{\omega_b^2 \gamma^{-3}}{u \Omega_b(\omega_0^b, k_0^b)} \times \right. \\ \left. \times \theta(\omega_0^b, k_0^b) \left(\frac{\partial D_0(\omega_0^b, k_0^b)}{\partial k_0^b} \right)^{-1} \right|^{1/2}. \quad (39)$$

Условием применимости решения (39), т. е. условием коллективности усиления, является неравенство

$$|\delta k(\omega_0^b) u| \ll \Omega_b(\omega_0^b, k_0^b). \quad (40)$$

Неравенство (40), по сути противоположное (33), при использованных в настоящей работе конкретных параметров системы выполнено не было.

Найдем теперь комплексные собственные функции плазменно-пучкового волновода. Эти функции, определяемые формулой (20), можно вычислить при помощи системы (21), полагая одну из амплитуд известной. Продемонстрируем менее громоздкий метод вычисления собственных функций $E(r)$. Запишем функцию

$$E(r) = \begin{cases} BI_0(\chi_0 r) + CK_0(\chi_0 r), & r < r_1, \\ PI_0(\chi_p r) + QK_0(\chi_p r), & r_1 < r < r_2, \\ DF_0(\chi_0 r), & r_2 < r < R, \end{cases} \quad (41)$$

¹⁾ Как известно [18, 22], неустойчивость и усиление имеют место только при резонансе плазменной волны с медленной волной пучка.

частично совпадающую с решением (20). Подстановка (41) в граничные условия на границах плазменной трубки дает следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} BI_0(\chi_0 r_1) + CK_0(\chi_0 r_1) - \\ -PI_0(\chi_p r_1) - QK_0(\chi_p r_1) = 0, \\ \chi_p (BI_1(\chi_0 r_1) - CK_1(\chi_0 r_1)) - \\ -\varepsilon_p \chi_0 (PI_1(\chi_p r_1) - QK_1(\chi_p r_1)) = 0, \\ PI_0(\chi_p r_2) + QK_0(\chi_p r_2) - DF_0(\chi_0 r_2) = 0, \\ \varepsilon_p \chi_0 (PI_1(\chi_p r_2) - QK_1(\chi_p r_2)) - \\ -\chi_p DF_1(\chi_0 r_2) = 0. \end{aligned} \quad (42)$$

Выражая из системы (42) постоянные C, P, Q, D через B , имеем

$$\begin{aligned} C = B\Theta^{-1}[\chi_p I_1(\chi_0 r_1)(UI_0(\chi_p r_1) + \\ + VK_0(\chi_p r_1)) + \varepsilon_p \chi_0 I_0(\chi_0 r_1)(-UI_1(\chi_p r_1) + \\ + VK_1(\chi_p r_1))], \\ D = B\Theta^{-1} \frac{\varepsilon_p}{r_1 r_2}, \quad P = D \frac{\chi_p r_2}{\varepsilon_p \chi_0} U, \\ Q = D \frac{\chi_p r_2}{\varepsilon_p \chi_0} V, \end{aligned} \quad (43)$$

где

$$\begin{aligned} U = \chi_p F_1(\chi_0 r_2) K_0(\chi_p r_2) + \\ + \varepsilon_p \chi_0 F_0(\chi_0 r_2) K_1(\chi_p r_2), \\ V = -\chi_p F_1(\chi_0 r_2) I_0(\chi_p r_2) + \\ + \varepsilon_p \chi_0 F_0(\chi_0 r_2) I_1(\chi_p r_2), \end{aligned} \quad (44)$$

$$\Theta = \chi_p K_1(\chi_0 r_1)(UI_0(\chi_p r_1) + VK_0(\chi_p r_1)) - \\ - \varepsilon_p \chi_0 K_0(\chi_0 r_1)(-UI_1(\chi_p r_1) + VK_1(\chi_p r_1)).$$

Если решение (41) справедливо вплоть до оси волновода $r = 0$, то должно быть $C = 0$, откуда и из (43) следует дисперсионное уравнение (17) плазменного волновода. Если есть пучок, то решение (41) справедливо только при $r > r_b$. При $r < r_b$ решение записывается в виде $E(r) = AI_0(\chi_0 r)$, и из граничных условий (10) с учетом (12) следуют соотношения

$$\begin{aligned} AI_0(\chi_0 r_b) = B(I_0(\chi_0 r_b) + C_1 K_0(\chi_0 r_b)), \\ B(I_1(\chi_0 r_b) - C_1 K_1(\chi_0 r_b)) - AI_1(\chi_0 r_b) = \\ = -\delta_b \chi_0 \frac{\omega_b^2 \gamma^{-3}}{(\omega - k_z u)^2} AI_0(\chi_0 r_b), \end{aligned} \quad (45)$$

где C_1 совпадает с первым выражением (43), взятым при $B = 1$. Из (45) получается дисперсионное уравнение (28) плазменного волновода с пучком. Если решение дисперсионного уравнения известно, то для

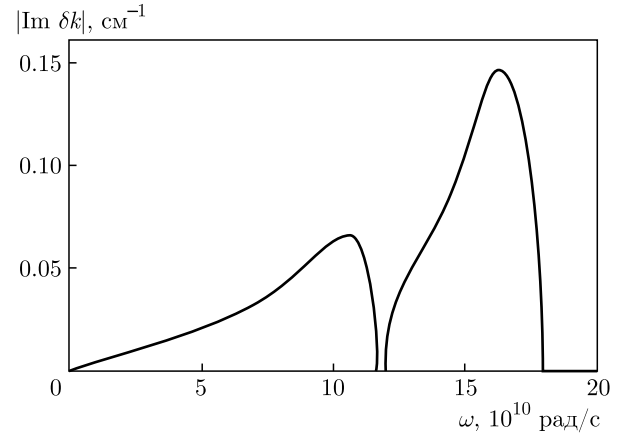


Рис. 6. Коэффициенты усиления поверхностных плазменных волн для случая плазмы «малой» плотности

построения собственной функции достаточно первого соотношения (45). Собственная функция определяется формулой

$$\begin{aligned} E(r) = AI_0(\chi_0 r), \quad r < r_b, \\ E(r) = A \frac{I_0(\chi_0 r_b)}{I_0(\chi_0 r_b) + C_1 K_0(\chi_0 r_b)} \times \end{aligned} \quad (46)$$

$$\times \begin{cases} I_0(\chi_0 r) + C_1 K_0(\chi_0 r), & r_b < r < r_1, \\ P_1 I_0(\chi_p r) + Q_1 K_0(\chi_p r), & r_1 < r < r_2, \\ D_1 F_0(\chi_0 r), & r_2 < r < R. \end{cases}$$

Здесь C_1, P_1, Q_1, D_1 — величины (43), взятые при $B = 1$.

Рассмотрим некоторые примеры вычисления коэффициентов усиления $\text{Im } \delta k(\omega)$ и соответствующих собственных функций поверхностных волн в плазменных волноводах с пучком. Зафиксируем следующие параметры $R = 2$ см, $r_1 = 1$ см, $r_2 = 1.2$ см, $r_b = 0.9$ см, $\delta_b = 0.1$ см, $u = 2.6 \cdot 10^{10}$ см/с, $\omega_b = 10^{10}$ рад/с и зададим, как и прежде, два значения плазменной частоты — низкую $\omega_p = 30 \cdot 10^{10}$ рад/с и высокую $\omega_p = 130 \cdot 10^{10}$ рад/с.

В случае $\omega_p = 30 \cdot 10^{10}$ рад/с (рис. 6) наблюдаются две отдельные области усиления — низкочастотная и высокочастотная, в которых происходит усиление соответствующих поверхностных волн. На частотах максимального коэффициента усиления левая часть неравенства (33) была равна 0.64 на низкой частоте и 0.36 на высокой. Очевидно, что при этом говорить о реализации одночастичного вынужденного эффекта Черенкова в «чистом» виде не приходится. Хотя скорее всего механизм усиления преимущественно является одночастичным.

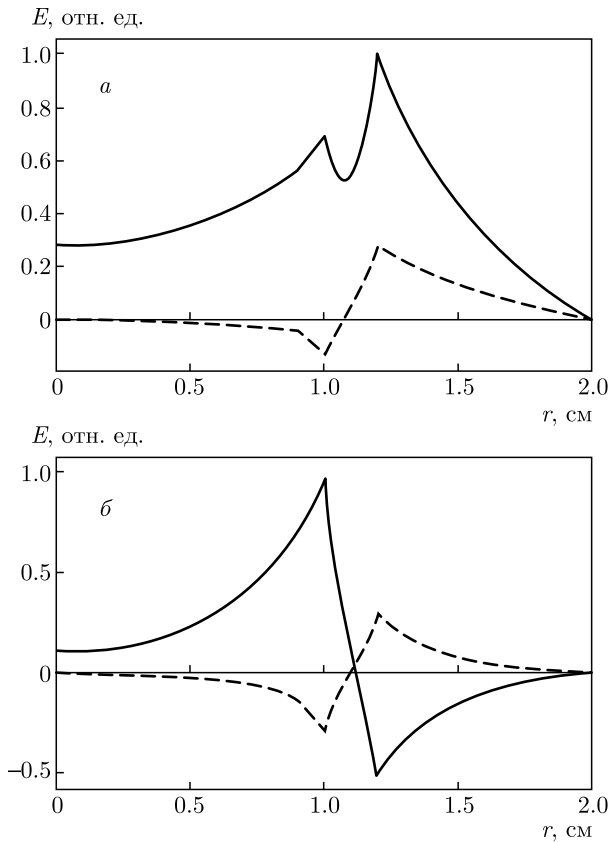


Рис. 7. Структуры поля поверхностных волн для случая «малой» плотности плазмы: *а* — низкочастотная волна, *б* — высокочастотная волна

Для вычисления соответствующих собственных функций необходимо в (46) подставить ω и k_z , связанные дисперсионным уравнением плазменно-пучкового волновода. Пусть вещественная частота ω из области усиления задана. Тогда из дисперсионного уравнения определяется комплексная величина $k_z(\omega)$. Как видно на рис. 6, максимум усиления в низкочастотной области приходится примерно на $\omega = 10.3 \cdot 10^{10}$ рад/с, при этом $k_z(\omega) \approx (3.99 - 0.066i)$ см⁻¹. Результат вычисления собственной функции представлен на рис. 7а и вполне соответствует собственной функции низкочастотной поверхностной волны. Небольшой излом графика функции $E(r)$ (особенно ее мнимой части — штриховая линия) приходится на координату пучка $r_b = 0.9$ см. Максимум усиления в высокочастотной области приходится примерно на $\omega = 16.3 \cdot 10^{10}$ рад/с, при этом $k_z(\omega) \approx (6.55 - 0.149i)$ см⁻¹. Соответствующий результат вычисления собственной функции представлен на рис. 7б и вполне соответствует собственной функции высокочастотной поверхностной волны.

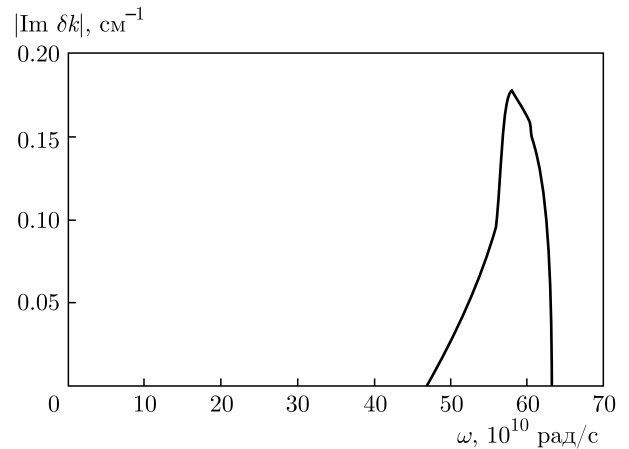


Рис. 8. Коэффициент усиления поверхностной плазменной волны для случая плазмы «большой» плотности

Совершенно иная картина наблюдается в случае плазмы «большой» плотности $\omega_p = 130 \cdot 10^{10}$ рад/с (рис. 8). Имеется только одна частотная область усиления, причем весьма узкая. Это обусловлено совместным действием двух факторов: слиянием коэффициентов усиления из-за сближения резонансных частот и уменьшением коэффициента усиления одной из волн из-за того, что ее собственная функция в точке прохождения пучка мала. Вторым фактором является определяющим²⁾. Обращает на себя внимание факт достаточно большого коэффициента усиления — порядка 0.2 см⁻¹ в максимуме. Левая часть неравенства (33) составляет 0.73, т.е. режим усиления, видимо, переходный от одночастичного к коллективному.

Согласно рис. 8 максимум усиления при $\omega_p = 130 \cdot 10^{10}$ рад/с приходится на $\omega = 58 \cdot 10^{10}$ рад/с, при этом $k_z(\omega) \approx (22.4 - 0.18i)$ см⁻¹. Подставляя эти значения в формулы (46), вычислим собственную функцию усиливаемой волны (рис. 9). Сравнивая этот рисунок с рис. 4, видим, что структура поля соответствует собственной функции высокочастотной поверхностной волны плотной плазмы — поле локализовано вблизи внутренней границы плазменной трубки (рис. 4а). Результаты расчетов показывают, что для выбранной геометрии плазменно-пучковой системы (пучок внутри плазменной трубки) при большой плотности плазмы всегда усиливает-

²⁾ При очень большой плотности электронного пучка определяющим может оказаться фактор близости частот высокочастотной и низкочастотной поверхностных волн. При этом разложения левой части дисперсионного уравнения (28) с точностью до линейных по δk членов будет недостаточно. Требуется более сложное рассмотрение, которому мы предполагаем посвятить отдельную работу.

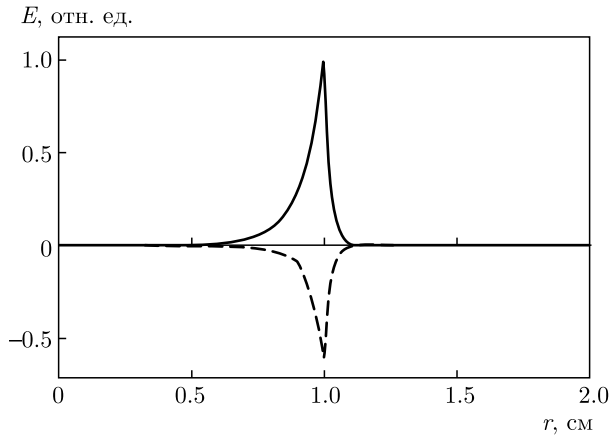


Рис. 9. Структура поля усиливаемой волны для случая «большой» плотности плазмы

ся высокочастотная поверхностная волна. Следует ожидать, что в случае электронного пучка, проходящего вне плазменной трубки, должна усиливаться поверхностная волна с собственной функцией типа представленной на рис. 4б.

5. НЕЛИНЕЙНЫЙ РЕЖИМ УСИЛЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ВОЛН В ВОЛНОВОДЕ С НЕЗАМАГНИЧЕННОЙ ТРУБЧАТОЙ ПЛАЗМОЙ

В линейном приближении высокочастотная составляющая плотности тока пучка определяется формулой, аналогичной формуле (3) (см. (7) и (11)):

$$j_b(t, z; r_b) = \frac{1}{2} [\langle j_b(r_b) \rangle \exp(-i\omega t + ik_z z) + \text{c.c.}]. \quad (47)$$

Формулу (47) можно записать по-другому:

$$j_b(t, z; r_b) = \frac{1}{2} [\langle j_b(z; r_b) \rangle \exp(-i\omega t + ik_{z\omega} z) + \text{c.c.}], \quad (48)$$

где $k_{z\omega} = \omega/u$ и введена медленная амплитуда, учитывающая нарастание возмущений за счет развития неустойчивости. В линейном приближении [23]

$$\langle j_b(z; r_b) \rangle = \sum_{n=1}^3 \alpha_n(\omega) \exp[i\delta k_n(\omega)z], \quad (49)$$

где $\delta k_n(\omega)$ — корни кубического уравнения (30), а $\alpha_n(\omega)$ — некоторые коэффициенты. Формула (48) справедлива и в нелинейном режиме, но для вычисления функции $\langle j_b(z; r_b) \rangle$ требуются нелинейные уравнения.

Используя выражение $E(r_b) = I_0(\chi_0 r_b)A$, перепишем формулу (26) в виде

$$D_0(\omega, k_z)E(r_b) = \frac{4\pi i}{\omega} \delta_b r_b W'_0(\omega, k_z) \langle j_b(r_b) \rangle, \quad (50)$$

где $W'_0(\omega, k_z)$ — функция, введенная в (30). Обобщением последней формулы на случай, когда амплитуда плотности тока пучка зависит от координаты z , является следующее псевдодифференциальное уравнение:

$$D_0(\omega, \hat{k}_z)E(z, r_b) = \frac{4\pi i}{\omega} \delta_b r_b W'_0(\omega, \hat{k}_z) \langle j_b(z; r_b) \rangle, \quad (51)$$

где $\hat{k}_z = -id/dz$ — оператор волнового числа.

Операторным аналогом (29) являются выражения

$$\hat{k}_z = \frac{\omega}{u} - i \frac{d}{dz}, \quad \hat{k}_z^2 = \frac{\omega^2}{u^2} - 2i \frac{\omega}{u} \frac{d}{dz}, \quad (52)$$

в которых оператор дифференцирования действует только на медленные амплитуды. С использованием (52) псевдодифференциальное уравнение (51) можно свести к следующему дифференциальному уравнению:

$$D_0(\omega, k_{z\omega})E(z, r_b) - i \frac{\partial D_0(\omega, k_{z\omega})}{\partial k_{z\omega}} \frac{dE(z, r_b)}{dz} = \frac{4\pi i}{\omega} \delta_b r_b \times \left(W'_0(\omega, k_{z\omega}) - i \frac{\partial W'_0(\omega, k_{z\omega})}{\partial k_{z\omega}} \frac{d}{dz} \right) \langle j_b(z; r_b) \rangle. \quad (53)$$

Уравнение (53) есть уравнение для зависящей от координаты z амплитуды напряженности поля $E(z, r_b)$ волны, возбуждаемой током $\langle j_b(z; r_b) \rangle$. Плазма в этом уравнении фигурирует через диэлектрическую проницаемость ϵ_p , поэтому плазма описывается в линейном приближении, что общепринято в теории резонансных черенковских неустойчивостей электронных пучков в плазме [11, 24]. Условием применимости линейного приближения для плазмы является неравенство, приведенное в (29) [25–27].

Для вычисления в нелинейном режиме усредненной плотности тока пучка $\langle j_b(z; r_b) \rangle$ используем метод интегрирования по начальным данным [25, 28], согласно которому функция $j_b(t, z; r_b)$ в выражении (7) определяется формулой

$$j_b(t, z; r_b) = en_{0b}u \int \delta[t - T(z, t_0)] dt_0, \quad (54)$$

где n_{0b} — невозмущенная плотность электронов пучка, t_0 — время влета электрона в область взаимодействия через плоскость $z = 0$, а $T(z, t_0)$ — время, за

которое электрон, влетевший в момент времени t_0 , окажется в точке z . Подставляя (54) в выражение (11), получаем

$$\langle j_b(z; r_b) \rangle = en_0 b u \frac{\omega}{\pi} \int_0^{2\pi/\omega} \exp\left(i\omega T(z, t_0) - i\frac{\omega}{u}z\right) dt_0. \quad (55)$$

Величина $T(z, t_0)$ является решением уравнений движения, в которых в качестве независимой переменной выбрана координата z

$$\frac{dT}{dz} = \frac{1}{V}, \quad V \frac{dP}{dz} = eE_z(T, z, r_b), \quad (56)$$

где $V(z, t_0)$ — скорость в точке z электрона, влетевшего в волновод в момент t_0 , $P(z, t_0)$ — релятивистский импульс электрона пучка, а $E_z(T, z, r_b)$ — поле (3) на траектории электрона. Уравнения (56) интегрируются со следующими условиями влета:

$$T(z=0) = t_0, \quad P(z=0) = mu\gamma. \quad (57)$$

Вводя изменение скорости электрона пучка

$$\tilde{V} = u - V, \quad (58)$$

считая, что $|\tilde{V}| \ll u$ и используя выражение (3), преобразуем уравнения движения (56) к виду

$$\frac{dT}{dz} = \frac{1}{u} \left(1 + \frac{\tilde{V}}{u}\right), \quad \frac{dP}{dz} = \frac{e}{u} \frac{1}{2} \times \quad (59)$$

$$\times \left[E(z, r_b) \exp\left(-i\omega T(z, t_0) + i\frac{\omega}{u}z\right) + \text{c.c.} \right].$$

Введем новую функцию

$$\tau(z, \tau_0) = T(z, t_0) - z/u, \quad \tau_0 = t_0 \quad (60)$$

и выразим импульс электрона пучка через изменение его скорости $\tilde{V}(z, \tau_0)$. Тогда выражение (55) преобразуется к виду

$$\langle j_b(z; r_b) \rangle = en_0 b u \frac{\omega}{\pi} \int_0^{2\pi/\omega} \exp(i\omega\tau(z, \tau_0)) d\tau_0, \quad (61)$$

а уравнения движения (59) запишутся следующим образом:

$$\frac{d\tau}{dz} = \frac{\tilde{V}}{u^2}, \quad \frac{d\tilde{V}}{dz} = -\frac{e}{mu\gamma^3} \left(1 + 2\frac{u^2}{c^2}\gamma^2\frac{\tilde{V}}{u}\right)^{3/2} \times \quad (62)$$

$$\times \frac{1}{2} [E(z, r_b) \exp(-i\omega\tau(z, \tau_0)) + \text{c.c.}].$$

Граничные условия для уравнений (62) следуют из условий (57) и выражений (58) и (60) и имеют вид

$$\tau(z=0) = \tau_0, \quad \tilde{V}(z=0) = 0. \quad (63)$$

Уравнения (53) и (62) вместе с выражением (61) образуют замкнутую систему, описывающую усиление поверхностных плазменных волн в волноводе с немагнитической линейной трубчатой плазмой и тонким релятивистским электронным пучком. Помимо условий влета электронов пучка (63) система должна быть дополнена условием возбуждения волны на входе усилителя

$$E(z=0, r_b) = E_0. \quad (64)$$

Введем обозначения

$$\delta(\omega) = \left| \delta_b r_b \frac{\omega_b^2 \gamma^{-3}}{\omega^2} W'_0(\omega, k_{z\omega}) \times \left(k_{z\omega} \frac{\partial D_0(\omega, k_{z\omega})}{\partial k_{z\omega}} \right)^{-1} \right|^{1/3}, \quad (65)$$

$$s = \text{sign} \left[W'_0(\omega, k_{z\omega}) \left(k_{z\omega} \frac{\partial D_0(\omega, k_{z\omega})}{\partial k_{z\omega}} \right)^{-1} \right],$$

$$\Delta(\omega) = D_0(\omega, k_{z\omega}) \left(\delta(\omega) k_{z\omega} \frac{\partial D_0(\omega, k_{z\omega})}{\partial k_{z\omega}} \right)^{-1},$$

$$d(\omega) = \frac{\delta(\omega)}{W'_0(\omega, k_{z\omega})} k_{z\omega} \frac{\partial W'_0(\omega, k_{z\omega})}{\partial k_{z\omega}}$$

и используем безразмерные переменные

$$\xi = \frac{\omega}{u} \delta(\omega) z, \quad \varepsilon(\xi) = \frac{eE(z, r_b)}{\delta^2(\omega) mu\omega\gamma^3}, \quad y_0 = \omega\tau_0, \quad (66)$$

$$y(\xi, y_0) = \omega\tau(z, \tau_0), \quad \eta(\xi, y_0) = \frac{\tilde{V}(z, \tau_0)}{\delta(\omega)u}.$$

В новых переменных нелинейные уравнения запишутся в виде

$$\frac{dy(\xi, y_0)}{d\xi} = \eta(\xi, y_0), \quad \frac{d\eta(\xi, y_0)}{d\xi} = -(1 + \mu(\omega)\eta(\xi, y_0))^{3/2} \times \quad (67)$$

$$\times \frac{1}{2} [\varepsilon(\xi) \exp(-iy(\xi, y_0)) + \text{c.c.}],$$

$$\frac{d\varepsilon(\xi)}{d\xi} + i\Delta(\omega)\varepsilon(\xi) = -s \left(1 - id(\omega)\frac{d}{d\xi}\right) \rho(\xi),$$

$$\rho(\xi) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \exp(iy(\xi, y_0)) dy_0,$$

где

$$\mu(\omega) = 2 \frac{u^2}{c^2} \gamma^2 \delta(\omega) \quad (68)$$

— параметр релятивизма электронного пучка. Уравнения (67) применимы во всем диапазоне частот, как в областях усиления поверхностных волн, так и вне зон усиления, где они описывают волны плотности заряда электронного пучка. Заметим, что частота ω в величине $\delta(\omega)$ из (65) может быть любой. В резонансе, при $\omega = \omega_0$, величина $\delta(\omega_0)$ определяет согласно формуле (32) резонансный коэффициент усиления при одночастичном вынужденном эффекте Черенкова пучка малой плотности. При других частотах уравнения (67) описывают динамику нерезонансной пучковой неустойчивости с пространственным инкрементом, определяемым дисперсионным уравнением (30), и, таким образом, $\delta(\omega)$ просто обозначение.

Надо иметь в виду, что комплексная амплитуда $E(z, r)$ не является в «чистом» виде амплитудой плазменной волны. В ней содержится вклад, обусловленный высокочастотным пространственным зарядом пучка. Чтобы разделить в уравнениях (67) вклады от пучка и плазмы в амплитуду поля $\varepsilon(\xi)$ введем новую функцию:

$$\varepsilon'(\xi) = \varepsilon(\xi) - isd(\omega)\rho(\xi). \quad (69)$$

После перехода к $\varepsilon'(\xi)$ второе и третье уравнения системы (67) преобразуются к виду

$$\begin{aligned} \frac{d\eta(\xi, y_0)}{d\xi} &= -(1 + \mu(\omega)\eta(\xi, y_0))^{3/2} \times \\ &\times (F_b(\xi, y_0) + F_p(\xi, y_0)), \quad (70) \\ \frac{d\varepsilon'(\xi)}{d\xi} + i\Delta(\omega)\varepsilon'(\xi) &= s[\Delta(\omega)d(\omega) - 1]\rho(\xi), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} F_b(\xi, y_0) &= \frac{1}{2}isd(\omega) \times \\ &\times (\rho(\xi) \exp[-iy(\xi, y_0)] - \text{c.c.}), \quad (71) \\ F_p(\xi, y_0) &= \frac{1}{2}(\varepsilon'(\xi) \exp[-iy(\xi, y_0)] + \text{c.c.}). \end{aligned}$$

В правой части первого уравнения (70) в явном виде выделены сила высокочастотного пространственно заряда пучка $F_b(\xi, y_0)$ и сила со стороны поля плазменной волны $F_p(\xi, y_0)$.

Из уравнений (70) несложно получить следующий первый интеграл:

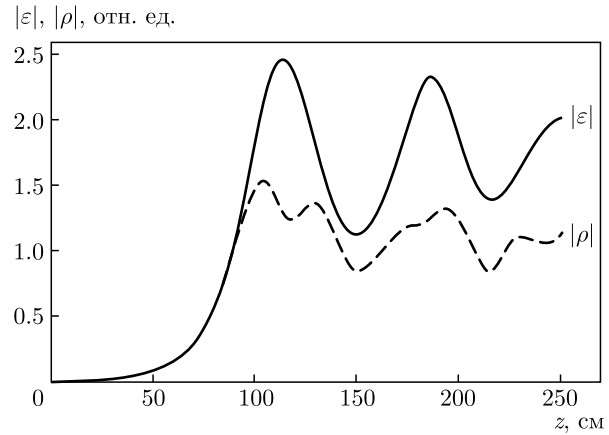


Рис. 10. Пространственная динамика амплитуд при усилении низкочастотной поверхностной волны в плазме «малой» плотности

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{dy_0}{\sqrt{1 + \mu(\omega)\eta(\xi, y_0)}} - \\ - \frac{\mu(\omega)}{8} \frac{s}{\Delta(\omega)d(\omega) - 1} |\varepsilon'(\xi)|^2 = \\ = 1 - \frac{\mu(\omega)}{8} \frac{s}{\Delta(\omega)d(\omega) - 1} |\varepsilon'(\xi = 0)|^2, \quad (72) \end{aligned}$$

Определим эффективность пучково-плазменного взаимодействия как относительное изменение средней кинетической энергии электронов пучка

$$\text{КПД} = \frac{\gamma - \langle \gamma(\xi, y_0) \rangle}{\gamma - 1}, \quad (73)$$

где $\gamma(\xi, y_0)$ — релятивистский фактор электрона, влетевшего в момент времени y_0 , в точке ξ волновода, а угловые скобки означают усреднение по всем электронам, влетевшим в волновод за период $2\pi/\omega$. Выражая скорость электрона через безразмерную величину $\eta(\xi, y_0)$, преобразуем (73) к виду

$$\text{КПД} = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \left(1 - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{dy_0}{\sqrt{1 + \mu(\omega)\eta(\xi, y_0)}} \right). \quad (74)$$

Используя далее интеграл (72), получим следующее выражение для эффективности усиления:

$$\begin{aligned} \text{КПД} &= -\frac{1}{8}\mu(\omega) \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{s}{\Delta(\omega)d(\omega) - 1} \times \\ &\times (|\varepsilon'(\xi)|^2 - |\varepsilon'(\xi = 0)|^2). \quad (75) \end{aligned}$$

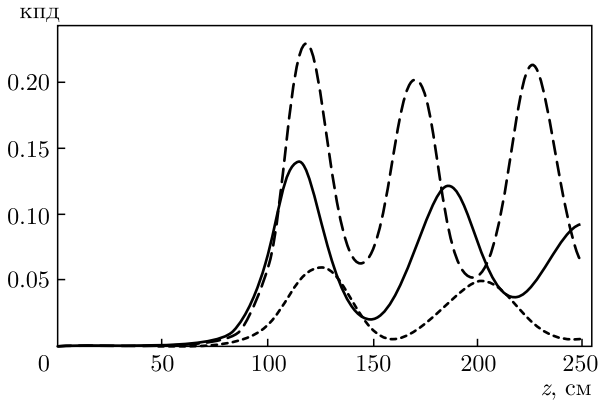


Рис. 11. Эффективности усиления низкочастотной поверхностной волны в случае плазмы «малой» плотности: сплошная кривая — на частоте максимального усиления; штриховая — на несколько большей частоте; пунктирная — на несколько меньшей частоте

Рассмотрим теперь результаты численного моделирования нелинейной динамики усиления. Ограничимся системами с теми же параметрами, что и в линейном приближении. Начнем со случая $\omega_p = 30 \cdot 10^{10}$ рад/с и усиления низкочастотной поверхностной волны на частоте максимального усиления $\omega = 10.3 \cdot 10^{10}$ рад/с. На рис. 10 в зависимости от размерной координаты z показана пространственная динамика безразмерной амплитуды напряженности электрического поля $|\varepsilon(z)|$ и амплитуды возмущения плотности заряда пучка $|\rho(z)|$. Если амплитуда напряженности поля приводится в относительных единицах, то амплитуда возмущения плотности пучка, в силу формул (54) и (55), фактически приведена в абсолютных единицах — абсолютное возмущение плотности есть $n_{0b}|\rho(z)|$. Поэтому при $|\rho(z)| \lesssim 2$ возмущения плотности пучка близки к максимуму (пучок замодулирован полностью).

Динамика амплитуд такая же, как при известном явлении захвата электронов пучка плазменной волной [26], что свидетельствует в пользу того, что механизмом неустойчивости является именно одночастичный вынужденный эффект Черенкова. Заметим, что уравнения (70) в точности перейдут в «классические» уравнения, описывающие захват электронов пучка ленгмюровской волной [11, 27], если в уравнении для $\eta(\xi, y_0)$ пренебречь силой высокочастотного пространственного заряда пучка $F_b(\xi, y_0)$. В нашем случае на стадии насыщения она примерно в четыре раза меньше силы со стороны плазменной волны.

На рис. 11 представлены результаты для эффективности усиления (75). На частоте максималь-

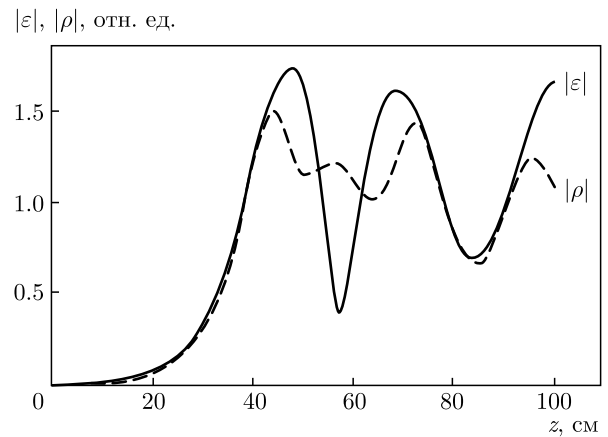


Рис. 12. Пространственная динамика амплитуд при усилении высокочастотной поверхностной волны в плазме «малой» плотности

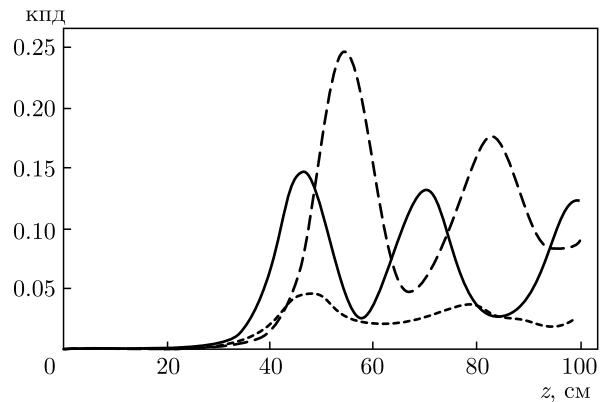


Рис. 13. Эффективности усиления высокочастотной поверхностной волны в случае плазмы «малой» плотности: сплошная кривая — на частоте максимального усиления; штриховая — на несколько большей частоте; пунктирная — на несколько меньшей частоте

ного усиления эффективность достигает 15%. На несколько большей частоте $\omega = 11 \cdot 10^{10}$ рад/с эффективность существенно выше, что обусловлено большим значением скорости электронов пучка относительно скорости плазменной волны [11]. Однако при дальнейшем увеличении частоты усиление срывается, что обусловлено выходом частоты за верхнюю границу зоны усиления (рис. 6). При уменьшении частоты ($\omega = 9.5 \cdot 10^{10}$ рад/с) эффективность падает.

Примерно так же выглядит усиление при $\omega_p = 30 \cdot 10^{10}$ рад/с и высокочастотной поверхностной волны (рис. 12) на частоте максимального усиления $\omega = 16.3 \cdot 10^{10}$ рад/с. Из-за увеличения коэффициента усиления нелинейное насыщение наступает

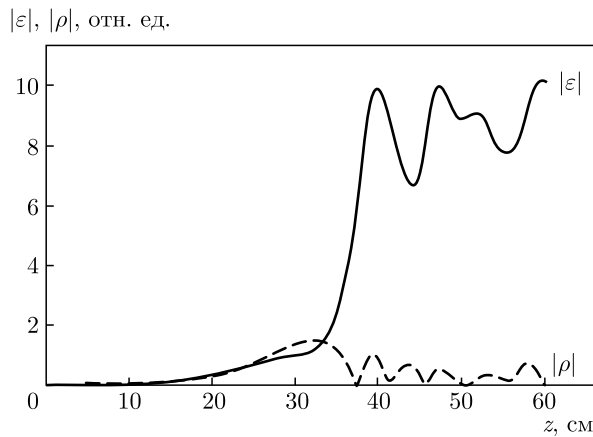


Рис. 14. Пространственная динамика амплитуд при усилении поверхностной волны в плазме «большой» плотности

на меньшем расстоянии при $z \sim 55$ см. Динамика эффективностей усиления представлена на рис. 13. Прослеживаются примерно те же закономерности, что и при усилении низкочастотной поверхностной волны.

Наконец, рассмотрим усиление поверхностных волн в случае плотной плазмы $\omega_p = 130 \cdot 10^{10}$ рад/с. В этом случае, как было установлено ранее, имеется всего одна область усиления. Пространственная динамика амплитуд на частоте максимального усиления $\omega = 58 \cdot 10^{10}$ рад/с представлена на рис. 14. Виден существенно менее регулярный ход амплитуд волн на стадии после насыщения. Более того, после насыщения амплитуда возмущения плотности пучка резко уменьшается, что говорит об ином механизме нелинейного насыщения. Значительно возросла сила высокочастотного пространственного заряда пучка — силы F_b и F_p примерно сравнялись. Известно, что если сила пространственного заряда превышает силу со стороны поля излучаемой волны, то механизмом нелинейного насыщения является самозахват [11] или опрокидывание волны плотности заряда пучка. В случае рис. 14 самозахват проявляется несомненно.

Эффективность усиления на частоте $\omega = 58 \cdot 10^{10}$ рад/с представлена на рис. 15. Отличительной особенностью является то, что при незначительном отклонении частоты ω от частоты максимального усиления наблюдается резкое уменьшение эффективности, что связано как с малой шириной зоны усиления, так и с начинающим проявляться изменением механизма взаимодействия пучка с плазменной волной.

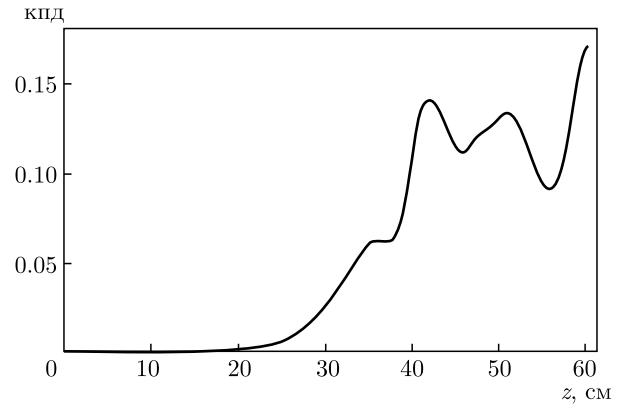


Рис. 15. Эффективность усиления поверхностной волны в случае плазмы «большой» плотности

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основываясь на приведенных выше результатах теоретических исследований, можно сделать следующий важный вывод: экспериментально реализованные на сегодняшний день мощные черенковские плазменные источники СВЧ-излучения могут быть успешно использованы для получения электромагнитного излучения с частотой в несколько раз, а то и на порядок, большей той частоты, на которую они были рассчитаны. Причем потребуются для этого минимальная доработка существующих экспериментальных установок — увеличение плотности плазмы, что легко реализуется технически и не связано с какими-либо дополнительными финансовыми вложениями. Фактически одно и то же устройство может быть одинаково эффективным в очень большом частотном диапазоне. Единственная экспериментальная трудность связана с тем, что при значительном увеличении частоты потребуются кардинальная и весьма затратная перестройка системы диагностики электромагнитного излучения. По-видимому, именно по этой причине на имеющихся экспериментальных установках не проводились исследования с плазмой очень большой плотности.

Благодарности. Авторы выражают благодарность О. Т. Лозе, инициировавшему проведенные теоретические исследования, за полезные обсуждения и интерес к работе.

Финансирование. Работа выполнена в рамках Договора № 313/1689-Д от 16.09.2019 г. с ГК Росатом.

ЛИТЕРАТУРА

1. П. С. Стрелков, УФН **189**, 494 (2019).
2. М. В. Кузелев, А. А. Рухадзе, П. С. Стрелков, *Плазменная релятивистская СВЧ-электроника*, ЛЕНАНД, Москва (2018).
3. A. V. Buleyko, N. G. Gusein-zade, and O. T. Loza, *Phys. Wave Phen.* **26**, 317 (2018).
4. Д. К. Ульянов, Р. В. Баранов, О. Т. Лоза, С. Е. Ернылева, И. Л. Богданкевич, ЖТФ **83**, 113 (2013).
5. П. С. Стрелков, И. Е. Иванов, Е. Д. Диас Михайлова, Д. В. Шумейко, *Физика плазмы* **47**, 257 (2021).
6. A. V. Buleyko, A. V. Ponomarev, O. T. Loza, D. K. Ulyanov, and S. E. Andreev, *Phys. Plasm.* **28**, 023303 (2021).
7. A. V. Buleyko, A. V. Ponomarev, O. T. Loza, D. K. Ulyanov, K. A. Sharupov, S. A. Shunailov, and M. I. Yalandin, *Phys. Plasmas* **28**, 023304 (2021).
8. И. Л. Богданкевич, В. О. Литвин, О. Т. Лоза, *Кр. сообщ. по физике* **43**, 19 (2016).
9. S. E. Ernyleva and O. T. Loza, *Phys. Wave Phen.* **25**, 56 (2017).
10. V. O. Litvin and O. T. Loza, *Phys. Wave Phen.* **25**, 52 (2017).
11. М. В. Кузелев, А. А. Рухадзе, *Электродинамика плотных электронных пучков в плазме*, ЛЕНАНД, Москва (2018).
12. М. В. Кузелев, *Физика плазмы* **28**, 544 (2002).
13. И. Н. Карташов, М. В. Кузелев, А. А. Рухадзе, *Физика плазмы* **35**, 194 (2009).
14. И. Н. Карташов, М. В. Кузелев, ЖЭТФ **156**, 355 (2019).
15. И. Н. Карташов, М. В. Кузелев, ЖЭТФ **158**, 738 (2020).
16. А. Ф. Александров, Л. С. Богданкевич, А. А. Рухадзе, *Основы электродинамики плазмы*, Высшая школа, Москва (1988).
17. М. В. Кузелев, А. А. Рухадзе, *Труды института общей физики им. А. М. Прохорова* **72**, 3 (2016).
18. М. В. Кузелев, А. А. Рухадзе, УФН **152**, 285 (1987).
19. I. L. Bogandkevich, S. E. Andreev, N. G. Gusein-zade, and D. K. Ulyanov, *J. Russ. Laser Res.* **40**, 435 (2019).
20. С. Е. Андреев, И. Л. Богданкевич, Н. Г. Гусейн-заде, Д. К. Ульянов, *Физика плазмы* **45**, 645 (2019).
21. В. Л. Гинзбург, *Теоретическая физика и астрофизика*, Наука, Москва (1981).
22. М. В. Незлин, *Динамика пучков в плазме*, Энергоиздат, Москва (1982).
23. М. В. Кузелев, А. А. Рухадзе, *Методы теории волн в средах с дисперсией*, Наука, Москва (2007).
24. А. А. Иванов, *Физика сильнонеравновесной плазмы*, Атомиздат, Москва (1977).
25. Ю. В. Бобылев, М. В. Кузелев, *Нелинейные явления при резонансных взаимодействиях электронных пучков с плазмой*, Наука, Москва (2008).
26. Р. И. Ковтун, А. А. Рухадзе, ЖЭТФ **58**, 1709 (1970).
27. В. Д. Шапиро, В. И. Шевченко, ЖЭТФ **60**, 1023 (1971).
28. Ю. В. Бобылёв, М. В. Кузелев, А. А. Рухадзе, *Радиотехника и электроника* **47**, 166 (2002).

К ТЕОРИИ ОМИЧЕСКИХ ПОТЕРЬ В LC -СИСТЕМАХ

Б. Я. Балагуров*

*Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля Российской академии наук
119334, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 22 октября 2021 г.,
после переработки 22 октября 2021 г.
Принята к публикации 25 октября 2021 г.

Рассмотрена низкочастотная проводимость LC -систем — неупорядоченных решеток с индуктивными (L) и емкостными (C) связями в переменном электрическом поле. Выясняются условия, при которых в таких системах возможны реальные (омические) потери энергии.

DOI: 10.31857/S0044451022020146

В ходе исследований электрических свойств двумерных композитов [1] Дыхне, в частности, показал, что для случайно-неоднородных бинарных систем их эффективная проводимость σ_e равна среднему геометрическому от проводимостей компонент, если их концентрации равны. Этот же результат справедлив для системы со структурой шахматной доски, а также для неупорядоченной квадратной решетки с половинным составом. Применение полученной формулы для σ_e к LC -решетке, связи которой представляют собой индуктивность L или электрическую емкость C , привело к неожиданному результату: в системе, состоящей только из недиссипативных элементов, оказались возможны потери энергии. Таким образом система, состоящая из реактивных (L - и C -) сопротивлений, может обладать реальным активным (омическим) сопротивлением.

В настоящей работе проблема существования реальных потерь энергии в LC -системах обсуждается с общих позиций. Показано, что омическим сопротивлением могут обладать как двумерные, так и трехмерные LC -системы. Оказалось, что вещественная часть величины σ_e , отвечающая за потери энергии, непосредственно связана с особенностями σ_e как аналитической функции отношения проводимостей компонент. Поэтому исследование физического явления омических потерь в LC -системах может прояснить некоторые чисто математические вопросы.

1. Сначала рассмотрим двумерную задачу о проводимости изотропного двухкомпонентного композита. Эффективная проводимость σ_e такой системы является функцией трех основных аргументов:

$$\sigma_e = \sigma_e(p; \sigma_1, \sigma_2). \quad (1)$$

Здесь σ_1 и σ_2 — проводимости компонент, p — безразмерная концентрация (доля занимаемой площади) первой компоненты; концентрация второй компоненты равна $1 - p$. Для решеток под концентрацией p понимается доля связей с проводимостью σ_1 .

В работах [1, 2] для величины σ_e получено так называемое соотношение взаимности:

$$\sigma_e(p; \sigma_1, \sigma_2) \sigma_e(p; \sigma_2, \sigma_1) = \sigma_1 \sigma_2. \quad (2)$$

Здесь второй множитель в левой части равенства относится к взаимной системе, отличающейся от исходной заменой $\sigma_1 \rightleftharpoons \sigma_2$. Соотношение (2) было выведено в работе [2] для систем с периодическим расположением включений. Применение преобразования симметрии позволило доказать (см. [1]), что соотношение (2) справедливо для двумерных систем произвольной структуры, в том числе и неупорядоченной.

Следуя работе [1], рассмотрим теперь бинарную модель со случайным распределением компонент. Такая система при замене проводимостей $\sigma_1 \rightleftharpoons \sigma_2$ становится взаимной, а при дополнительной замене концентрации ($p \rightarrow 1 - p$) возвращается в исходное состояние. Поэтому при такой двойной замене эффективная проводимость не меняется, так что

$$\sigma_e(p; \sigma_1, \sigma_2) = \sigma_e(1 - p; \sigma_2, \sigma_1). \quad (3)$$

* E-mail: balagurov@deom.chph.ras.ru, byabalagurov@mail.ru

С учетом этого равенства соотношение взаимности (2) для подобных систем принимает вид

$$\sigma_e(p; \sigma_1, \sigma_2) \sigma_e(1-p; \sigma_1, \sigma_2) = \sigma_1 \sigma_2. \quad (4)$$

Отсюда при $p = 1/2$ получаем [1]

$$\sigma_e(1/2; \sigma_1, \sigma_2) = \sqrt{\sigma_1 \sigma_2}. \quad (5)$$

Этот результат, как следует из его вывода, справедлив для изотропной двумерной бинарной системы со случайным распределением компонент. В то же время для модели со структурой шахматной доски имеем $p = 1/2$, а замена $\sigma_1 \rightleftharpoons \sigma_2$ ее не меняет. Поэтому уже из соотношения взаимности (2) следует, что результат (5) справедлив и для этой упорядоченной модели. Выражение (5) было получено также в ходе непосредственного решения (с определением напряженности электрического поля в каждой ячейке) задачи о проводимости модели со структурой шахматной доски [3]. Можно показать [1] также, что результат (5) справедлив и для квадратной решетки со случайным распределением проводимостей связей при их равной концентрации. Отметим, что во всех трех случаях концентрация $p = 1/2$ является критической (порогом протекания), при которой происходит фазовый переход металл–диэлектрик [4].

Рассмотрим квадратную решетку, связи которой содержат не обычные проводимости или сопротивления, а индуктивность (L -связи) или электрическую емкость (C -связи), случайным образом распределенные. Проводимости таких связей чисто мнимые (бездиссипативные) и имеют вид [5]

$$\sigma_1 = \sigma_L = i \frac{c^2}{\omega L}, \quad \sigma_2 = \sigma_C = -i\omega C, \quad (6)$$

где под частотой ω следует понимать величину $\omega + i0$. В (6) L — индуктивность, C — емкость, c — скорость света.

Эффективная проводимость подобной LC-системы в квазистационарном приближении [5] определяется подстановкой мнимых проводимостей (6) в выражение для σ_e системы той же структуры с обычными проводимостями. Для неупорядоченной квадратной LC-решетки с половинным составом подстановка σ_1 и σ_2 из (6) в формулу (5) дает [1]

$$\sigma_e(1/2; \sigma_L, \sigma_C) = c \sqrt{\frac{C}{L}}. \quad (7)$$

Этот результат кажется парадоксальным. Действительно, согласно формуле (7) LC-система с чисто мнимыми (бездиссипативными) элементами обладает вещественной эффективной проводимостью. Это

означает, что в ней происходит, как и в системе с обычными (активными) сопротивлениями, диссипация энергии, т. е. имеются омические потери.

Объяснение этого феномена дано в работе [1] и состоит в следующем. В неупорядоченной решетке имеются LC-контуры с различными собственными частотами. Энергия электрического поля затрачивается на резонансное возбуждение колебаний этих контуров. При этом реальная диссипация энергии происходит при наличии в системе сколь угодно малого поглощения. В бесконечной решетке спектр собственных частот непрерывен, так что поглощение энергии происходит в широком диапазоне изменения частоты ω .

Приведенные рассуждения иллюстрируют результат (7), относящийся к квадратной решетке с критической концентрацией. Однако эта аргументация в равной мере применима к любым LC-решеткам (в том числе трехмерным) и не ограничивается критической концентрацией. Поэтому следует ожидать, что существование омического сопротивления в LC-системах является достаточно общим явлением.

2. Существование омической проводимости в LC-системе было установлено в работе [1] на частном примере неупорядоченной квадратной решетки с критической концентрацией. Для исследования этой проблемы в случае произвольной LC-решетки необходимо выяснить некоторые общие свойства эффективной проводимости σ_e из формулы (1) при комплексных значениях аргументов σ_1 и σ_2 [6, 7]. Для этого введем безразмерную эффективную проводимость f согласно выражению

$$\sigma_e(p; \sigma_1, \sigma_2) = \sigma_1 f(p, h), \quad h = \frac{\sigma_2}{\sigma_1}. \quad (8)$$

В трехмерном случае под p следует понимать долю объема, занятого первой компонентой, или долю связей с проводимостью σ_1 в решетке.

Согласно [5] в переменном электрическом поле проводимость $\sigma(\omega)$ наравне с диэлектрической проницаемостью является аналитической функцией комплексной частоты ω при $\text{Im } \omega > 0$. Кроме того, $\sigma(\omega)$ не имеет в верхней полуплоскости ω нулей. Поэтому безразмерная проводимость f , равная отношению двух аналитических функций σ_e/σ_1 , также аналитична при $\text{Im } \omega > 0$. Зависимость функции

$$f = f(p, \zeta) \quad (9)$$

осуществляется через аргумент

$$\zeta = \zeta(\omega) = \frac{\sigma_2(\omega)}{\sigma_1(\omega)}. \quad (10)$$

В свою очередь, с помощью этого соотношения верхняя полуплоскость ω конформно отображается на некоторую область комплексной плоскости переменной ζ . В этой области величина $f(p, \zeta)$ аналитична уже как функция аргумента ζ . Наибольшую по площади область дает отображение (10) с проводимостями компонент, по форме совпадающими с σ_L и σ_C из формулы (6):

$$\zeta(\omega) = -\frac{\omega^2}{\Omega^2}, \quad \Omega = \frac{c}{\sqrt{LC}}. \quad (11)$$

Однако здесь, в отличие от (6), величина ω является комплексной переменной, определенной на всей верхней полуплоскости; Ω — томсоновская частота. Соотношением (11) верхняя полуплоскость $\text{Im } \omega > 0$ отображается на всю комплексную плоскость ζ за исключением луча $\text{Im } \zeta = 0$ и $-\infty \leq \text{Re } \zeta \leq 0$. Следовательно, безразмерная эффективная проводимость $f(p, \zeta)$ как функция аргумента ζ аналитична на всей комплексной плоскости с разрезом вдоль отрицательной действительной полуоси. При этом любые особенности функции $f(p, \zeta)$ могут находиться только на этом луче.

Согласно [5]

$$\sigma(-\omega^*) = \sigma_*(\omega), \quad (12)$$

так что

$$f(p, \zeta(-\omega^*)) = f^*(p, \zeta(\omega)), \quad (13)$$

или при

$$\zeta = \xi + i\eta \quad (14)$$

имеем

$$f(p, \xi - i\eta) = f^*(p, \xi + i\eta). \quad (15)$$

Положив в (15) $\xi = -t$ и $\eta = 0$, находим следующие соотношения симметрии:

$$\text{Re } f^{(-)}(p, -t) = \text{Re } f^{(+)}(p, -t), \quad (16)$$

$$\text{Im } f^{(-)}(p, -t) = -\text{Im } f^{(+)}(p, -t), \quad (17)$$

где $0 \leq t \leq \infty$. Здесь индексы «плюс» и «минус» обозначают принадлежность функции f к верхнему или нижнему берегу разреза вдоль луча — отрицательной действительной полуоси.

Как известно [4], в двумерном случае имеется одна критическая концентрация p_c (порог протекания). При концентрации первой компоненты $p < p_c$

в бинарной двумерной системе имеется протекание только по второй компоненте, а при $p > p_c$ — только по первой. В трехмерном случае ситуация иная — здесь критических концентраций две: p_{c1} и p_{c2} ($p_{c1} < p_{c2}$). При $p < p_{c1}$ есть протекание только по второй компоненте, в диапазоне $p_{c1} < p < p_{c2}$ сосуществуют протекания по обоим компонентам, а при $p > p_{c2}$ отсутствует протекание по второй компоненте.

Если $\sigma_2 = 0$, то при изменении концентрации первой компоненты от $p > p_{c1}$ до $p < p_{c1}$ в точке $p = p_{c1}$ происходит фазовый переход металл-диэлектрик: эффективная проводимость σ_e при всех $p \leq p_{c1}$ равна нулю. Если же $\sigma_2 \neq 0$, но мала ($\sigma_2/\sigma_1 \ll 1$), то в окрестности критической концентрации p_{c1} в поведении эффективной проводимости имеются известные аномалии, которые описываются в рамках гипотезы подобия [4]. Ниже понадобится выражение для безразмерной эффективной проводимости f в самой критической точке:

$$f(p_{c1}, h) = a_0 h^s, \quad h \ll 1. \quad (18)$$

Здесь s — критический индекс ($0 < s < 1$), $a_0 \sim 1$ — численный коэффициент. В двумерном случае $s = 1/2$, $a_0 = 1$ и для функции f имеем

$$f(1/2, h) = \sqrt{h} \quad (19)$$

— ср. с формулой (5).

В противоположном случае $h \gg 1$ с учетом определения величины p_{c2} для функции $f(p, h)$ имеем следующие асимптотики:

$$p > p_{c2} : \quad f(p, h) \approx f(p, \infty) + \dots, \quad (20)$$

$$p < p_{c2} : \quad f(p, h) \approx hA(p) + B(p) + \dots \quad (21)$$

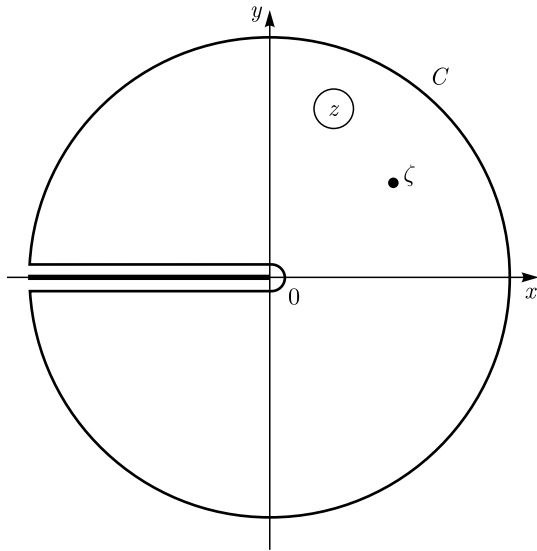
Здесь символ \approx означает асимптотическое выражение. В (21) $A(p)$ и $B(p)$ — некоторые функции концентрации p . Опущенные в (20), (21) члены разложения имеют порядок $1/h$ и выше.

Вычисляя при $p > p_{c2}$ интеграл

$$\int \frac{f(p, z) - f(p, \infty)}{z - \zeta} \frac{dz}{2\pi i}, \quad (22)$$

взятый вдоль контура, представляющего собой окружность бесконечного радиуса, дополненную обходом вокруг разреза (см. рисунок), получим следующее дисперсионное соотношение:

$$p > p_{c2} : \quad f(p, \zeta) = f(p, \infty) - \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\text{Im } f^{(+)}(p, -t)}{t + \zeta} dt. \quad (23)$$



Аналогичным образом находим второе дисперсионное соотношение:

$$p < p_{c2} : f(p, \zeta) = \zeta A(p) + B(p) - \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\text{Im} f^{(+)}(p, -t)}{t + \zeta} dt. \quad (24)$$

Следовательно, знание величины $\text{Im} f^{(+)}(p, -t)$ как функции действительной переменной t позволяет с помощью этих соотношений находить $f(p, \zeta)$ в любой точке комплексной плоскости ζ . Если безразмерная эффективная проводимость $f(p, h)$ известна во всем интервале $0 \leq h \leq \infty$, то функцию $\text{Im} f^{(+)}(p, -t)$ можно найти из соотношений (23), (24) при $\zeta = h$, рассматривая их как интегральные уравнения.

3. В рассматриваемом квазистационарном приближении выражение для эффективной проводимости LC-системы следует из общей формулы (8) с заменой $h \rightarrow \zeta$ при подстановке величин $\sigma_1 = \sigma_L$ и $\sigma_2 = \sigma_C$ из (6). В результате аргумент ζ примет вид

$$\zeta = \frac{\sigma_C}{\sigma_L} = -\frac{(\omega + i0)^2}{\Omega^2} \quad (25)$$

с Ω из формулы (11). Здесь ω — реальная (вещественная) частота $\omega > 0$. Подстановка (25) вместо h в формулу (8) дает

$$\sigma_e(p; \sigma_L, \sigma_C) = i \frac{c^2}{\omega L} f^{(-)}(p, -\omega^2/\Omega^2). \quad (26)$$

Индекс «минус» у функции f означает, что она должна быть взята на нижнем берегу разреза.

Отделяя мнимую и действительную части, получим

$$\text{Im} \sigma_e(p; \sigma_L, \sigma_C) = \frac{c^2}{\omega L} \text{Re} f^{(-)}(p, -\omega^2/\Omega^2), \quad (27)$$

$$\text{Re} \sigma_e(p; \sigma_L, \sigma_C) = -\frac{c^2}{\omega^2} \text{Im} f^{(-)}(p, -\omega^2/\Omega^2). \quad (28)$$

С учетом соотношений симметрии (16), (17) выражения (27), (28) принимают вид

$$\text{Im} \sigma_e(p; \sigma_L, \sigma_C) = \frac{c^2}{\omega L} \text{Re} f^{(+)}(p, -\omega^2/\Omega^2), \quad (29)$$

$$\text{Re} \sigma_e(p; \sigma_L, \sigma_C) = \frac{c^2}{\omega L} \text{Im} f^{(+)}(p, -\omega^2/\Omega^2). \quad (30)$$

Здесь индекс «плюс» означает верхний берег разреза. Таким образом, омическая проводимость $\text{Re} \sigma_e$ LC-системы выражается через ту же функцию $\text{Im} f^{(+)}(p, -t)$, которая входит в дисперсионные соотношения (23), (24).

Величина $\text{Im} f^{(+)}(p, -t)$ может быть найдена в явном виде для некоторых частных случаев. Так, в двумерном случае из формулы (19) следует

$$f^{(+)}(1/2, -t) = i \sqrt{t}, \quad (31)$$

так что

$$\text{Im} f^{(+)}(1/2, -\omega^2/\Omega^2) = \frac{\omega}{\Omega}. \quad (32)$$

Соответствующая действительная часть функции $f^{(+)}(1/2, -\omega^2/\Omega^2)$ в этом случае равна нулю. Подстановка выражения (32) в общую формулу (30) приводит, как и следует, к результату (7).

Из формулы (18) находим

$$f^{(+)}(p_{c1}, -t) = a_0 t^s e^{i s \pi}, \quad (33)$$

откуда следует

$$\text{Re} f^{(+)}(p_{c1}, -\omega^2/\Omega^2) = a_0 \left(\frac{\omega}{\Omega}\right)^{2s} \cos s \pi, \quad (34)$$

$$\text{Im} f^{(+)}(p_{c1}, -\omega^2/\Omega^2) = a_0 \left(\frac{\omega}{\Omega}\right)^{2s} \sin s \pi. \quad (35)$$

Подстановка выражения (35) в общую формулу (30) дает

$$\text{Re} \sigma_e(p_{c1}; \sigma_L, \sigma_C) = a_0 \frac{c^2}{L} \frac{\omega^{2s-1}}{\Omega^{2s}} \sin s \pi. \quad (36)$$

В трехмерном случае $s \approx 0.7$ [7] и $2s - 1 \approx 0.4$, так что величина $\text{Re} \sigma_e$ зависит от частоты примерно как $\omega^{1/2}$.

Таким образом, согласно формуле (30) действительная часть эффективной проводимости LC -решетки, ответственная за омические потери, выражается через величину $\text{Im } f^{(+)}(p, -t)$, характеризующую математическую особенность функции $f(p, \zeta)$ на разрезе плоскости комплексного аргумента ζ . Эта же величина входит в дисперсионные соотношения (23), (24), из которых следует, что $\text{Im } f^{(+)}(p, -t)$ отлична от нуля при любой концентрации p . С другой стороны, при фиксированном p величина $\text{Im } f^{(+)}(p, -t) \neq 0$ по крайней мере в некотором диапазоне изменения аргумента t . Следует ожидать поэтому, что для неупорядоченных LC -решеток $\text{Re } \sigma_e \neq 0$ в широкой области изменения как концентрации, так и частоты. Отличие $\text{Re } \sigma_e$ от нуля означает наличие омических потерь энергии, так что должно выполняться неравенство

$$\text{Im } f^{(+)}(p, -t) \geq 0 \quad (37)$$

при всех $0 \leq t \leq \infty$. Справедливость этого неравенства подтверждается частными случаями — см. (32) и (35).

Как отмечено в разд. 1, в неупорядоченной LC -решетке имеется множество LC -цепочек с различными собственными частотами ω_ν . Поэтому величина $f(p, -\omega^2/\Omega^2)$ как отклик на внешнее переменное электрическое поле представляет собой сумму резонансных слагаемых типа $1/(\omega^2 - \omega_\nu^2)$, чему в функции $f(p, \zeta)$ отвечают слагаемые полюсного вида $1/(\zeta + t_\nu)$, где $t_\nu > 0$. Поэтому при $\zeta = -t + i0$ для мнимой части $f^{(+)}(p, -t)$ получаем

$$\text{Im } f^{(+)}(p, -t) = \sum_{\nu} F_{\nu} \delta(t - t_{\nu}), \quad F_{\nu} > 0. \quad (38)$$

Для LC -решеток конечного размера спектр частот ω_ν , как и величин t_ν , дискретен, так что $\text{Im } f^{(+)}(p, -t)$ представляет собой сумму дельта-функций. При переходе к решеткам бесконечного размера спектр величин t_ν становится непрерывным, сумма в (38) заменяется на интеграл и зависимость $\text{Im } f^{(+)}(p, -t)$ от аргумента t становится «нормальной» — монотонной. Приведенные частные примеры (32) и (35) относятся к бесконечным системам, так как только для них имеет смысл введение понятия критической концентрации.

Ввиду важности величины $\text{Im } f^{(+)}(p, -t)$ для всей задачи о проводимости двухкомпонентных композитов необходимо найти мнимую часть $f^{(+)}(p, -t)$ для неупорядоченных, например, квадратной и кубической LC -решеток. В принципе это можно сделать, вычисляя в ходе обычного компьютерного эксперимента в режиме постоянного тока эффективную проводимость σ_e решетки с проводимостями $\sigma_1 = 1, \sigma_2 = -t + i\varepsilon$, где $\varepsilon \rightarrow +0$. Затем величина $\text{Im } f^{(+)}(p, -t)$ определяется из соотношения

$$\sigma_e(p; 1, -t + i\varepsilon) = f(p, -t + i\varepsilon)$$

при достаточно малом ε . Такой подход, однако, весьма трудозатратен, а использование полученной для $\text{Im } f^{(+)}(p, -t)$ «гребенки» не слишком удобно. Более реалистичным представляется определение величины $\text{Im } f^{(+)}(p, -t)$ из дисперсионных соотношений (23), (24) как интегральных уравнений. Аппроксимируя $\text{Im } f^{(+)}(p, -t)$ ступенчатой функцией аргумента t , результат вычислений получим в виде гистограммы. Этот график даст общее представление о зависимости функции $\text{Im } f^{(+)}(p, -t)$ от t при заданной концентрации p .

ЛИТЕРАТУРА

1. А. М. Дыхне, ЖЭТФ **59**, 110 (1970).
2. J. V. Keller, J. Math. Phys. **5**, 548 (1964).
3. Ю. П. Емец, *Электрические характеристики композиционных материалов с регулярной структурой*, Наукова думка, Киев (1986).
4. A. L. Efros and B. I. Shklovskii, Phys. Stat. Sol. (b) **76**, 475 (1976).
5. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Наука, Москва (1992).
6. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **88**, 1664 (1985).
7. Б. Я. Балагуров, *Электрофизические свойства композитов. Макроскопическая теория*, URSS, Москва (2015).

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. И. Смирнов*

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 А. В. ФИЛИППОВ,
д-р физ.-мат. наук Д. Е. ХМЕЛЬНИЦКИЙ
(зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ в Великобритании),
д-р физ.-мат. наук А. А. ЦЕЙТЛИН, акад. А. М. ЧЕРЕПАЩУК

Редакционный совет:

акад. А. Ф. АНДРЕЕВ (председатель),
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