РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

ПИСЬМА

B

ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

том 113

Выпуск 11 10 июня 2021

Журнал издается под руководством Отделения физических наук РАН

Главный редактор В. М. Пудалов

Заместители главного редактора Г. Е. Воловик, В. П. Пастухов

Зав. редакцией И.В.Подыниглазова

Адрес редакции	119334 Москва, ул. Косыгина 2
тел./факс	(499)-137-75-89
e-mail	letters@kapitza.ras.ru
Web-страница	http://www.jetpletters.ru

Интернет-версия английского издания http://www.springerlink.com/content/1090-6487

[©] Российская академия наук, 2021

[©] Редколлегия журнала "Письма в ЖЭТФ" (составитель), 2021

Экспериментальное исследование самокомпрессии волнового пакета при полном внутреннем отражении в прозрачном диэлектрике

С.В. Чекалин¹⁾, В.О. Компанец

Институт спектроскопии РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия

Поступила в редакцию 21 апреля 2021 г. После переработки 22 апреля 2021 г. Принята к публикации 22 апреля 2021 г.

Впервые экспериментально исследовано формирование и самовосстановление одноцикловой световой пули после полного внутреннего отражения фемтосекундного импульса в прозрачном диэлектрике в области аномальной дисперсии групповой скорости.

DOI: 10.31857/S123456782111001X

1. Введение. Локализация светового поля при филаментации мощного фемтосекундного лазерного излучения в прозрачных диэлектриках вызывает сильный рост нелинейно-оптического взаимодействия светового поля со средой [1–3], приводя к изменениям пространственно-временных и спектральных параметров распространяющихся импульсов. Наиболее существенным это оказывается при филаментации в условиях аномальной дисперсии групповой скорости (АДГС), когда формируются световые пули (СП) – экстремально сжатые волновые пакеты с высокой локализацией светового поля не только в пространстве, но и во времени [1, 4]. Наибольший интерес в исследованиях СП связан с динамикой их формирования и распада, а также с их робастностью при распространении в различных условиях. В ряде работ продемонстрировано, что СП являются исключительно робастными образованиями, параметры которых определяются только нелинейными и дисперсионными свойствами среды [4-6]. Полная пространственно-временная реконструкция волнового пакета длительностью около одного оптического периода (одноцикловой СП) в нелинейной диспергирующей среде после свободной дифракции в воздушном промежутке величиной до 1 мм зарегистрирована в недавних работах [7,8]. При этом наблюдался рост дистанции реконструкции как с увеличением зазора, так и с увеличением длины пробега СП до зазора.

В настоящей работе впервые экспериментально исследованы особенности формирования СП и ее восстановления после полного внутреннего отражения (ПВО). Основная проблема при ПВО связана с воз-

2. Эксперимент. Исследование проводилось методом лазерной колорации (подробно описан в [15]), позволяющем получить информацию после воздействия единичного лазерного импульса, избегая тем самым неизбежных ошибок эксперимента из-за раз-

никновением на отражающей поверхности эванесцентной волны, через которую проходит вся отражаемая энергия [9]. С существованием этой волны связан сдвиг отраженного пучка по отношению к предсказываемой геометрической оптикой траектории распространения – так называемый сдвиг Гуса– Хенхен [10]. При прохождении этого сдвига световая волна становится непоперечной, вектор Умова-Пойнтинга ведет себя довольно сложным образом [9,11], а интенсивность растет за счет интерференции падающей и отраженной волн. Трудность экспериментального исследования этого явления состоит, во-первых, в том, что величина сдвига порядка длины волны излучения, а, во-вторых, в практической невозможности поместить туда любое регистрирующее устройство, не нарушив полностью исходную картину явления. В ряде теоретических работ [12, 13] предсказывались серьезные искажения пространственной и временной структуры пространственноограниченного импульсного (в том числе фемтосекундного) излучения после ПВО. Поэтому оставался открытым вопрос как о возможности формирования, так и реконструкции СП после прохождения этого сдвига фемтосекундным импульсом. В нашей недавней работе [14] регистрация СП после ПВО позволила измерить продольный сдвиг Гуса-Хенхен при изменении угла падения вблизи критического угла ПВО. В описываемых ниже экспериментах детально изучено формирование и реконструкция СП в этих условиях.

¹⁾e-mail: schekalin@yandex.ru

броса параметров импульсов от выстрела к выстрелу. Объектом исследования в этом методе является люминесценция структуры из долгоживущих центров окраски (ЦО) в LiF, созданная в филаменте при многофотонном воздействии фемтосекундного лазерного импульса и отражающая распределение светового поля в волновом пакете. Люминесценция этих ЦО в LiF столь интенсивна, что состоящие из них долгоживущие микроструктуры, созданные при филаментации всего одного лазерного импульса, могут быть легко зарегистрированы и исследованы при последующей подсветке в полосе их поглощения слабым излучением уже намного позже записи этих структур.

Схема эксперимента полностью аналогична описанной в [14]. В качестве образца использовалась призма ПВО из фторида лития размером 30 × 30 мм, внутрь которой с помощью серебряного зеркала с фокусом 200 мм фокусировался 130 фс лазерный импульс мощностью $\sim 1.5 P_{\rm cr} (P_{\rm cr}$ – критическая мощность самофокусировки) на длине волны 3200 нм, принадлежащей спектральному диапазону, наиболее благоприятному для формирования одноцикловых СП [4]. В эксперименте использовался импульс с поляризацией в плоскости падения (ТМ), который направлялся на входную грань призмы под таким углом, чтобы угол падения на отражающую грань составлял 49 градусов, что немного превышает критический угол ПВО. При этом, как показано в [14] при тех же условиях, сдвиг Гуса-Хенхен был максимальным (около 6 мкм). В экспериментах проведено сравнение микроструктуры треков ЦО, сформированных при филаментации одиночного лазерного импульса на разных расстояниях от отражающей грани призмы: задолго до ПВО, намного после ПВО и в процессе ПВО в непосредственной близости от отражающей грани (рис. 1а-е).

Для этого призма передвигалась вдоль ребра ее входной грани (левого на схемах в рис. 1), что приводило к соответствующему перемещению точки старта филамента в исследуемую область без изменения длины самофокусировки.

3. Экспериментальные результаты.

3.1. Филамент сформирован задолго до области, где происходит ПВО (рис. 1а). Структура трека люминесцирующих ЦО типична для образованной одноцикловой СП. Наблюдаемые периодические изменения интенсивности сигнала люминесценции микроструктур из ЦО, наведенных за счет многофотонных процессов, демонстрируют изменения концентрации ЦО, возникающие при регулярном изменении амплитуды светового поля СП на длине ее пробега вследствие различия между групповой скоростью огибающей СП и фазовой скоростью световой волны. Это является результатом компрессии ИК-импульса в пулю длительностью, близкой к периоду оптических колебаний [4, 16], т.е. свидетельствует о формировании одноцикловой СП. Характерный быстрый рост огибающей сигнала люминесценции в начале пробега СП связан с ростом интенсивности ее светового поля вследствие продолжающейся временной и пространственной компрессии пули. Последующий медленный спад связан с преобразованием энергии пули на пути ее пробега в излучение суперконтинуума во всей его спектральной полосе, что является основным каналом диссипации СП [6].

3.2. Филамент сформирован намного после области, где происходит ПВО (рис. 1b). Расстояние до старта филамента с точностью до ошибок измерения не изменилось и осталось равным 10 мм. Структура трека люминесцирующих ЦО тоже осталась неизменной. Из этого эксперимента следует, что предсказываемые искажения пространственной и временной структуры импульса при ПВО не препятствуют образованию одноцикловой СП.

3.3. Филамент формируется в непосредственной близости от отражающей грани:

3.3.1. После области, где происходит ПВО (рис. 1с). При приближении старта филамента (т.е. положения, при котором должна возникнуть СП) к отражающей грани растет интенсивность импульса вследствие его пространственной и временной компрессии. Усиление поля при ПВО из-за конструктивной интерференции разных частей волнового пакета еще не сформировавшейся, но уже достаточно интенсивной СП приводит к образованию тонкого слоя плазмы вблизи отражающей поверхности (или прямо на ней). В результате в этой области возникают ЦО, люминесцирующее пятно которых наблюдается в эксперименте при отсутствии трека от СП. Связанные с генерацией плазмы нелинейные потери в формирующейся пуле задерживают ее образование, поэтому трек СП никогда не наблюдается сразу после области, где происходит ПВО вплотную к отражающей грани. Минимальное расстояние формирования (хотя этот процесс можно уже называть реконструкцией) СП в этом случае составляло ~170 мкм. В структуре трека люминесцирующих ЦО в этом режиме также не наблюдалось существенных изменений, что свидетельствует о малости потерь, связанных с образованием плазмы в этом режиме.

3.3.2. До области, где происходит ПВО (рис. 1d, e). В этом случае наблюдается темный "провал" в треке люминесценции сразу после отра-



Distance to the reflecting surface (µm)

Рис. 1. (Цветной онлайн) Вид треков и профили интенсивности люминесценции ЦО, наблюдаемых при формировании филаментов в разных частях призмы (a)–(e). Положения треков ЦО, наведенных при филаментации в призме, схематически изображены на вставках красными линиями для каждого случая. Для изменения точки старта филамента призма передвигалась вдоль ребра левой грани. Для простоты сдвиг Гуса–Хенхен на схемах не показан. Лазерное излучение распространяется слева направо. По горизонтальной шкале отложено расстояние до отражающей грани призмы ПВО. Период модуляции интенсивности люминесценции ЦО вдоль трека – 30 мкм. При минимальной длине реконструкции (положение d) пятно ЦО, образованное вблизи отражающей поверхности при конструктивной интерференции прямого и отраженного пучков, настолько яркое, что "паразитная" засветка трека не дает возможности должным образом прописать его профиль ("зашкал" интенсивности люминесценции)

жающей грани, связанный с потерями при ПВО, в результате которых самовосстановление СП происходит после прохождения ей некоторого расстояния, необходимого для перекачки энергии из периферии импульса в центральную область. Интенсивность люминесценции ЦО вдоль трека восстановленной СП промодулирована таким же образом, как и до области, где происходит ПВО. Это означает, что одноцикловая СП, испытавшая потери при ПВО, осталась одноцикловой после восстановления. В результате измерений установлено, что длина реконструкции (расстояние от отражающей грани до начала трека восстановленной СП по уровню e^{-2} от максимальной интенсивности люминесценции в треке) возрастает от ~ 60 мкм до нескольких мм при увеличении расстояния, пройденного СП до ПВО. Наблюдалась трансформация формы огибающей трека ЦО в более симметричную, а также уменьшение длины пробега восстановленных СП при увеличении расстояния, пройденного пулей до ПВО (рис. 1е). Это может быть связано с потерей энергии СП на ее пути до области, где происходит ПВО.

Люминесцирующие пятна в местах пересечения лазерного пучка с отражающей поверхностью, связанные с возникновением здесь тонкого плазменного слоя и центров окраски за счет возрастания интенсивности при конструктивной интерференции падающего и отраженного пучков, в этом режиме намного ярче, чем в случае 3.3.1 (ср. рис. 1с и d), что связано с существенным ростом интенсивности в сформировавшейся СП по сравнению со случаем 3.3.1. Яркость этих пятен максимальна при минимальных значениях длины пробега СП до области, где происходит ПВО (рис. 1d), и заметно уменьшается одновременно с ее увеличением (рис. 1е). Как уже упомянуто выше, это связано с потерями энергии пули на пути ее пробега на излучение суперконтинуума.

4. Заключение. Проведенные эксперименты еще раз подтвердили, что световые пули являются исключительно устойчивыми образованиями, обнаружив их способность к полной пространственновременной реконструкции в нелинейной диспергирующей среде после полного внутреннего отражения.

В настоящее время готовятся к публикации теоретические оценки и численный счет, проведенные по результатам эксперимента. Они включают оценки потерь СП на излучение широкополосного суперконтинуума, а также потерь в плазме, образующейся вблизи отражающей поверхности при конструктивной интерференции прямого и отраженного пучков.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 18-12-00422, https://rscf.ru/project/18-12-00422.

 A. Couairon and A. Mysyrowicz, Phys. Rep. 441, 47 (2007).

- S. L. Chin, Femtosecond Laser Filamentation. Springer Series on Atomic, Optical and Plasma Physics, Springer, N.Y., Dordrecht, Heidelberg London (2010), v. 55; DOI 10.1007/978-1-4419-0688-5.
- 3. С. В. Чекалин, В. П. Кандидов, УФН **183**, 133 (2013).
- С.В. Чекалин, В.О. Компанец, А.Е. Дормидонов, В.П. Кандидов, УФН 189, 299 (2019).
- S. V. Chekalin, A. E. Dokukina, A. E. Dormidonov, V. O. Kompanets, E. O. Smetanina, and V. P. Kandidov, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 48, 094008 (2015).
- С.В. Чекалин, А.Е. Докукина, А.Е. Дормидонов, О.Е. Сметанина, В.П. Кандидов, Квантовая электроника 45, 401 (2015).
- S. V. Chekalin, A. E. Dormidonov, V. P. Kandidov, and V. Kompanets, Opt. Lett. 45, 1511 (2020).
- S. V. Chekalin, V. Kompanets, A. Dormidonov, and V. Kandidov, Laser Phys. Lett. 17, 085401 (2020).
- M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*, Cambridge University Press, Cambridge, UK (1999).
- 10. F. Goos and H. Hanchen, Ann. Phys. 436, 333 (1947).
- 11. Г.С. Ландсберг, Оптика, ФИЗМАТЛИТ, М. (2003).
- K. P. Cheung and D. H. Auston, Opt. Lett. 10, 218 (1985).
- 13. X. Liu and Q. Yang, J. Opt. Soc. Am. B 27, 2190 (2010).
- V. Kompanets, A. Melnikov, and S. Chekalin, Laser Phys. Lett. 18, 015302 (2021).
- S.V. Chekalin and V.O. Kompanets, Optics and Spectroscopy 127, 88 (2019).
- S.V. Chekalin, V.O. Kompanets, A.V. Kuznetsov, A.E. Dormidonov, and V.P. Kandidov, Laser Phys. Lett. 13, 065401 (2016).

Non-stationary spin-polarized tunneling through a quantum dot coupled to noncollinearly polarized ferromagnetic leads

V. N. Luchkin⁺, V. N. Mantsevich^{*}, N. S. Maslova^{$\times 1$})

⁺Moscow State University, Department of Physics, Chair of semiconductors and cryoelectronics, 119991 Moscow, Russia

*Moscow State University, Department of Physics, Chair of semiconductors and cryoelectronics and Quantum technology center, 119991 Moscow, Russia

 $^{\times}$ Moscow State University, Department of Physics, Chair of quantum electronics and Quantum technology center, 119991 Moscow, Russia

Submitted 17 March 2021 Resubmitted 21 April 2021 Accepted 23 April 2021

DOI: 10.31857/S1234567821110021

Physics of spin-polarized electron transport in semiconductor nanostructures (quantum dots (QDs) and impurity atoms) is stimulated by their possible application in nanoelectronics and spintronics devices [1]. One of the main tasks of spintronics is precise initialization and controlled manipulation of charge and spin states of the impurity atoms or QDs [2]. Control under the spin states in the semiconductor nanostrucutres can be achieved by detection of spin-polarized currents [3]. Moreover, generation and detection of spin-polarized currents is the key problem in the spintronic devices itself, as it is promising for application in semiconductor spin lasers, in which spin polarized carriers can be injected by circularly polarized light or by electrical injection [4]. A significant progress has been made in stationary spin transport in magnetic [5, 6] and nonmagnetic tunnel junctions in the presence of spin-orbit and exchange interactions [7, 8] and in QD systems [9, 10] in magnetic field. Moreover, spin-filter devices, which can generate a spin-polarized current without using magnetic properties of materials were proposed in [11, 12]. For charge and spin control in small devices time dependent effects and transient processes are essential [13–16]. Thus, time evolution of spin and charge configurations in correlated low-dimensional systems is of great interest both from fundamental and technological points of view. Among the most promising objects for spin initialization are QDs [17]. Spin states in self assembled QDs can be initialized without magnetic fields by means of optical pumping [18, 19], while in the electrostatic QDs the Pauli blockade starts to play the main role [20, 21]. Recently, experimental realizations of QDs localized between the ferromagnetic leads were presented. Different magnetic materials, such as ferro-

magnetic metals [22] or diluted magnetic semiconductors [23] have been applied as a spin injection sources and drains. Most of the theoretical works devoted to the analysis of stationary transport properties through QDs localized between ferromagnetic leads deals with parallel or antiparallel magnetic configurations [24–26]. Stationary electronic transport through the nanostructures coupled to the leads with non-collinear magnetizations was analyzed in [27, 28]. Non-stationary spin initialization in QDs was theoretically analyzed in [17, 29]. Spin initialization and manipulation occurs due to the electric field induced Rashba spin-orbit interaction. Modulation of coupling between the electron spin and momentum opens the possibility to set an electron in motion in the spin-dependent direction [30, 31]. Spin-orbit effect in this case can be applied to achieve spin-polarization via resonant tunneling without external magnetic leads or application of ferromagnetic materials. As creation, diagnostics and controlled manipulation of charge and spin states of the QDs or impurity atoms, applicable for ultra small size electronic devices design requires careful analysis of non-stationary effects and transient processes, time dependent dynamics of initial spin and charge configurations of correlated nanostructures is an area of great interest both from fundamental and technological point of view. In the present paper we analyze a situation when non-stationary spin-dependent tunneling currents appear when a single-level QD is coupled to ferromagnetic leads with non-collinear magnetizations and at the initial time point a non-zero magnetic moment is present in the dot. We extend the previous descriptions of stationary electron transport through the tunneling contact with non-collinear magnetization of the leads and correlated QD by careful analysis of nonstationary spin-polarized transport in the frame of theo-

¹⁾e-mail: vmantsev@gmail.com

retical approach based on kinetic equations for the electron occupation numbers with different spins. We revealed that spin polarization of the non-stationary current could be changed by tuning only the relative directions of the magnetic moments in the leads. This finding opens the possibility to create an effective spin-valve in a very simple system without modulating transparency of tunneling barriers or changing applied bias voltage.

This work was supported by Russian Foundation for Basic Research (RFBR) grant Stability 20-32-70001. Authors are also thankful for the support from the Interdisciplinary Scientific and Educational School of Moscow State University "Photonic and Quantum technologies. Digital medicine".

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364021110023

- Semiconductor Spintronics and Quantum Computation, ed. by D.D. Awschalom, D. Loss, and N. Samarth, Nanoscience and Technology, Springer, Berlin (2002).
- I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. 76, 323 (2004).
- P. Chuang, S.-C. Ho, L. W. Smith, F. Sfigakis, M. Pepper, C.-H. Chen, J.-C. Fan, J. P. Griffiths, I. Farrer, H.E. Beere, G.A.C. Jones, D.A. Ritchie, and T.-M. Chen, Nat. Nanotechnol. **710**, 35 (2014).
- I. Žutić, G. Xu, M. Lindemann, P.E. Faria Junior, J. Lee, V. Labinac, K. Stojsic, G. Sipahi, M. Hofmann, and N. Gerhardt, Solid State Commun. **316**, 113949 (2020).
- E.Y. Tsymbal, O.N. Mryasov, and P.R. LeClair, J. Phys.: Condens. Matter 15, R109 (2003).
- R. Fiederling, M. Keim, G. Reuscher, W. Ossau, G. Schmidt, A. Waag, and L. W. Molenkamp, Nature (London) 402, 787 (1999).
- V.I. Perel', S.A. Tarasenko, I.N. Yassievich, S.D. Ganichev, V.V. Bel'kov, and W. Prettl, Phys. Rev. B 67, 201304 (2003).
- M. M. Glazov, P. S. Alekseev, M. A. Odnoblyudov, V. M. Chistyakov, S. A. Tarasenko, and I. N. Yassievich, Phys. Rev. B 71, 155313 (2005).
- R. M. Potok, J. A. Folk, C. M. Marcus, V. Umansky, M. Hanson, and A. C. Gossard, Phys. Rev. Lett. **91**, 016802 (2003).
- J. A. Andrade and P. S. Cornaglia, Phys. Rev. B 94, 235112 (2016).

- T. Koga, J. Nitta, H. Takayanagi, and S. Datta, Phys. Rev. Lett. 88, 126601 (2002).
- A. Voskoboynikov, S.S. Liu, and C.P. Lee, Phys. Rev. B 58, 15397 (1998).
- N.S. Maslova, I.V. Rozhansky, V.N. Mantsevich, P.I. Arseyev, N.S. Averkiev, and E. Lahderanta, Phys. Rev. B 97, 195445 (2018).
- B. L. Hazelzet, M. R. Wegewijs, T. H. Stoof, and Y. V. Nazarov, Phys. Rev. B 63, 165313 (2001).
- E. Cota, R. Aguado, and G. Platero, Phys. Rev. Lett. 94, 107202 (2005).
- L. D. Contreras-Pulido, J. Splettstoesser, M. Governale, M. Governale, J. Konig, and M. Buttiker, Phys. Rev. B 85, 075301 (2012).
- S. Bednarek, J. Pawlowski, M. Gorski, and G. Skowron, Phys. Rev. Appl. 11, 034012 (2019).
- D. Press, T.D. Ladd, B. Zhang, and Y. Yamamoto, Nature 456, 218 (2008).
- B. D. Gerardot, D. Brunner, P. A. Dalgarno, P. Ohberg, S. Seidl, M. Kroner, K. Karrai, N.G. Stoltz, P. M. Petroff, and R. J. Warburton, Nature 451, 441 (2008).
- R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha, and L. M. K. Vandersypen, Rev. Mod. Phys. 79, 1217 (2007).
- K. C. Nowack, M. Shafiei, M. Laforest, G. E. D. K. Prawiroatmodjo, L. R. Schreiber, C. Reichl, W. Wegscheider, and L. M. K. Vandersypen, Science 333, 1269 (2011).
- H. B. Heersche, Th. Schapers, J. Nitta, and H. Takayanagi, Phys. Rev. B 64, 161307 (2001).
- 23. J. C. Egues, Phys. Rev. Lett. 80, 4578 (1998).
- 24. B. R. Bulka, Phys. Rev. B 62, 1186 (2000).
- W. Rudzinski and J. Barnas, Phys. Rev. B 69, 085318 (2001).
- J. Fransson, O. Eriksson, and I. Sandalov, Phys. Rev. Lett. 88, 226601 (2002).
- W. Rudzinski, J. Barnas, R. Swirkowicz, and M. Wilczynski, Phys. Rev. B **71**, 205307 (2005).
- I. Weymann and J. Barnas, Phys. Rev. B 75, 155308 (2007).
- J. Pawlowski, G. Skowron, P. Szumniak, and S. Bednarek, arXiv:2009.12439 (2020).
- J. Pawlowski, M. Gorski, G. Skowron, and S. Bednarek, Phys. Rev. B 96, 115308 (2017).
- S. Bednarek, J. Pawlowski, M. Gorski, and G. Skowron, New J. Phys. **19**, 123006 (2017).

Aharonov–Bohm interferometry based on helical edge states¹⁾ (Mini-review)

R. A. Niyazov^{+*2)}, D. N. Aristov^{+*}, V. Yu. Kachorovskii[×]

⁺Department of Physics, St. Petersburg State University, 198504 St. Petersburg, Russia

*National Research Centre "Kurchatov Institute", Petersburg Nuclear Physics Institute, 188300 Gatchina, Russia

 $^{\times}$ Ioffe Institute, 1940 21 St. Petersburg, Russia

> Submitted 21 April 2021 Resubmitted 21 April 2021 Accepted 23 April 2021

DOI: 10.31857/S1234567821110033

The Aharonov–Bohm interferometers (ABI) made of quantum wires with single or few ballistic quantum channels are very attractive as prime devices to probe quantum coherent phenomena and in view of possible applications as miniature and very sensitive sensors of magnetic field. The underlying physics is related to Aharonov–Bohm (AB) oscillations of conductance. The shape and amplitude of these oscillations depend essentially on the strength of the tunneling coupling and on the relation between temperature, T, and level spacing, Δ . For $T \ll \Delta$ and weak tunneling coupling there are narrow resonant peaks in the dependence of conductance, G, on the magnetic flux Φ [1–3]. The positions of the peaks depend on the electron Fermi energy [1] and on the strength of the electron-electron interaction [4]. Remarkably, the interference effects are not entirely suppressed with increasing the temperature, and the resonant behavior of $G(\Phi)$ survives for the case $T \gg \Delta$. Specifically, the high-temperature conductance of the noninteracting ring weakly coupled to the contacts exhibits sharp antiresonances at $\phi = \Phi/\Phi_0 = 1/2 + n$, where $\Phi_0 = hc/e$ is the flux quantum and n is an arbitrary integer number [5, 6]. The antiresonances acquire a fine structure due to the electron-electron interaction [5–8] and are broadened by the weak disorder [9].

The complexity of creating ballistic single- or fewchannel interferometers based on conventional semiconductors, such as GaAs or Si, is connected with technological problems of manufacturing one-dimensional clean systems. The efficiency of practically used quantum electronic interferometers is limited by rather stringent requirements, for example, very low temperature for interferometers based on superconducting SQUIDs or the requirement of very strong magnetic fields for interferometers based on the edge states of Quantum Hall Effect systems. Moreover, the antiresonances arising in the usual ABIs at $T \gg \Delta$, are very sensitive to the geometry of the problem [6–9].



Fig. 1. (Color online) Helical ABI with the magnetic impurities

A promising opportunity for a technological breakthrough in this direction is associated with the discovery of topological insulators, which are materials insulating in the bulk, but exhibiting conducting one-dimensional helical channels at the surface or at the boundaries (see Fig. 1).

The electron transport via helical edge states is ideal, in the sense that electrons do not experience backscattering from conventional non-magnetic impurities. Hence, in the absence of magnetic disorder, the boundary states are ballistic and the intereferometers constructed on such states are topologically protected from external perturbations. Due to this key advantage the helical edge states (HES) are very promising candi-

 $^{^{1)} \}rm Supplementary materials are available for this article at DOI: 10.1134/S0021364021110035 and are accessible for authorized users.$

²⁾e-mail: r.niyazov@spbu.ru

dates for building blocks in quantum spin-sensitive interferometry. HES-based interferometers were already studied theoretically at zero temperature for normal [10–12] and ferromagnetic [13] leads.

In this review, we focus on the case of relatively high temperature, $T \gg \Delta$. We discuss recent studies of spin dependent transport through HES-based ABI (see Fig. 1) and formulate essential steps towards solving several critical problems of quantum information processing: spin filtering, long-distance spin transfer, and effective spin manipulation. We start by discussing the tunneling conductance of the interferometer. We show that G is structureless in ballistic case but reveals sharp antiresonances, as a function of dimensionless flux ϕ in the presence of magnetic impurities. Although similar antiresonances are known to arise in the single-channel rings made of conventional materials, the helical ABI shows essentially different behavior due to specific properties of the HES. Most importantly, the effect is more universal and robust to details of the setup, in particular, to relation between L_1 and L_2 and the position of the magnetic impurity. Another difference concerns the periodicity of the function $G(\phi)$, which obeys $G(\phi + 1/2) = G(\phi)$, while for interferometers made of conventional materials, this function is periodic with the period 1.

Another property of helical interferometer of key significance for quantum computations is the possibility to operate as a spin filter. Physically, the spin filter blocks transmission of particles with one spin orientation, say spin-down, so that the outgoing current acquires spin-up polarization. Spin transport in HES was already discussed at zero temperature (see [14–17] and references therein). A finite spin polarization arises at high temperature, even in the fully classical regime and is therefore dephasing-insensitive. Even for a nonmagnetic lead the incoming electron beam splits into two parts: right-moving electrons with spin up and leftmoving electrons with spin down. If the transmission over one of the shoulders of the system is blocked, say, by inserting a strong magnetic impurity into the upper shoulder, then only the down shoulder remains active and the spin polarization of outgoing electrons can achieve 100 %. Remarkably, this mechanism is robust to dephasing and, therefore, works at high temperatures. The quantum contribution to polarization shows AB oscillations with the magnetic flux piercing the area encompassed by HES and is therefore tunable by external magnetic field. A very sharp dependence of the conductance and the spin polarization on ϕ is very promising for applications for tunable spin filtering and in the area of extremely sensitive detectors of magnetic fields.

Importantly, the tunneling interferometer can be described in terms of ensemble of flux-tunable qubits giving equal contributions both to conductance and spin polarization. The number of active qubits participating in the charge and spin transport is given by the ratio of the temperature to the level spacing. Such an ensemble of qubits can effectively operate at high temperature and can be used for quantum calculations [18]. This opens a wide avenue for high-temperature quantum computing.

The work was funded by Russian Foundation for Basic Research, grants 19-32-60077 (R. Niyazov) and 20-02-00490 (D. Aristov and V. Kachorovskii), and by Foundation for the Advancement of Theoretical Physics and Mathematics "BASIS" (R. Niyazov and V. Kachorovskii).

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364021110035

- M. Büttiker, Y. Imry, and M. Y. Azbel, Phys. Rev. A 30, 1982 (1984).
- Y. Gefen, Y. Imry, and M.Y. Azbel, Phys. Rev. Lett. 52, 129 (1984).
- M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas, Phys. Rev. B **31**, 6207 (1985).
- J. M. Kinaret, M. Jonson, R. I. Shekhter, and S. Eggert, Phys. Rev. B 57, 3777 (1998).
- E. A. Jagla and C. A. Balseiro, Phys. Rev. Lett. 70, 639 (1993).
- A. P. Dmitriev, I. V. Gornyi, V. Y. Kachorovskii, and D. G. Polyakov, Phys. Rev. Lett. **105**, 036402 (2010).
- A.P. Dmitriev, I.V. Gornyi, V.Y. Kachorovskii et al., JETP Lett. **100**, 839 (2015).
- A. P. Dmitriev, I. V. Gornyi, V. Y. Kachorovskii, and D. G. Polyakov, Phys. Rev. B 96, 115417 (2017).
- P. M. Shmakov, A. P. Dmitriev, and V. Y. Kachorovskii, Phys. Rev. B 87, 235417 (2013).
- R.-L. Chu, J. Li, J. K. Jain, and S.-Q. Shen, Phys. Rev. B 80, 081102 (2009).
- S. Masuda and Y. Kuramoto, Phys. Rev. B 85, 95327 (2012).
- P. Dutta, A. Saha, and A. M. Jayannavar, Phys. Rev. B 94, 195414 (2016).
- J. Maciejko, E.-A. Kim, and X.-L. Qi, Phys. Rev. B 82, 195409 (2010).
- X.-T. An, Y.-Y. Zhang, J.-J. Liu, and S.-S. Li, J. Phys. Condens. Matter 24, 505602 (2012).
- P. Michetti and P. Recher, Phys. Rev. B 83, 125420 (2011).
- R. Battilomo, N. Scopigno, and C. Ortix, Phys. Rev. B 98, 075147 (2018).
- 17. M. Zare, J. Magn. Magn. Mater. 492, 165605 (2019).
- R. A. Niyazov, D. N. Aristov, and V. Y. Kachorovskii, npj Computational Materials 6, 174 (2020).

Perpendicular upper critical magnetic field in a layered *d*-wave superconductor

 $A.\,G.\,Lebed^{(1)}$

Department of Physics, University of Arizona, 1118 E. 4-th Street, Tucson, AZ 85721, USA

L. D. Landau Institute for Theoretical Physics, Russian Academy of Sciences, 117334 Moscow, Russia

Submitted 29 March 2021 Resubmitted 23 April 2021 Accepted 24 April 2021

DOI: 10.31857/S1234567821110045

The upper critical magnetic field, $H_{c2}(0)$, is one of the most important parameters of the type-II superconductivity since, in the majority of the type-II superconductors, superconducting state is destroyed by magnetic field above $H_{c2}(0)$, $H > H_{c2}(0)$. The Ginzburg–Landau (GL) theory [1] provides an opportunity to understand physical meaning of $H_{c2}(0)$ and to calculate it near transition temperature, $T_c - T_c(H) \ll T_c$. At low temperature, for the first time, the upper critical magnetic field in an isotropic 3D superconductor was calculated by Gor'kov [2]. In the whole temperature region, the temperature dependence of $H_{c2}(T)$ was calculated for an isotropic 3D superconductor by Werthamer, Helfand, and Hohenberg (WHH) in [3]. The WHH theory has become very popular and physicists have used its results to fit experimental data on $H_{c2}(T)$ in all superconductors, including quasi-one-dimensional (Q1D) and quasi-twodimensional (Q2D) ones with both s-wave and d-wave electron parings.

In the WHH theory, there exists the main parameter, $\alpha = H_{c2}(0)/(|dH_{c2}/dT|_{T_c}T_c)$, which distinguishes, for example, between clean and dirty superconductors. In a clean 3D superconductor, it is equal to $\alpha \approx 0.73$. Bulaevskii recognized that the value of the above mentioned parameter depended on dimensionality of a superconductor and calculated it for perpendicular magnetic field in a s-wave Q2D superconductor [4]. In Q2D s-wave superconductors, the parameter α for the parallel upper critical magnetic field was calculated by us in [5], whereas, in *d*-wave superconductor [6], we found its angular in-plane oscillations [7]. As to *d*-wave superconductors in a perpendicular magnetic field, the parameter α was estimated several times [8–10] by approximated method [11], whose accuracy cannot be well controlled, and, as a result, several different values were obtained. In this paper, we show that this parameter, in a perpendicular magnetic field in Q2D case, depends on a nature of superconducting pairing and for d-wave pairing [6] is equal to

$$\alpha_d = H_{c2}(0)/(|dH_{c2}/dT|_{T_c}T_c) \approx 0.629.$$
(1)

Our work contains two main messages. The first one is that it is not a good idea to fit every measurement of $H_{c2}(T)$ by the WHH theory, as has been done so far almost in all experimental works. It is necessary to take into account dimensionality and nature of electron pairing in superconductors. The second message is that a comparison of the obtained formula (1) with the experimental data [12] demonstrates that the optimallydoped $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ is rather good described by either the Bardeen–Cooper–Schrieffer theory or its extension to *d*-wave superconductivity. Note that below we always disregard quantum effects of electron motion in a magnetic field, which can result in the restoration of superconductivity [13–17] in very high magnetic fields. These effects have been shown so far to be important only in Q1D organic superconductors from chemical family $(TMTSF)_2X$, where $X = ClO_4$ and PF_6 , as well as in the heavy fermion triplet superconductor UTe_2 [17].

Let us consider a Q2D superconductor with the following electron spectrum, which is an isotropic one within the conducting plane:

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \epsilon(p_x, p_y) - 2t_{\perp} \cos(p_z c^*), \quad t_{\perp} \ll \epsilon_F, \qquad (2)$$

where

$$\epsilon(p_x, p_y) = \frac{(p_x^2 + p_y^2)}{2m}, \quad \epsilon_F = \frac{p_F^2}{2m}.$$
 (3)

[Here, m is the effective in-plane electron mass, t_{\perp} is the integral of overlapping of electron wave functions in a perpendicular to the conducting planes direction, c^* is distance between the conducting planes; ϵ_F and p_F are the Fermi energy and Fermi momentum, respectively;

¹⁾e-mail: lebed@arizona.edu

 $\hbar \equiv 1.$] The perpendicular to the conducting layers magnetic field is applied along **z** axis,

$$\mathbf{H} = (0, 0, H),\tag{4}$$

where the vector potential of the field is possible to choose in the form:

$$\mathbf{A} = (0, Hx, 0). \tag{5}$$

To describe electron motion within the conducting plane, we perform the so-called Peierls substitution [1]:

$$p_x = -i\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y = -i\frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c}A_y.$$
 (6)

As a result, the electron Hamiltonian in the magnetic field (4) can be represented as:

$$\frac{1}{2m} \left[-\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(-i\frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c}Hx\right)^2 \right] \Psi_\epsilon(x,y) = \epsilon \Psi_\epsilon(x,y).$$
(7)

By means of the quasiclassical approach to Eq. (7), it is possible to calculate exactly the electron wave functions and the electron Matsubara's Green functions [18]. Using the Gor'kov's equations [18, 19] for *d*-wave superconducting gap,

$$\Delta(x,\phi_1) = \sqrt{2}\cos(2\phi_1)\ \Delta(x),\tag{8}$$

it is possible to derive the so-called gap equation for the $\Delta(x)$:

$$\Delta(x) = U \int_{|v_x^0(p_y)|} \int_{|x-x_1| > \frac{|v_x^0(p_y)|}{\Omega}} \frac{2\pi T dx_1}{|v_x^0(p_y)| \sinh\left[\frac{2\pi T |x-x_1|}{|v_x^0(p_y)|}\right]} \\ \times 2\cos^2[2\phi_2(p_y)] \cos\left[\frac{\omega_c p_y(x^2 - x_1^2)}{v_x^0(p_y)}\right] \Delta(x_1).$$
(9)

Analytical solution in the GL region and numerical solution at zero temperature, T = 0, of the Eq. (9) gives the result (1). Let us compare the obtained result (1) with the experimental measurements [12]. If we take into account accuracy of the measurements of the perpendicular upper critical magnetic field in [12], we will obtain:

$$\alpha_{\rm exp} = H_{c2}(0) / (|dH_{c2}/dT|_{T_c} T_c) \approx 0.50 - 0.65, \quad (10)$$

which is in a general agreement with Eq. (1). Although, Eq.(10) clear demonstrates that the 3D WHH coefficient [3] is not applicable to a Q2D case of the YBa₂Cu₃O_{7- δ}, unfortunately, within the accuracy of Eq. (10), it is not possible to distinguish between *d*-wave and *s*-wave superconducting pairings. We hope that new more precise measurements of $H_{c2}(0)$ will confirm *d*-wave nature of superconditing pairing in the YBa₂Cu₃O_{7- δ} and that our Eq. (1) will be useful test for some other Q2D superconductors. But what is clear now from Eqs. (1) and (10) is that superconductivity in optimally-doped high-T_c superconductor YBa₂Cu₃O_{7- δ}, at least, satisfactorily obeys either the Bardeen–Cooper–Schrieffer theory [1] or its extension to a *d*-wave superconducting pairing.

The author is thankful to N. N. Bagmet (Lebed) for useful discussions.

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364021110011

- A. A. Abrikosov, Fundamentals of Theory of Metals, Elsevier Science, Amsterdam (1988).
- 2. L. P. Gor'kov, Sov. Phys. JETP 37, 42 (1960).
- N. R. Werthamer, E. Helfand, and P. C. Hohenberg, Phys. Rev. 147, 295 (1966).
- L.N. Bulaevskii, Sov. Phys. JETP 38, 634 (1974) [ZhETF 65, 1278 (1974)].
- A.G. Lebed, JETP Lett. **110**, 173 (2019) [Pis'ma v ZhETF **110**, 163 (2019)].
- C. C. Tsuei, J. R. Kirtley, C. C. Chi, Lock See Yu-Yahnes, A. Gupta, T. Shaw, J. Z. Sun, and M. B. Ketchen, Phys. Rev. Lett. **73**, 593 (1994).
- A. G. Lebed and O. Sepper, JETP Lett. **111**, 239 (2020) [Pis'ma v ZhETF **111**, 249 (2020)].
- 8. H. Won and K. Maki, Physica B 199-200, 353 (1994).
- K. Maki, N. Schopohl, and H. Won, Physica B 204 214 (1995).
- 10. H. Won and K. Maki, Phys. Rev. B 53, 5927 (1994).
- I. A. Luk'yanchuk and V.P. Mineev, Sov. Phys. JETP 66, 1168 (1987).
- T. Sekitani, N. Miura, S. Ikeda, Y.H. Matsuda, and Y. Shiohara, Physica B **346–347**, 319 (2004).
- A. G. Lebed, JETP Lett. 44, 114 (1986) [Pis'ma ZhETF 44, 89 (1986)].
- N. Dupuis, G. Montambaux, and C. A. R. Sa de Melo, Phys. Rev. Lett. **70**, 2613 (1993).
- A. G. Lebed and K. Yamaji, Phys. Rev. Lett. 80, 2697 (1998).
- M. Razolt and Z. Tesanovic, Rev. Mod. Phys. 64, 709 (1992).
- 17. A.G. Lebed, Mod. Phys. Lett. B 34, 2030007 (2020).
- A. A. Abrikosov, L. P. Gor'kov, and I. E. Dzyaloshinskii, Methods of Quantum Field Theory in Statistical Mechanics, Dover, N.Y. (1963).
- V. P. Mineev and K. V. Samokhin, Introduction to Unconventional Superconductivity, Gordon and Breach Science Publisher, Australia (1999).

Граница раздела в гетеронаноструктуре Ag₂S/ZnS

С. И. Садовников¹⁾, А. И. Гусев

Институт химии твердого тела Уральского отделения РАН, 620990 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 21 апреля 2021 г. После переработки 29 апреля 2021 г. Принята к публикации 29 апреля 2021 г.

Строение гетеронаноструктур Ag₂S/ZnS рассмотрено с учетом морфологии и упругих свойств монокристаллических частиц сульфидов Ag₂S и ZnS. Рассмотрено размещение атомов S в плоскостях (111) кубических аргентита и сфалерита. Оценены константы упругой жесткости c_{11} , c_{12} , и c_{44} кубических аргентита β -Ag₂S и сфалерита ZnS при температуре 300 K. Показано, что морфологически и энергетически наиболее вероятно образование гетероструктур Ag₂S/ZnS, в которых границу раздела создают плоскости (111) кубических сфалерита ZnS и аргентита β -Ag₂S. Расчет универсального критерия анизотропии упругих свойств показал, что изученные кубические сульфиды серебра и цинка упруго анизотропны.

DOI: 10.31857/S1234567821110057

Гетеронаноструктуры на основе нанокристаллических полупроводниковых сульфидов Ag_2S и ZnS позволяют регулировать ширину запрещенной зоны и рассматриваются как перспективные наноматериалы для твердотельных УФ-лазеров, быстродействующих переключателей сопротивления, для применения в фотокатализе [1–4].

Одним из основных методов получения гетеронаноструктур нанокристаллических сульфидов цинка и серебра является соосаждение из водных коллоидных растворов, подробно описанное в работах [3, 5–7]. В гетеронаноструктурах Ag₂S/ZnS важная роль принадлежит границе раздела между сульфидами серебра и цинка, деформационные искажения на которой должны быть минимальны.

Для оценки деформационных искажений на границе раздела между сульфидами серебра и цинка нужны сведения об упругих характеристиках ZnS и Ag₂S. Упругие свойства кубического ZnS достаточно хорошо известны [8–11]. Низкотемпературная кубическая (пр. гр. $F\bar{4}3m$) модификация α -ZnS имеет кубическую структуру цинковой обманки или сфалерита ZnS (тип B3) и стабильна при температуре ниже 1290 К. Степень заполнения узлов металлической и неметаллической подрешеток сфалерита ZnS атомами Zn и S равна 1.

В электронике потенциально наиболее применим аргентит β -Ag₂S, имеющий объемноцентрированную кубическую (оцк) (пр. гр. $Im\bar{3}m$) решетку. Упругие свойства кубического (пр. гр. $Im\bar{3}m$) аргентита β -Ag₂S определены в широкой области температур в работах [12, 13].

Кристаллическая структура кубического аргентита β-Ag₂S имеет ряд особенностей. Элементарная ячейка аргентита β-Ag₂S содержит две формульные единицы Ag₂S. Четыре атома серебра Ag статистически распределены по 54 позициям 6(b) и 48(j) с вероятностями заполнения ~ 0.0978 и ~ 0.0711 соответственно (таблица 1) [14]. Узлы подрешетки серебра, особенно 48(j), расположены настолько близко друг к другу, что размещение иона Ag⁺ в одном из этих узлов делает невозможным заполнение ближайшего соседнего узла другим ионом серебра, поскольку диаметр иона Ag⁺ больше расстояния между этими узлами. Физически это означает, что в решетке кубического аргентита 4 атома серебра находятся в непрерывном движении по 54 возможным для них кристаллографическим позициям. Такое непрерывное движение атомов Ag обеспечивает стабильность решетки кубического аргентита и его суперионную проводимость [15].

При температуре ниже 450 К кубический аргентит β -Ag₂S превращается в моноклинный акантит α -Ag₂S. Атомы Ag, статистически распределенные по позициям 6(b) и 48(j) оцк-структуры аргентита, концентрируются на позициях моноклинной структуры акантита и занимают их с вероятностью, близкой к единице. Согласно [13–17], структуру моноклинного акантита α -Ag₂S можно рассматривать как результат искажения оцк подрешетки атомов серы S в структуре кубического аргентита β -Ag₂S.

Основной целью настоящей работы является выяснение строения границы раздела гетеронанострук-

¹⁾e-mail: sadovnikov@ihim.uran.ru



Рис. 1. HRTEM изображение гетеронаноструктуры (Ag₂S)_{0.025}(ZnS). Выделенные области (1)–(4) соответствуют кубическому сфалериту ZnS, а выделенная область (5) соответствует кубическому сульфиду серебра со структурой аргентита β -Ag₂S

туры Ag_2S/ZnS с учетом особенностей кристаллической структуры кубического сульфида серебра и упругих характеристик монокристаллических кубических β - Ag_2S аргентита и ZnS сфалерита.

Количественный анализ рентгенограмм сингетеронаноструктур тезированных Ag_2S/ZnS , выполненный в работах [3,7], показал присутствие сильных дифракционных отражений кубического сфалерита ZnS и очень слабых отражений кубического аргентита β -Ag₂S. Интенсивность дифракционных отражений сульфида серебра значительно меньше интенсивности отражений сульфида цинка вследствие малого относительного содержания Ag₂S в полученных гетеронаноструктурах. Сильное уширение дифракционных отражений гетеронаноструктур свидетельствует 0 малом размере сульфидных частиц, составляющем примерно 10 нм, а также о наличии микродеформаций кристаллической решетки из-за ее деформационных искажений. Образование гетеронаноструктур Ag₂S/ZnS подтверждено ранее в работе [7] данными просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения (HRTEM). Как пример на рис. 1 показано HRTEM изображение синтезированной гетеронаноструктуры (Ag₂S)_{0.025}(ZnS). Центральная часть гетеронаноструктуры образована сульфидом серебра, а поверхность Ag₂S покрыта наночастицами кубического сульфида цинка ZnS. Наблюдаемые наборы дифракционных отражений, полученные с помощью Фурье-преобразования (FFT) электронно-микроскопических изображений, и наблюдаемые межплоскостные расстояния ~0.311 и ~0.246 нм соответствуют расстояниям между атомными плоскостями (111) кубического (пр. гр. $F\bar{4}3m$) ZnS и между атомными плоскостями (200) сульфида серебра с кубической (пр. гр. $Im\bar{3}m$) структурой аргентита β -Ag₂S. По электронно-микроскопическим данным индивидуальные наночастицы Ag₂S и ZnS являются монокристаллическими.

Экспериментальные дифракционные и TEM данные позволяют предположить, что большое количество кубического сульфида цинка стабилизирует кубическую структуру β -Ag₂S аргентита при 300 K в процессе осаждения гетеронаноструктур Ag₂S/ZnS из коллоидных растворов.

В соответствии с теорией Хартмана [18], морфология монокристаллических частиц определяется структурой, причем возможные плоские грани кристалла должны содержать как минимум две цепочки сильных связей. Для кубического сфалерита ZnS этому критерию соответствует плоскость (111). Действительно, на HRTEM изображении (см. рис. 1) гетеронаноструктуры (Ag₂S)_{0.025}(ZnS) наблю-



Рис. 2. Элементарные ячейки кубического аргентита β-Ag₂S и кубического сфалерита ZnS и (внизу) размещение атомов S в плоскостях (111) этих сульфидов. В плоскости (111) аргентита показаны положения узлов 6 (b), которые с вероятностью менее 0.1 могут быть заняты атомами Ag. Для кубического сфалерита в плоскости (111) показаны положения атомов Zn

даются сразу 4 зерна ZnS с ориентацией плоскостей (111).

Для рассматриваемых сульфидов цинка и серебра на границе раздела должны совмещаться плоскости с наибольшим относительным содержанием атомов серы, т.е. плоскости (111). В этом случае при параллельной ориентации решеток двух сульфидов эпитаксия возможна при достаточно близких межатомных расстояниях контактирующих веществ.

На рисунке 2 показаны элементарные ячейки кубических аргентита β -Ag₂S и сфалерита ZnS и размещение атомов S в плоскостях (111) этих сульфидов. Хотя периоды решеток аргентита a_{β -Ag₂S = 0.4874 нм и сфалерита $a_{\rm ZnS} = 0.5411$ нм отличаются достаточно сильно, расстояния между ближайшими соседними атомами S в плоскостях (111) аргентита β -Ag₂S и сфалерита ZnS равны 0.398 и 0.383 нм, соответствен-

но, т.е. различаются не более, чем на ~3.5%. Поскольку грани (111) аргентита и сфалерита содержат по две цепочки сильных связей и характеризуются близкими межатомными расстояниями, то с точки зрения ориентационного соотношения между этими гранями образование ими границы раздела в обсуждаемой гетеронаноструктуре (Ag₂S)_{0.025}(ZnS) вполне возможно.

Выяснить ориентационные соотношения между атомами металла (Ag и Zn) в любых плоскостях, включая (111), не представляется возможным, так как в аргентите β -Ag₂S четыре атома Ag статистически распределены по 54 позициям с очень малыми вероятностями заполнения (см. таблицу 1), и число вариантов размещения атомов Ag на произвольных четырех позициях равно 2551190. Что касается кубического сфалерита с фиксированным размещением атомов Zn в элементарной ячейке, то в нем расстояния между соседними атомами Zn определяются однозначно.

Таблица 1. Кристаллическая структура кубического (пр. гр. $\# 229 - Im\bar{3}m(O_{h}^{9}))$ сульфида серебра со структурой аргентита β -Ag₂S: Z = 2, a = b = c = 0.4874(1) нм [20]

Атом	Позиция и	Атомные координаты			Степень
	кратность				заполнения
		x	y	z	
Ag1	6(b)	0	0.5	0.5	0.0978(7)
Ag2	48~(j)	0	0.3306(5)	0.4122(7)	0.0711(0)
S	2(a)	0	0	0	1.00(0)

Рассмотрим далее анизотропию упругих свойств кубических сульфидов β-Ag₂S и ZnS.

Согласно [13], постоянные упругой жесткости c_{11} , c_{12} и c_{44} кубического аргентита β -Ag₂S при 470 K равны 89.6, 4.0 и 17.2 ГПа соответственно. Температурные зависимости постоянных упругой жесткости аргентита имеют вид $c_{ij}(T) = c_{ij}(470) + (470 - T)dc_{ij}/dT$, где $c_{ij}(470 \text{ K})$ и dc_{ij}/dT аргентита β -Ag₂S есть величины, найденные в работе [13]: $dc_{11}/dT = 0.0577$, $dc_{12}/dT = 0.0214$ и $dc_{44}/dT = 0.0108 \Gamma\Pi a \cdot K^{-1}$. В соответствии с этим константы упругой жесткости $c_{11}(300)$, $c_{12}(300)$ и $c_{44}(300)$ кубического аргентита β -Ag₂S при температуре 300 K равны 99.4, 7.6 и 19.0 ГПа.

Для кубического (пр. гр. $F\bar{4}3m$) ZnS со структурой типа ВЗ наиболее близки к упругим свойствам кубического Ag₂S данные [8, 10]. Согласно [10], константы упругой жесткости кубического сфалерита ZnS при T = 0К равны $c_{11} = 96.9, c_{12} = 48.3$ и $c_{44} = 55.8 \, \Gamma \Pi$ а. Величины c_{ij} сульфида цинка ZnS с кубической (пр. гр. $F\bar{4}3m$) структурой сфалерита при температуре 300 К можно оценить, используя температурные зависимости изотермического модуля всестороннего сжатия В, представленные в работе [11]. Согласно [11], наклон dB/dT равен $-0.0109 \,\Gamma\Pi a \cdot K^{-1}$. В первом приближении будем полагать, что относительное уменьшение постоянной c_{11} с ростом температуры от 0 до 300 К такое же, как уменьшение модуля всестороннего сжатия В. Константы c_{ii} сульфида ZnS при 300 K можно представить как $c_{ii}(T) = c_{ii}(0) + T dc_{ii}/dT$. Согласно выполненной оценке, значения c_{11}/dT , dc_{12}/dT и dc_{44}/dT для ZnS равны -0.0109, -0.0057 и -0.022 ГПа · К⁻¹ соответственно. С учетом данных [10] по $c_{ij}(0)$ и найденных величин dc_{ij}/dT , константы упругой жесткости c₁₁(300), c₁₂(300) и c₄₄(300) кубического сфалерита ZnS при температуре 300 K равны 93.6, 46.6 и 49.2 ГПа соответственно.

Постоянные упругой жесткости c_{11} , c_{12} , c_{44} и постоянные упругой податливости s_{11} , s_{12} , s_{44} для кубических кристаллов связаны известными соотношениями: $s_{44} = 1/c_{44}$, $s_{11} = (c_{11} + c_{12})/[(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})]$ и $s_{12} = -c_{12}/[(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})]$ [19]. С учетом этого компоненты тензора податливости аргентита β -Ag₂S при 300 K равны $s_{11} = 10.17 \cdot 10^{-12}$, $s_{12} = -0.72 \cdot 10^{-12}$ и $s_{44} = 52.63 \cdot 10^{-12} \, \Pi a^{-1}$, а компоненты тензора податливости сфалерита ZnS равны $s_{11} = 15.97 \cdot 10^{-12}$, $s_{12} = -5.31 \cdot 10^{-12}$ и $s_{44} = 20.33 \cdot 10^{-12} \, \Pi a^{-1}$.

Для кубических монокристаллов зависимости модуля Юнга E и коэффициента Пуассона μ от направления [hkl] имеют вид [20]:

$$E_{hkl} = \frac{1}{s_{11} - 2(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44})\Gamma},$$

$$\mu_{hkl} = \frac{1 - E_{hkl}(s_{11} + 2s_{12})}{2},$$
(1a)

где

$$\Gamma = \frac{h^2 k^2 + h^2 l^2 + k^2 l^2}{(h^2 + k^2 + l^2)^2} \tag{16}$$

есть параметр, учитывающий направление.

Модуль сдвига G_{hkl} и модуль всестороннего сжатия B равны

$$G_{hkl} = 1/[2s_{11} - 2s_{12} - 6(s_{11} - s_{12} - s_{44}/2)\Gamma],$$

$$B = (c_{11} + 2c_{12})/3 = 1/[3(s_{11} + 2s_{12})].$$
 (2)

Из (2) следует, что модуль всестороннего сжатия B кубических кристаллов изотропен.

Полученные данные по s_{11} , s_{12} и s_{44} позволяют найти распределения упругих характеристик монокристаллических частиц кубических аргентита β -Ag₂S и сфалерита ZnS от направления [*hkl*].

Зависимости упругих свойств кубических аргентита β -Ag₂S и сфалерита ZnS от направления [hkl], рассчитанные для температуры 300 K, показаны на рис. 3.

Распределения модулей Юнга E_{hkl} и сдвига G_{hkl} (рис. 3а, b) и коэффициента Пуассона μ_{hkl} (рис. 3c) аргентита β -Ag₂S показаны в плоскости (111). При 300 К максимальный модуль E_{hkl} аргентита в плоскости (111) равен ~ 55.9 ГПа и наблюдается в направлениях [1-10], [10-1], [01-1] и в противоположных направлениях. Минимальная величина модуля E_{hkl} аргентита β -Ag₂S равна ~50.4 ГПа. Максимальный и минимальный модули сдвига G_{hk0} кубического сульфида серебра β -Ag₂S в плоскости (111) равны ~ 22.3 и ~ 19.7 ГПа, соответственно (рис. 3b). Величина коэффициента Пуассона μ_{hk0} в плоскости (111) меняет-



Рис. 3. Зависимости упругих характеристик кубического аргентита β -Ag₂S и кубического сфалерита ZnS от кристаллографического направления [*hkl*] в плоскости (111) при 300 К: (a)–(c) – распределения модуля Юнга E_{hkl} , модуля сдвига G_{hkl} и коэффициента Пуассона μ_{hkl} кубического аргентита β -Ag₂S; (d)–(f) – распределения модуля Юнга E_{hkl} , модуля сдвига G_{hkl} и коэффициента Пуассона μ_{hkl} сфалерита ZnS

ся от 0.2542 до 0.2780 (рис. 3
с). Модуль всестороннего сжатия Bаргентита изотропен и пр
и 300 К равен $\sim 37.9\,\Gamma\Pi{\rm a}.$

Распределения модулей Юнга E_{hkl} и сдвига G_{hkl} (рис. 3d, e) и коэффициента Пуассона μ_{hkl} (рис. 3f) сфалерита ZnS тоже показаны в плоскости (111). Модуль Юнга E_{hkl} кубического ZnS имеет максимальную и минимальную величины ~110.7 и 95.9 ГПа, соответственно. Максимальный и минимальный модуль сдвига G_{hkl} сфалерита в плоскости (111) равен 46.1 и 38.6 ГПа, соответственно. Коэффициент Пуассона μ_{hkl} в плоскости (111) меняется от 0.2011 до 0.2410 (рис. 3f). Модуль В сфалерита ZnS изотропен и при 300 K равен ~ 61.7 ГПа.

Согласно [21], наименьшая энергия упругой деформации в бинарных или псевдобинарных системах наблюдается при минимальной разнице модулей сдвига компонентов. Поэтому энергетически наиболее выгодными будут гетероструктуры Ag₂S/ZnS с минимальной разницей модулей сдвига сульфидов β -Ag₂S и ZnS. В отличие от аргентита β -Ag₂S со статистическим распределением атомов Ag, кубический



Рис. 4. Сравнение модулей сдвига G_{hkl} кубического аргентита β -Ag₂S и кубического сфалерита ZnS в плоскостях (111)

сфалерит ZnS характеризуется фиксированным размещением атомов Zn и S в элементарной ячейке, поэтому модуль сдвига сфалерита ZnS определен однозначно. Для образования гетероструктур Ag₂S/ZnS наиболее благоприятны те размещения атомов Ag в аргентите β -Ag₂S, когда часть атомов Ag занимает четыре кристаллографические позиции, находящиеся в одной плоскости.

В соответствии с [21], зависимость энергии упругой деформации $E_{\rm str}$ от состава гетероструктуры $(Ag_2S)_{1-x}(ZnS)_x$ можно представить в виде

$$E_{\rm str} = 2x(1-x)(V_{\rm Ag_2S} - V_{\rm ZnS})^2 \times \\ \times [(1-x)G_{\rm Ag_2S}/V_{\rm Ag_2S} + xG_{\rm ZnS}/V_{\rm ZnS}]/3, \quad (3)$$

где G_{Ag_2S} и G_{ZnS} – модули сдвига сульфидов Ag_2S и ZnS; $V_{Ag_2S} = 3.43 \cdot 10^{-5} \,\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{моль}^{-1}$ и $V_{ZnS} = 2.39 \cdot 10^{-5} \,\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{моль}^{-1}$ – молярные объемы Ag_2S и ZnS; x – относительное содержание сульфида ZnS в гетеронаноструктуре $(Ag_2S)_{1-x}(ZnS)_x$. Согласно [3,7], максимальное содержание сульфида серебра (1-x) в синтезированных гетеронаноструктурах достигает ~ 0.09.

Модули сдвига G_{hkl} сфалерита ZnS и аргентита β -Ag₂S, рассчитанные в плоскости (111), показаны на рис. 4. Из проведенного расчета следует, что средняя величина модуля сдвига G_{hk0} сфалерита ZnS составляет ~41.6 ГПа, а средняя величина модуля сдвига аргентита β -Ag₂S равна ~21.2 ГПа. Расчет энергии упругой деформации E_{str} гетеронаноструктуры

739

 $(Ag_2S)_{1-x}(ZnS)_x c (1-x) = 0.09 c$ учетом средних величин модулей сдвига сфалерита и аргентита показал, что $E_{\rm str} = 13.93 \, \rm K \ {\rm Д} \ {\rm wonb}^{-1}$.

Поверхностную энергию γ границы раздела приближенно можно оценить как $\gamma = E_{\rm str}/S$, где S – площадь поверхности границы раздела. Площадь поверхности найдем как среднюю величину $S = (V_{\rm ZnS}/D_{\rm ZnS} + V_{{\rm Ag}_2{\rm S}}/D_{{\rm Ag}_2{\rm S}})/2$, где $D_{\rm ZnS}$ и $D_{\mathrm{Ag}_2\mathrm{S}}$ – размер наночастиц ZnS и Ag₂S. По данным ТЕМ размер наночастиц ZnS и Ag₂S примерно одинаков и равен ~ 10 нм, поэтому S = $= 2910 \,\mathrm{m}^2 \cdot \mathrm{моль}^{-1}$. Поверхностная энергия γ границы раздела Ag₂S(111)/ZnS(111) гетеронаноструктуры $(Ag_2S)_{1-x}(ZnS)_x$ с (1-x) = 0.09 при такой величине S равна ~ $4.8 \,\mathrm{Дж} \cdot \mathrm{m}^{-2}$. Поверхностная энергия γ границы раздела гетеронаноструктуры Ag₂S/ZnS должна быть больше, чем поверхностные энергии отдельных сульфидов. В литературе есть сведения только о поверхностной энергии сфалерита ZnS(110), равной 0.47 Дж · м⁻² [22]. Это на порядок меньше, чем энергия границы раздела в рассмотренной гетеронаноструктуре сульфида цинка с кубическим сульфидом серебра, и качественно подтверждает правильность оценки энергии границы раздела γ изученных гетеронаноструктур Ag_2S/ZnS .

Расчет зависимостей упругих модулей кубических аргентита β -Ag₂S и сфалерита ZnS от направления [*hkl*] обнаружил их анизотропию (см. рис. 3). Количественно величину анизотропии поликристаллических сульфидов можно оценить, используя метод Фохта-Ройса-Хилла [23] и универсальный критерий анизотропии $A^{\rm U} = 5G_{\rm V}/G_{\rm R} + B_{\rm V}/B_{\rm R} - 6$ [24], где $B_{\rm V}$ и $B_{\rm R}$ – верхний и нижний пределы модуля сжатия B, а $G_{\rm V}$ и $G_{\rm R}$ – верхний и нижний пределы модуля сдвига G. Для кубических кристаллов $B_{\rm V} = (c_{11} + 2c_{12})/3$, $B_{\rm R} = 1/[3(s_{11}+2s_{12})], G_{\rm V} = (c_{11}+3c_{44}-c_{12})/5, G_{\rm R} =$ $= 5/[4(s_{11}-s_{12})+3s_{44}] \equiv 5c_{44}(c_{11}-c_{12})/[4c_{44}+3(c_{11}-c_{12})]$ $(-c_{12})$] [23, 25].

При 300 К критерии анизотропии A^U кубических аргентита β-Аg₂S и сфалерита ZnS равны 1.008 и 0.687. Значения $A^{\rm U}$ показывают, что изученные кубические аргентит и сфалерит ZnS упруго анизотропны.

В целом проведенный анализ показал, что с точки зрения морфологии и энергии границ раздела наиболее вероятно образование гетероструктур Ag₂S/ZnS, в которых границу раздела создают плоскости (111) кубических сфалерита ZnS и аргентита β -Ag₂S.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект #19-79-10101) в Институте химии твердого тела Уральского отделения РАН.

- 1. X. Wang, H. Huang, B. Liang, Z. Liu, D. Chen, and G. Shen, Crit. Rev. Solid State Mater. Sci. 38, 57 (2013).
- 2. G. Murugadoss, R. Jayavel, M. Rajesh Kumar, and R. Thangamuthu, Appl. Nanosci. 6, 503 (2016).
- 3. S.I. Sadovnikov, A.V. Ishchenko, and I.A. Weinstein, J. Alloys Comp. 831, 154846 (2020).
- 4. S.I. Sadovnikov and I.A. Balyakin, Comp. Mater. Sci. **184**, 109821 (2020).
- 5. С.И. Садовников, А.В. Ищенко, И.А. Вайнштейн, Журнал неорганической химии **65**, 1183 (2020).
- 6. X. Zhang, X. Liu, L. Zhang, D. Li, and S. Liu, J. Alloys Compd. 655, 38 (2016).
- 7. С. И. Садовников, И. Д. Попов, ФТТ **62**, 1787 (2020).
- 8. M. Bilge, S.O. Kart, and H.H. Kart, Mater. Chem. Phys. 111, 559 (2008).
- 9. R. Chen, X. F. Li, L.C. Cai, and J. Zhu, Sol. State Commun. 139, 246 (2006).
- 10. D. Wei, S. Jin-Fan, W. Ping, L. Cheng, L. Zhi-Wen, and T. Xiao-Ming, Z. Naturforsch. 66a, 656 (2011).
- 11. G. Ulian and G. Valdre, Acta Crystallogr. B 75, 1042 (2019).
- 12. С. И. Садовников, Письма в ЖЭТФ **112**, 203 (2020).
- 13. S.I. Sadovnikov and A.I. Gusev, Phys. Chem. Chem. Phys. 23, 2914 (2021).
- 14. S.I. Sadovnikov, A.I. Gusev, and A.A. Rempel, Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 20495 (2015).
- 15. С.И. Садовников, А.И. Гусев, ЖЭТФ 156, 1101 (2019).
- 16. A. J. Frueh, Z. Kristallogr. 110, 136 (1958).
- 17. R. Sadanaga and S. Sueno, Mineralog. J. Japan. 5, 124 (1967).
- 18. P. Hartman and W. G. Perdok, Acta Crystallogr. 8, 49 (1955).
- 19. R.E. Newnham, Properties of Materials: Anisotropy, Symmetry, Structure, Oxford Univ. Press, Oxford -N.Y. (2005), p. 104.
- 20. T. Gnäupel-Herold, P.C. Brand, and H.J. Prask, J. Appl. Crystallogr. **31**, 929 (1998).
- 21. A.G. Knapton, J. Less-Comm. Met. 2, 113 (1960).
- 22. S.-H. Na and C.-H. Park, J. Kor. Phys. Soc. 54, 867 (2009).
- 23. R. Hill, Proc. Phys. Soc. A 65, 349 (1952).
- 24. S.I. Ranganathan and M. Ostoja-Starzewski, Phys. Rev. Lett. 101, 055504 (2008).
- 25. O.L. Anderson, in Lattice Dynamics / Physical Acoustics. Principles and Methods, ed. by W. P. Mason, Academic Press, N.Y.-London (1965), p. 43.

Плазменные возбуждения в частично экранированных двумерных электронных системах (Миниобзор)

А. М. Зарезин^{+*1}, П. А. Гусихин⁺, И. В. Андреев⁺, В. М. Муравьев⁺, И. В. Кукушкин⁺

+Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

* Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), 141701 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 29 апреля 2021 г. После переработки 30 апреля 2021 г. Принята к публикации 30 апреля 2021 г.

Дан обзор последних достижений в исследовании физических свойств плазменных возбуждений в частично экранированных металлическими электродами двумерных электронных системах на базе гетероструктур AlGaAs/GaAs. Установлено, что в таких системах возбуждается особый тип двумерных плазменных волн – проксимити плазмон (*proximity plasmon*). Экспериментально установлено, что плазменные волны данного семейства обладают целым рядом новых физических свойств. Во-первых, оказалось, что дисперсия частично экранированных плазмонов сочетает характерные черты как экранированного, так и неэкранированного двумерных плазмонов. Во-вторых, у обнаруженной проксимити моды отсутствует краевая ветвь в магнитодисперсии. Наконец, оказалось, что в случае если затвор соединен с двумерной системой внешней цепью, то в системе возбуждается "заряженная" релятивистская плазменная мода с целым рядом уникальных свойств. Полученные новые результаты расширяют горизонт возможных приложений плазмоники в области СВЧ и терагерцовой электроники.

DOI: 10.31857/S1234567821110069

Введение. Центральным вопросом физики низкоразмерных электронных систем является изучение одночастичных и коллективных элементарных возбуждений системы. Одним из основных типов коллективных возбуждений двумерной электронной системы (ДЭС) является волна зарядовой плотности – плазмон. Плазменные возбуждения в двумерных электронных системах интенсивно изучаются уже более полувека [1–10]. Отчасти такой интерес связан с множеством уникальных свойств, отличающих двумерные (2D) плазмоны от их трехмерных аналогов. Во-первых, спектр двумерных плазмонов имеет бесщелевой корневой характер

$$\omega_p(q) = \sqrt{\frac{n_s e^2}{2m^* \varepsilon_0 \varepsilon(q)}} q \qquad q \gg \frac{\omega_p}{c}, \tag{1}$$

где n_s – концентрация двумерных электронов, m^* – их эффективная масса, q – волновой вектор 2D плазмона, $\varepsilon(q)$ – диэлектрическая проницаемость окружения ДЭС. Данный спектральный закон обусловлен особенностью кулоновского взаимодействия в двумерных системах. При этом, в отличие от плазменных волн в трехмерных материалах, скорость Во-вторых, заряды в двумерном слое не способны эффективно экранировать трехмерное поле падающей на ДЭС электромагнитной волны. Это приводит к сильной гибридизации света с двумерной плазмой и образованию новых элементарных возбуждений – плазмонных поляритонов [1, 11]. В-третьих, на свойства 2D плазмонов оказывает значительное влияние окружение ДЭС. Это вызвано тем, что двумерные системы в большинстве случаев образуются на гетероинтерфейсе, который располагается вблизи поверхности полупроводниковой подложки. Например, наличие экранирующего электрода на поверхности подложки существенно изменяет спектр двумерных плазменных волн, приводя к его линеаризации [12]

$$\omega_{AP} = \sqrt{\frac{n_s e^2 h}{m^* \varepsilon_0 \varepsilon}} q \qquad qh \ll 1, \tag{2}$$

где *h* – расстояние от ДЭС до бесконечного в латеральном направлении проводящего затвора, а *ε* – диэлектрическая проницаемость полупроводникового кристалла между ДЭС и затвором.

двумерных плазмонов регулируется в широких пределах путем изменения 2D электронной концентрации или приложения внешнего магнитного поля.

 $^{^{1)}{\}rm e\text{-}mail:}$ zarezin.am@phystech.edu

Долгое время плазменные возбуждения в частично экранированной ДЭС оставались слабо изученными. Предпринималось достаточно много попыток описать плазменные волны в такой системе на основании взаимодействия плазмонов от участков ДЭС без затвора с экранированными 2D плазмонами, локализованными в подзатворной области. При этом в подавляющем большинстве случаев электрическое поле электромагнитной волны, возбуждающей 2D плазменные волны, было направлено поперек полосок металлического затвора [13–19].

Данный подход имел целый ряд ограничений, что привело к тому, что было упущено новое семейство плазменных мод индуцированных близким металлическим затвором – проксимити плазмоны (*proximity plasmons*). Оказалось, что если рассмотреть одиночный металлический затвор в форме полоски с пириной W, расположенный на поверхности подложки на расстоянии h от бесконечной ДЭС, то вдоль него может распространяться проксимити плазменная волна. Проксимити плазмоны обладают целым рядом уникальных физических свойств. В частности, их дисперсия сочетает характерные черты как экранированного ($\omega_{\rm pr} \propto \sqrt{h}$), так и неэкранированного ($\omega_{\rm pr} \propto \sqrt{q}$) двумерных плазмонов [20, 21]:

$$\omega_{\rm pr}(q) = \sqrt{\frac{2n_s e^2 h}{m^* \varepsilon_0 \varepsilon} \frac{q}{W}} \qquad (qW \ll 1). \tag{3}$$

Вторым важным свойством проксимити плазмонов является то, что в присутствии магнитного поля у них отсутствует краевая мода, а сама магнитодисперсия определяется формулой $\omega(B) = \sqrt{\omega_{\rm pr}^2 + \omega_c^2}$ где $\omega_c = eB/m^*$ – циклотронная частота. Данное свойство объясняется тем, что проксимити плазменная мода наблюдается в ДЭС с номинально бесконечным латеральным размером, поэтому краевые эффекты пренебрежимо малы. Важно заметить, что геометрия AlGaAs/GaAs структуры, в которой наблюдаются проксимити плазмоны, полностью идентична транзистору с высокой подвижностью электронов (HEMT – high electron mobility transistor). При этом для типичных параметров НЕМТ транзисторов: длина затвора L = 10 мкм, W = h = 0.2 мкм и $n_s = 10^{12} \, \mathrm{cm}^{-2}$ частота проксимити плазмона $f_{\mathrm{pr}} \approx$ ≈ 0.7 ТГц. Резонансное возбуждение плазменных волн является эффективным механизмом преобразования электромагнитного излучения в сигнал фотоотклика транзисторной структуры [22-26]. Таким образом, прогресс в изучении физических свойств 2D плазменных возбуждений может привести к значительному прогрессу в разработке практических плаз-

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

монных компонентов в CBЧ и терагерцовой электронике.

Образцы и экспериментальная методика. Эксперименты проводились на высококачественных GaAs/AlGaAs гетероструктурах, выращенных с помощью метода молекулярно-пучковой эпитаксии на нелегированной GaAs подложке, с квантовой ямой шириной 30 нм. Характерные значения концентрации двумерных электронов и их подвижности для разных структур составляли $n_s = (1.0 - 3.3) \times$ $\times 10^{11} \,\mathrm{cm}^{-2}$ и $\mu = (1 - 4) \times 10^{6} \,\mathrm{cm}^{2}/(\mathrm{B} \cdot \mathrm{c}),$ cootветственно ($T = 4.2 \,\mathrm{K}$). Для возбуждения плазменных колебаний сверхвысокочастотное (СВЧ) излучение в частотном диапазоне от 0.1 до 60 ГГц подводилось к образцу либо по согласованной коаксиальной линии, либо по волноводному тракту. Для детектирования резонансного разогрева ДЭС использовалась уникальная оптическая методика [27, 28]. Оптическая методика была основана на высокой чувствительности спектров люминесценции двумерных электронов к нагреву ДЭС. Излучение от полупроводникового лазера с длиной волны λ = = 780 нм через оптоволокно подводилось непосредственно к образцу с ДЭС. Затем спектр рекомбинационной фотолюминесценции электронов и дырок собирался с помощью того же оптического волокна и поступал на вход спектрометра со встроенной ССD (charge-coupled device) камерой. Спектры люминесценции при подаче СВЧ сигнала и без него записывались и вычитались друг из друга. В полученном таким образом дифференциальном спектре выбирался некоторый диапазон, интеграл по которому служил мерой разогрева ДЭС. Важным преимуществом оптического метода детектирования плазменных резонансов является то, что для его реализации не нужно наносить на поверхность образца вспомогательные электроды, наличие которых неизбежно приводит к модификации свойств плазмонов. Все измерения проводились в криостате со сверхпроводящим соленоидом, позволявшим создавать магнитное поле до 7 Тл. В большинстве экспериментов температура образца составляла 4.2 К.

Проксимити плазменные возбуждения в геометрии полоски. Долгое время считалось, что в частично экранированной ДЭС будут наблюдаться экранированные плазменные возбуждения. Однако в результате экспериментальных и теоретических исследований было обнаружено, что в частично экранированной ДЭС возбуждается особое семейство проксимити плазменных возбуждений, которое физически отлично по свойствам и от полностью экранированных, и от неэкранированных плазмонов [20, 21, 29, 30].

В экспериментах по обнаружению нового семейства проксимити плазменных мод был исследован образец, представляющий собой ДЭС прямоугольной формы (вставка к рис. 1). В центре мезы был



Рис. 1. (Цветной онлайн) Спектры интенсивности микроволнового поглощения в зависимости от величины магнитного поля, приложенного перпендикулярно к поверхности образца. Красные стрелки показывают положение нижайшей по частоте проксимити моды. На верхней вставке изображен схематический вид исследуемого образца – прямоугольная ДЭС с заземленными контактами по бокам и центральным узким затвором в форме полоски с размерами L = 0.5 мм и W = 20 мкм. Из работы [29]

термически напылен Cr (5 нм) – Au (300 нм) металлический затвор с шириной W = 20 мкм и длиной L = 0.5 мм. На расстоянии a = 200 мкм от затвора на краях ДЭС были расположены металлические заземленные контакты. Центральный металлический затвор на границах ДЭС расширялся и на расстоянии 100 мкм от ДЭС переходил в контакты, имевшие размеры $100 \times 100 \text{ мкм}^2$. Расстояние от ДЭС до поверхности полупроводниковой подложки составляло h = 440 нм. СВЧ излучение подводилось непосредственно к центральному затвору. Концентрация двумерных электронов в квантовой яме составляло

ла $n_s = 2.4 \times 10^{11} \,\mathrm{cm}^{-2}$, подвижность – $\mu = 4 \times 10^6 \,\mathrm{cm}^2/(\mathrm{B\cdot c})$ при температуре $T = 4.2 \,\mathrm{K}$.

На рисунке 1 показаны типичные кривые интенсивности микроволнового поглощения в образце в зависимости от магнитного поля для указанных частот. На графиках видны симметричные по магнитному полю резонансные пики. С увеличением частоты количество наблюдаемых пиков увеличивается, и они сдвигаются в сторону больших значений магнитного поля. Красной стрелкой на графиках отмечен резонанс, соответствующий нижайшей по частоте моде. Стоит отметить, что данные возбуждения находятся существенно ниже по частоте, чем полностью экранированный плазмон (2) с волновым вектором $q = \pi/W$.

На рисунке 2а показаны полученные из спектров поглощения зависимости резонансной частоты от магнитного поля для наблюдаемых плазменных мод. Сплошными кружками показаны четыре ветви новых плазменных возбуждений, демонстрирующие стандартную магнитополевую зависимость $\omega(B) = \sqrt{\omega_{\rm pr}^2 + \omega_c^2}$. Стоит обратить внимание, что экспериментальные зависимости демонстрируют немного отличающийся от теоретического значения $\omega_c = eB/m^*$ наклон и пересекают прямую, отвечающую циклотронному резонансу (пунктирная линия на рис. 2a). Это явление можно приписать проявлению эффектов запаздывания – гибридизации плазменных возбуждений со светом [11]. Также наблюдался обычный двумерный плазмон с волновым вектором, определяемым поперечными размерами ДЭС. Он показан полой стрелкой на рис. 1 и полыми кружками на рис. 2а.

Для теоретического описания плазменных волн, связанных с металлическим затвором, были введены индексы N_l и N_{tr} – число узлов колебаний зарядовой плотности вдоль затвора и поперек него, соответственно. Будем обозначать интересующие нас плазменные моды парой чисел (N_l, N_{tr}) с продольной и поперечной компонентами волнового вектора, равными, соответственно, $q_l = N_l \frac{\pi}{L}$ и $q_{\rm tr} = N_{\rm tr} \frac{\pi}{W}$. Как уже отмечалось ранее, экранированный плазмон, возбуждающийся в подзатворной области ДЭС, с волновым вектором $q = \pi/W$ находится выше по частоте, чем наблюдаемые резонансы. Поэтому для объяснения происхождения наблюдаемых плазмонов были рассмотрены плазменные моды с $N_{\rm tr} = 0$, т.е. моды, не содержащие узлов колебаний зарядовой плотности поперек затвора. Оказалось, что в рассматриваемой конфигурации ДЭС, частично экранированной затвором в форме узкой полоски, коле-



Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Магнитодисперсионная зависимость для первых четырех проксимити гармоник с $q_l = N_l \frac{\pi}{L}$, где $N_l = 1, 2, 3, 4$ (закрашенные точки) и для плазмона, связанного с плазменными колебаниями во всей прямоугольной ДЭС (полые точки). Пунктирная линия соответствует частоте циклотронного резонанса. Сплошные линии – подгонка зависимостью $\omega(B) = \sqrt{\omega_{\rm pr}^2 + \omega_c^2}$. (b) – Зависимость частоты проксимити плазмона в B = 0 Тл от номера гармоники. Закрашенные точки – экспериментальные данные, сплошная кривая – подгонка корневой зависимостью, пунктирная кривая – теория (3) без каких- либо подгоночных параметров. Из работы [29]

бания $(N_l, 0)$ с волновым вектором $q_l = N_l \frac{\pi}{L}$, направленным вдоль полоски затвора, имеют нетривиальную дисперсионную зависимость (3). Она имеет неожиданный корневой характер ($\omega_{\rm pr} \propto \sqrt{q}$), что характерно для неэкранированных плазмонов (1), и в то же время содержит пропорциональность ($\omega_{\rm pr} \propto \propto \sqrt{h}$), где h – расстояние от ДЭС до затвора, ха-

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

рактерную для полностью экранированного случая (2). Данный результат получен теоретически в работе [20], а также качественно объяснен в рамках *LC*-подхода в [21]. Таким образом, колебание (1,0) оказывается наиболее низкочастотным возбуждением в частично экранированной двумерной электронной системе (за исключением случая, когда затвор и ДЭС соединены электрически, который будет рассмотрен отдельно). Также у данной моды не наблюдается краевых ветвей, что согласуется с теоретическими предсказаниями. Плазменные моды частично экранированной ДЭС были названы проксимити плазменными возбуждениями.

Чтобы убедиться в том, что наблюдаемые резонансы относятся к семейству проксимити плазменных возбуждений, на рис. 2b сплошными точками построена зависимость резонансной частоты наблюдаемых плазменных колебаний в нулевом магнитном поле от номера гармоники. Видно, что данная зависимость отлично описывается корневым законом (сплошная кривая). Для наглядности на вставке также приведена соответствующая линеаризованная зависимость. Для сравнения с теорией на рисунке 2b пунктирной линией построена зависимость (3) без каких-либо подгоночных параметров. Стоит заметить, что и наличие экранировки, и одномерная природа возбуждения обычно приводят к линейному закону дисперсии [12, 31-33]. Именно поэтому наблюдаемая экспериментально корневая дисперсионная зависимость, отлично согласующаяся с теорией (3), дает основание выделить данные плазменные моды в новое семейство проксимити плазменных возбуждений, возникающее в ДЭС с частичной экранировкой, и отличное физически от ранее исследованных плазмонов. Представленные экспериментальные данные также позволяют однозначно идентифицировать наблюдаемые плазменные моды как $(N_l, 0)$ проксимити гармоники с волновыми векторами $q_l = N_l \frac{\pi}{r}$, где $N_l = 1, 2, \ldots$

Что касается проксимити плазменных мод с ненулевым $N_{\rm tr}$, то в этом случае теория дает следующую формулу для спектра проксимити плазмонов [20]:

$$\omega^2 = \frac{n_s e^2 h}{m^* \varepsilon \varepsilon_0} \left(q_{\rm tr}^2 + \frac{4}{W} q_l \right) \qquad (q_l W \ll 1).$$
(4)

Как нетрудно заметить, в пределе когда $q_{\rm tr} \gg q_l$ дисперсионная зависимость приобретает линейный характер от волнового вектора и переходит в стандартное выражение для экранированного плазмона (2). Именно эта плазменная мода наблюдалась во многих экспериментах в аналогичных ДЭС с частичной экранировкой и принималась за обычный экранированный плазмон [34, 35]. Однако, как видно из настоящего рассмотрения, в представленной системе возникает новое семейство проксимити плазменных мод с нетривиальными дисперсионными зависимостями (3, 4). В экспериментах [21] наблюдались и продольные (N_l , 0), и поперечные ($N_{\rm tr} \neq 0$) проксимити плазменные моды.

Особый интерес представляет вопрос о том, как происходит переход от проксимити плазмонов в ДЭС с частичной экранировкой к обычным плазменным возбуждениям в ДЭС. Для ответа на этот вопрос был поставлен ряд экспериментов [36]. В одном из них была исследована ДЭС в форме диска, частично экранированная затвором большого в латеральном направлении размера с круглым отверстием немного меньшего, чем ДЭС диаметра. Таким образом, оказывалось экранировано кольцо на границе ДЭС. Был произведен перебор по ширине колец. В такой системе наблюдались проксимити плазменные возбуждения, для которых на длине подзатворного кольца укладывалось целое число длин волн плазмона. Соответствующая дисперсионная зависимость для данной геометрии определялась формулой (3) с отличием в $\sqrt{2}$ раз в меньшую сторону. В результате для больших значений ширины кольца наблюдалось проксимити плазменное возбуждение, а в пределе узкого кольца наблюдался латерально экранированный плазмон в диске. При этом для каждой толщины кольца наблюдался только один резонанс, то есть проксимити и обычный плазмоны не наблюдались в экспериментах одновременно. Таким образом, был продемонстрирован переход от проксимити плазмона к плазменному возбуждению с боковой экранировкой. Похожий эксперимент был проделан в работе [37].

Проксимити плазменные возбуждения в геометрии диска. В предыдущем разделе был рассмотрен случай затвора в форме узкой полоски, где для продольных колебаний реализован случай $qW \ll 1$. В настоящем же разделе будет рассмотрен случай qW ~ 1, а именно, проксимити плазмоны в ДЭС с затвором в форме диска. Эксперименты проводились на ДЭС в форме диска диаметром $D = 0.5 \,\text{мм}$ с центральными затворами различного диаметра d = 50,100 и 200 мкм. Квантовая яма с двумерным электронным газом находилась на расстоянии h = 440 нм от поверхности полупроводникового кристалла. Концентрация двумерных электронов составляла $n_s = 2.4 \times 10^{11} \,\mathrm{cm}^{-2}$, подвижность – $\mu = 5 \times 10^6 \, \text{см}^2 / (\text{B} \cdot \text{c})$ при температуре $T = 4.2 \, \text{K}.$ СВЧ излучение от генератора подводилось непосредственно к центральному затвору.

Были проделаны аналогичные описанным в предыдущем разделе измерения интенсивности микроволнового поглощения в зависимости от магнитного поля при различных частотах, а также получены магнитодисперсионные зависимости для плазменных возбуждений в диске. Полученная в результате зависимость резонансной частоты в нулевом магнитном поле от волнового вектора показана на рис. 3 полыми точками. Представленная дисперсионная зависимость относится к наиболее низкочастотной наблюдаемой плазменной моде. Видно, что данная зависимость имеет линейный характер, как и для случая экранированного плазмона.



Рис. 3. (Цветной онлайн) Полыми точками показана полученная экспериментальным путем дисперсионная зависимость проксимити (1,0) плазменной моды. Сплошная прямая – аппроксимация измеренной дисперсии линейной зависимостью. Пунктирная линия – теоретическое предсказание согласно (5). На вставке схематично показана ДЭС большого размера с затвором в форме диска. Из работы [37]

Для классификации плазменных возбуждений в такой системе типично вводятся индексы (m, n), отвечающие количеству узлов осцилляций зарядовой плотности вдоль периметра и вдоль радиуса затвора, соответственно. В результате теоретического рассмотрения [38] получается следующая формула для дисперсионной зависимости проксимити плазменных возбуждений в геометрии диска:

$$\omega_{\rm pr} = \Omega_{m,n} \sqrt{\frac{n_s e^2 h}{m^* \varepsilon \varepsilon_0}} \frac{2}{d},\tag{5}$$

где n_s – концентрация двумерных электронов, m^* – эффективная масса электронов, d – диаметр затво-

ра в форме диска, ε – диэлектрическая проницаемость полупроводниковой подложки, h – расстояние от ДЭС до затвора. Безразмерный коэффициент $\Omega_{m,n}$ определяется как (n+1)-й положительный корень уравнения

$$\partial_{\Omega} J_{|m|}(\Omega) + |m| J_{|m|}(\Omega) / \Omega = 0, \qquad (6)$$

где $J_{|m|}(x)$ – функция Бесселя первого рода (m > 1). Наиболее низкочастотной моде, описываемой уравнением (5), соответствует коэффициент $\Omega_{1,0} = 2.4$. Далее будет показано, что при некоторых условиях появляется еще более низкочастотная проксимити (0,0) мода. Стоит отметить, что дисперсионная зависимость полностью экранированного плазмона имеет аналогичный (5) вид и отличается только численным коэффициентом $\Omega_{1.0}^{\text{screened}} = 1.8$. Предположительно, это связано с тем, что в обоих случаях энергия плазменных колебаний локализована в основном в подзатворной области, а отличие в численном коэффициенте возникает из-за различных граничных условий на краю диска/затвора. Из-за этого плазмоны, возбуждаемые в некотором смысле в "противоположных" конфигурациях (i) ДЭС в форме диска, экранированной бесконечным затвором и (ii) бесконечной ДЭС, экранированной затвором в форме диска, нередко путают друг с другом.

Экспериментальные точки (рис. 3) хорошо описываются соответствующей теоретической дисперсионной зависимостью (5). Небольшое отличие от теории, судя по всему, обусловлено неточным учетом диэлектрического окружения ДЭС.

Релятивистские плазменные возбуждения. Впервые релятивистские плазменные возбуждения были обнаружены в полоске ДЭС, поперек которой был напылен металлический затвор. При этом затвор электрически соединялся с ДЭС через внешнюю 50 Ом цепь [39, 40]. В данных работах были подробно исследованы зависимости частоты и затухания релятивистского плазмона от основных параметров системы и установлены его уникальные свойства, в частности, аномально малое затухание. Это позволило наблюдать его вплоть до комнатной температуры на GaAs/AlGaAs гетероструктурах стандартного качества. На основе значительного массива полученных данных удалось построить феноменологическую модель явления, однако его физическую природу удалось установить лишь после открытия проксимити плазменных волн. На родство релятивистских и проксимити плазмонов указывало то, что оба типа плазменных возбуждений наблюдались лишь в структурах с затвором. Однако, для релятивистских плазмонов было обнаружено еще одно важ-

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

ное свойство: для их возбуждения было необходимо электрическое соединение между затвором и ДЭС.

Выше были введены индексы для классификации плазменных возбуждений в ограниченном образце в форме диска по числу узлов колебаний зарядовой плотности вдоль периметра и вдоль радиуса. Особым случаем является осесимметричный плазмон с индексами (0,0), у которого вообще нет узлов в переменном потенциале плазменной волны. Из общих соображений понятно, что в электронейтральной ДЭС такое возбуждение существовать не может. Поэтому необходимым условием его возбуждения является электрическое соединение между двумерной электронной системой и затвором, которое обеспечивает перетекание заряда. Таким образом, проксимити плазмон с индексами (0,0) обладает в точности такими же свойствами, как релятивистский плазмон.

В работе 2020 г. [41] было проведено детальное исследование физических свойств релятивистского плазменного возбуждения. На рисунке 4 в правом верхнем углу приведена схема образца. Образец содержал мезу в форме диска с диаметром D = 0.5 мм. По периметру к ДЭС был сделан омический контакт, а над центром ДЭС был нанесен металлический затвор также в форме диска. Диаметр затвора варьировался в различных образцах от d = 20 мкм до 100 мкм. Расстояние между ДЭС и затвором составляло h = 370 нм. Затвор и контакт были соединены золотым проводником диаметром 25 мкм. В экспериментах длина проводника менялась в пределах от l = 0.6 мм до 5 мм. Для возбуждения плазменнных колебаний в исследуемой структуре использовалась проволочная антенна, расположенная в непосредственной близости от образца.

На рисунке 4 в левом верхнем углу приведены характерные зависимости микроволнового поглощения ДЭС от приложенного магнитного поля, измеренные на одном и том же образце с электронной плотностью $n_s = 2.5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и диаметром затвора d = 100 мкм в двух конфигурациях: при наличии проводника с длиной l = 2.3 мм, соединяющего ДЭС с затвором (красная кривая) и при его отсутствии (черная кривая). На красной кривой видна пара симетричных по магнитному полю резонансов, которые отсутствуют на черной кривой. Ниже будет показано, что эти резонансы отвечают возбуждению в исследуемой структуре релятивистской плазменной моды.

На нижней панели рис. 4 сплошными кружками построены магнитополевые зависимости частоты наблюдаемых плазменных резонансов для одной и той же структуры, но с различной длиной проводни-



Рис. 4. (Цветной онлайн) (Вверху справа) Схематическое изображение экспериментального образца. (Вверху слева) Магнитополевые зависимости поглощения микроволнового излучения на частоте f = 9.5 ГГц в образце с D = 0.5 мм, d = 100 мкм, $n_s = 2.5 \times 10^{11}$ см⁻² в двух конфигурациях: с проволокой длиной l = 2.3 мм, соедиянющей ДЭС и затвор, и без нее. (Внизу) Магнитополевые зависимости частоты релятивистского плазмона при различной длине проводника, соединяющего ДЭС с затвором (сплошные кружки), одночастичного циклотронного резонанса (полые кружки), (1,0) моды проксимити плазмона (квадратики). Из работы [41]

ка, соединяющего ДЭС с затвором. Видно, что для каждой длины проводника наблюдаются три плазменные моды. Самая низкочастотная мода соответствует возбуждению (0,0) релятивистского плазмона (закрашенные кружки). Полыми кружками на рис. 4 показана магнитодисперсионная зависимость одночастичного циклотронного резонанса, природа возникновения которого до настоящего времени не вполне ясна [42, 43]. Полыми квадратиками на рис. 4 обозначена (1,0) мода проксимити плазмона, возбуждаемая в области вблизи затвора. Видно, что в пределе сильных магнитных полей магнитодисперсионная зависимость релятивистского плазмона асимптотически выходит на частоту некоторого фотонного резонанса. Было установлено, что частота этого фотонного резонанса обратно пропорциональна длине проводника l. Таким образом, релятивистский плазмон испытывает сильную гибридизацию с электромагнитным полем внешней резонансной цепи. Для того чтобы измерить частоту релятивистского плазмона с минимальным искажением от фотонной гибридизации, был использован проводник минимально возможной длины. В данном случае таковой являлась l = 0.6 мм.

На рисунке 5а сплошными красными кружками показаны зависимости частоты релятивистского



Рис. 5. (Цветной онлайн) (а) – Зависимости частоты (0,0) релятивистского плазмона в нулевом магнитном поле (сплошные красные кружки) и (1,0) проксимити плазмона (полые синие кружки) от обратного диаметра затвора при концентрации электронов $n_s = 2.5 \times 10^{11}$ см⁻² и минимально реализуемой на эксперименте длине проволоки l = 0.6 мм. Линиями показаны теоретические зависимости, полученные по формулам (5) и (8). (b) – Зависимости частоты плазменных мод от квадратного корня из электронной концентрации. Измерения проводились на одной структуре с диаметром центрального затвора d = 50 мкм. Из работы [41]

плазменного возбуждения от обратного диаметра затвора. Четыре точки на графике соответствуют измерениям на четырех структурах с различным диаметром затвора d = 100, 50, 40 и 20 мкм, изготовленных из одной и той же полупроводниковой шайбы с электронной концентрацией $n_s = 2.5 \times 10^{11}$ см⁻². На рисунке 5b приведена зависимость частоты релятивистского плазмона от квадратного корня из электронной концентрации, измеренная на одном образце с диаметром затвора d = 50 мкм. Концентрация в образце изменялась посредством методики фотообеднения. Все измерения на рис. 5 проводились на образцах с минимальной длиной проводника l = 0.6 мм.

747

Для описания физических свойств релятивистской плазменной моды был развит теоретический подход, который в предположении, что импеданс проводника, соединяющего затвор и ДЭС, равен нулю, позволил получить точное дисперсионное уравнение для релятивистского плазмона:

$$J_0(\Omega) - \Omega J_1(\Omega) \ln \left(D/d \right) = 0, \tag{7}$$

где J_0 , J_1 – функции Бесселя первого рода, а $\Omega = \omega d/[2\sqrt{n_s e^2 h/m^* \varepsilon \varepsilon_0}]$ – обезразмеренная плазменная частота. Используя разложение в ряд для функций Бесселя, отсюда можно получить следующее приближенное выражение для плазменной частоты релятивистского плазмона $\omega_{\rm rel}$

$$\omega_{\rm rel} \approx \sqrt{\frac{2}{1/4 + \ln\left(D/d\right)}} \sqrt{\frac{n_s e^2 h}{m^* \varepsilon \varepsilon_0}} \frac{2}{d},\tag{8}$$

хорошо работающее при D/d > 2. Полученные по формуле (8) теоретические зависимости частоты (0,0) плазменной моды показаны красными линиями на рис. 5. Видно, что теоретические зависимости неплохо описывают экспериментальные данные. Это является неоспоримым свидетельством в пользу того, что релятивистский плазмон представляет собой именно (0,0) моду проксимити плазмона. Стоит отметить, что экспериментальные значения систематически находятся ниже теоретической зависимости, что, по-видимому, является следствием неучтенной в модели индуктивности проволоки, соединяющей ДЭС и затвор. Для сравнения на этих же графиках полыми синими кружками приведены полученные на тех же образцах зависимости частоты (1,0)моды проксимити плазмона, а синими линиями - соответствующие теоретические зависимости, полученные из формулы (5). Видно хорошее согласие между теорией и экспериментом.

LC плазменные моды. Оказывается, что различные типы плазменных мод можно элегантно и наглядно описать, рассматривая ДЭС с близлежащими затворами и контактами на языке электрических цепей со сосредоточенными либо распределенными параметрами [17, 34, 44, 45]. Действительно, согласно модели Друде проводимость ДЭС в нулевом магнитном поле описывается следующим выражением:

$$\sigma(\omega) = \frac{n_s e^2 \tau}{m^*} \frac{1}{1 + i\omega\tau},\tag{9}$$

откуда импеданс $Z(\omega)$ ДЭС можно представить в виде

$$Z(\omega) = \frac{1}{\sigma} = R + i\omega L_K, \qquad L_K = \frac{m^*}{n_s e^2}.$$
 (10)

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

Видно, что импеданс ДЭС описывается при помощи активного сопротивления и кинетической индуктивности L_K , связанной с инерционными свойствами двумерных электронов. Аналогичным образом можно показать, что в присутствии внешнего магнитного поля B в чистом пределе $\omega \tau \gg 1$ кинетическая индуктивность ДЭС имеет вид [45]

$$L_K(B) = \frac{m^*}{n_s e^2} \left(1 - \frac{\omega_c^2}{\omega^2} \right). \tag{11}$$

Для плазменной волны, распространяющейся вдоль двумерного слоя электронов распределенная емкость эквивалентной LC цепи составляет $C_p(q) = 2\varepsilon_0 \varepsilon^*/q$ [17, 44]. Воспользовавшись выражением (10) для кинетической индуктивности ДЭС, приходим к хорошо знакомой формуле (1) для дисперсии 2D плазмонов:

$$\omega_p = \frac{1}{\sqrt{L_K C_p(q)}} = \sqrt{\frac{n_s e^2 q}{2\varepsilon_0 \varepsilon^* m^*}},$$
 (12)

где $\varepsilon^* = (\varepsilon_{\text{GaAs}} + 1)/2$. В ненулевом магнитном поле $B \neq 0$ частота плазменного резонанса $\omega = 1/\sqrt{L_K(B)C}$. Принимая во внимание формулы (10) и (11), отсюда можно получить выражение для магнитодисперсии плазменных волн

$$\omega^2 = \omega_p^2 + \omega_c^2. \tag{13}$$

Помимо простого и наглядного описания обычных двумерных плазмонов, LC подход позволяет предсказывать и описывать совершенно новые типы плазменных мод. Так, оказывается в структуре, где ДЭС в виде квадратной полоски заключена между двумя прямоугольными омическими контактами (вставка к рис. 6) возбуждаются два принципиально различных типа плазменных возбуждений [45]. Один из них – это привычный двумерный плазмон в полоске ДЭС. Второй – это новая LC плазменная мода, которая связана с резонансом в LC контуре, состоящем из кинетической индуктивности ДЭС L_K и межконтактной латеральной емкости С. Следует заметить, что LC плазменную моду можно рассматривать как релятивистский плазмон в цепи, замкнутой током смещения, текущем в пространстве между контактными электродами.

На рисунке 6 приведены магнитодисперсии двумерного плазмона и LC плазменного резонанса в образце с электронной плотностью $n_s = 2 \times 10^{11}$ см⁻², размером ДЭС 0.5×0.5 мм², и контактными площадками с размером 0.85×0.7 мм². Контурные голубые символы соответствуют обычному двумерному плазмону, красные сплошные – LC плазменной моде. Оба



Рис. 6. (Цветной онлайн) Магнитодисперсия двумерного плазмона (синие кружки) и *LC* плазменного резонанса (красные точки) в образце с электронной плотностью $n_s = 2 \times 10^{11}$ см⁻², размером ДЭС 0.5×0.5 мм², и контактными площадками размером 0.85×0.7 мм². Сплошные кривые соответствуют аппроксимации экспериментальных точек при помощи уравнения (13). Пунктирная прямая соответствует циклотронной частоте $\omega = eB/m^*$ для эффективной массы $m^* =$ $= 0.067m_0$. На вставке приведена схема образца и эквивалентной электрической цепи. Из работы [45]

резонанса хорошо описываются магнитодисперсионным соотношением (13) (сплошные кривые на рис. 6). Однако магнитодисперсия LC плазменного резонанса пересекает циклотронную магнитодисперсию для эффективной массы $m^* = 0.067m_0$ (пунктирная прямая на рис. 6). Это связано с проявлением релятивистских эффектов запаздывания, которые перенормируют эффективную циклотронную частоту [11].

Для подтверждения сделанных утверждений, были определены значения плазменных частот для каждой из плазменных мод. Для обычного двумерного плазмона в полоске ДЭС с размерами $W \times W$ волновой вектор $q = \pi/W$. Для W = 0.5 мм теоретическое выражение (12) дает плазменную частоту $f_{p} = 28 \, \Gamma \Gamma \mu$ (отмечена синей стрелкой на рис. 6), что превосходно согласуется с результатами эксперимента. Плазменная частота LC резонанса определяется выражением $\omega_{\rm LC} = 1/\sqrt{(L_K + L_m)C}$, где L_m – магнитный вклад в индуктивность, связанный с релятивистскими эффектами запаздывания. Для исследуемого образца по данным численного моделирования емкость между контактами составляет $C = 0.115 \ \mathrm{n}\Phi$, а магнитная индуктивность $L_m = 1.7 \,\mathrm{hTh}$. Кинетическая индуктивность двумерных электронов, вычисленная согласно формуле (10), составляет $L_K = 1.2 \,\mathrm{n\Gamma}$ н. Отсюда собственная частота рассматриваемого плазмонного LC резонатора $f_{\mathrm{LC}} = 8.7 \,\mathrm{\Gamma\Gamma}$ ц (отмечена красной стрелкой на рис. 6), что также великолепно согласуется с результатами эксперимента.

Для подтверждения природы LC плазменной моды было проведено исследование зависимости ее резонансной частоты от размера контактов, который определяет межконтактную емкость C. Для этого были изготовлены два дополнительных образца с размерами контактов $0.4 \times 0.7 \text{ мм}^2$ ("образец 1") и $1.1 \times 3.9 \text{ мм}^2$ ("образец 2"). Схематическое изображение образцов показано на рис. 7а. Размер ДЭС



Рис. 7. (Цветной онлайн) (а) – Схематическое изображение двух образцов с одинаковыми размерами ДЭС и различными размерами контактных областей. (b) – Магнитодисперсии LC плазменной моды в данных образцах. На вставке – зависимость LC плазменной частоты от обратного квадратного корня из емкости между контактыми обкладками. Прямая линия – линейная аппроксимация по экспериментальным точкам. Из работы [45]

при этом оставался фиксированным и равным $0.5 \times 0.5 \text{ мм}^2$. Магнитодисперсии *LC* моды в образцах 1 и 2 приведены на рис. 7b (синие и красные точки соответственно). Из эксперимента следует, что увеличение площади контактов вызывает значительное уменьшение частоты *LC* плазменного резонанса. На

вставке к рис. 7b приведена зависимость частоты резонанса от величины $1/\sqrt{C}$, где емкость C была рассчитана при помощи численного моделирования. Зависимость носит линейный характер, что согласуется с теоретическим выражением для плазменной частоты $\omega_{\rm LC} = 1/\sqrt{(L_K + L_m)C}$. Заметим, что частоту LC плазменной моды легко регулировать, изменяя геометрические размеры образца либо электронную плотность в ДЭС. Это вместе с субволновым размером системы делает такие плазмонные LC резонаторы интересным кандидатом на роль элементов метаматериалов, работающих в терагерцовом частотном диапазоне.

Используя разработанный *LC* подход, легко оценить частоту релятивистского плазмона в геометрии квази-Корбино, изображенной на рис. 4. Действительно, релятивистский плазмон можно интерпретировать как резонанс в эквивалентном плазмонном *LC*-контуре, образованном подзатворной емкостью и кинетической индуктивностью ДЭС. При этом важно учитывать, что осцилляции в таком контуре существуют только тогда, когда он замкнут по переменному току, т.е. затвор электрически соединен с ДЭС. Если пренебречь индуктивностью замыкающей цепи, то можно дать следующую оценку для подзатворной емкости и суммарной кинетической индуктивности от областей ДЭС между затвором и контактом и под затвором:

$$C = \frac{\varepsilon \varepsilon_0 \pi d^2}{4h}, \qquad L_K = \frac{m^*}{2\pi e^2 n_s} \left(\ln \frac{D}{d} + \frac{1}{4} \right). \tag{14}$$

Отсюда плазменную частоту релятивистского плазмона можно оценить как

$$\omega_{\rm rel} = \frac{1}{\sqrt{L_K C}} = \sqrt{\frac{2}{(1/4 + \ln\left(D/d\right))}} \sqrt{\frac{n_s e^2 h}{m^* \varepsilon \varepsilon_0}} \frac{2}{d}.$$
 (15)

Найденное выражение полностью согласуется с теоретическим расчетом (8). Таким образом, *LC*-подход является мощным инструментом для качественного и количественного описания различных типов плазменных возбуждений.

Заключение. В обзоре с экспериментальной точки зрения рассмотрены основные свойства нового семейства коллективных плазменных возбуждений в ДЭС – проксимити плазмонов (proximity plasmons). Данный тип плазменных волн наблюдается в ДЭС, частично экранированных металлическим затвором. Установлено, что наряду с проксимити плазменными волнами в таких структурах можно также наблюдать релятивистские плазмоны и *LC* плазменные резонансы. При этом релятивистский плазмон и

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

LC плазменный резонанс можно рассматривать как частные случаи проксимити плазмона. Оказалось, что новое семейство плазменных возбуждений обладает рядом уникальных физических свойств. Вопервых, спектр проксимити плазмонов зависит от геометрических параметров затвора и расстояния между ним и ДЭС. Во-вторых, у проксимити плазменных мод отсутствует краевая ветвь, и они находятся по частоте гораздо ниже, чем обычные двумерные плазмоны, возбуждаемые в тех же полупроводниковых микроструктурах. Наконец, оказалось, что в случае, если затвор соединен с двумерной системой внешней цепью, то в системе возбуждается "заряженная" релятивистская плазменная мода, обладающая аномально малым затуханием. Нашими коллегами из ИРЭ РАН - А. А. Заболотных и В. А. Волковым была разработана подробная теория для описания нового семейства плазменных мод. Теория оказалась в хорошем согласии с экспериментом. Также в обзоре был развит LC подход к описанию различных типов 2D плазменных колебаний. Этот подход основан на рассмотрении электродинамического отклика ДЭС на основании эквивалентной электрической цепи с сосредоточенными параметрами. Оказалось, что такой наглядный и интуитивно понятный метод дает правильное количественное описание различных типов плазменных мод в ДЭС. Описанные в обзоре новые результаты значительно расширяют горизонт возможных применений плазмоники для создания различных устройств современной СВЧ и терагерцовой электроники.

Работа была выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант #19-72-30003.

- 1. F. Stern, Phys. Rev. Lett. 18, 546 (1967).
- C. C. Grimes and G. Adams, Phys. Rev. Lett. 36, 145 (1976).
- S. J. Allen, D. C. Tsui, and R. A. Logan, Phys. Rev. Lett. 38, 980 (1977).
- T. N. Theis, J. P. Kotthaus, and P. J. Stiles, Solid State Commun. 24, 273 (1977).
- S. J. Allen, H. L. Störmer, and J. C. M. Hwang, Phys. Rev. B 28, 4875 (1983).
- D. C. Glattli, E. Y. Andrei, G. Deville, J. Poitrenaud, and F. I. B. Williams, Phys. Rev. Lett. 54, 1710 (1985).
- V. M. Muravev, A. A. Fortunatov, I. V. Kukushkin, J. H. Smet, W. Dietsche, and K. von Klitzing, Phys. Rev. Lett. 101, 216801 (2008).
- L. Ju, B. Geng, J. Horng, C. Girit, M. Martin, Z. Hao, H. A. Bechtel, X. Liang, A. Zettl, Y.R. Shen, and F. Wang, Nat. Nanotechnol. 6, 630 (2011).

- J. Chen, M. Badioli, P. Alonso-Gonzalez, S. Thongrattanasiri, F. Huth, J. Osmond, M. Spasenovic, A. Centeno, A. Pesquera, P. Godignon, A. Z. Elorza, N. Camara, F. Abajo, R. Hillenbrand, and F. H. L. Koppens, Nature 487, 77 (2012).
- Z. Fei, A.S. Rodin, G.O. Andreev, W. Bao, A.S. McLeod, M. Wagner, L.M. Zhang, Z. Zhao, M. Thiemens, G. Dominguez, M.M. Fogler, A.H. Castro Neto, C.N. Lau, F. Keilmann, and D.N. Basov, Nature 487, 82 (2012).
- I. V. Kukushkin, J. H. Smet, S. A. Mikhailov, D. V. Kulakovskii, K. von Klitzing, and W. Wegscheider, Phys. Rev. Lett. **90**, 156801 (2003).
- A. V. Chaplik, ZhETF **62**, 746 (1972) [Sov. Phys. JETP **35**, 395 (1972)].
- A. Satou, I. Khmyrova, V. Ryzhii, and M.S. Shur, Semicond. Sci. Technol. 18, 460 (2003).
- V. Ryzhii, A. Satou, W. Knap, and M. S. Shur, J. Appl. Phys. 99, 084507 (2006).
- G. C. Dyer, G. R. Aizin, S. Preu, N. Q. Vinh, S. J. Allen, J. L. Reno, and E. A. Shaner, Phys. Rev. Lett. **109**, 126803 (2012).
- A. R. Davoyan, V. V. Popov, and S. A. Nikitov, Phys. Rev. Lett. **108**, 127401 (2012).
- G. C. Dyer, G. R. Aizin, S. J. Allen, A. D. Grine, D. Bethke, J. L. Reno, and E. A. Shaner, Nature Photon. 7, 925 (2013).
- A.S. Petrov, D. Svintsov, V. Ryzhii, and M.S. Shur, Phys. Rev. B 95, 045405 (2017).
- D. A. Iranzo, S. Nanot, E. J. C. Dias, I. Epstein, C. Peng, D. K. Efetov, M. B. Lundeberg, R. Parret, J. Osmond, J.-Y. Hong, J. Kong, D. R. Englund, N. M. R. Peres, and F. H. L.Koppens, Science **360**, 291 (2018).
- A. A. Zabolotnykh and V. A. Volkov, Phys. Rev. B 99, 165304 (2019).
- V. M. Muravev, P. A. Gusikhin, A. M. Zarezin, I. V. Andreev, S. I. Gubarev, and I. V. Kukushkin, Phys. Rev. B 99, 241406(R) (2019).
- W. Knap, Y. Deng, S. Rumyantsev, J.-Q. Lü, M.S. Shur, C.A. Saylor, and L.C. Brunel, Appl. Phys. Lett. 80, 3433 (2002).
- X. G. Peralta, S. J. Allen, M. C. Wanke, N. E. Harff, J. A. Simmons, M. P. Lilly, J. L. Reno, P. J. Burke, and J. P. Eisenstein, Appl. Phys. Lett. 81, 1627 (2002).
- 24. E.A. Shaner, Mark Lee, M.C. Wanke, A.D. Grine, J. L. Reno, and S. J. Allen, Appl. Phys. Lett. 87, 193507 (2005).
- V. V. Popov, D. V. Fateev, T. Otsuji, Y. M. Meziani, D. Coquillat, and W. Knap, Appl. Phys. Lett. 99, 243504 (2011).

- D. A. Bandurin, D. Svintsov, I. Gayduchenko et al. (Collaboration), Nat. Commun. 9, 5392 (2018).
- I. V. Kukushkin, J. H. Smet, K. von Klitzing, and W. Wegscheider, Nature (London) 415, 409 (2002).
- V. M. Muravev, I. V. Andreev, S. I. Gubarev, V. N. Belyanin, and I. V. Kukushkin, Phys. Rev. B 93, 041110(R) (2016).
- A. M. Zarezin, P. A. Gusikhin, V. M. Muravev, and I. V. Kukushkin, JETP Lett. **111**(5), 282 (2020).
- A. A. Zabolotnykh and V. A. Volkov, Phys. Rev. B 102, 165306 (2020).
- 31. Das Sarma and W. Y. Lai, Phys. Rev. B 32, 1401 (1985).
- 32. I. L. Aleiner, D. X. Yue, and L. I. Glazman, Phys. Rev. B 51, 13467 (1995).
- I. V. Kukushkin, J. H. Smet, V. A. Kovalskii, S. I. Gubarev, K. von Klitzing, and W. Wegscheider, Phys. Rev. B 72, 161317 (2005).
- P. J. Burke, I. B. Spielman, J. P. Eisenstein, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, Appl. Phys. Lett. 76, 745 (2000).
- 35. D. A. Iranzo, S. Nanot, E. J. C. Dias, I. Epstein, C. Peng, D. K. Efetov, M. B. Lundeberg, R. Parret, J. Osmond, J.-Y. Hong, J. Kong, D. R. Englund, N. M. R. Peres, and F. H. L. Koppens, Science **360**, 291 (2018).
- V. M. Muravev, I. V. Andreev, N. D. Semenov, S. I. Gubarev, and I. V. Kukushkin, Phys. Rev. B 103, 125308 (2021).
- V. M. Muravev, A. M. Zarezin, P. A. Gusikhin, A. V. Shupletsov, and I. V. Kukushkin, Phys. Rev. B 100, 205405 (2019).
- A. A. Zabolotnykh and V. A. Volkov, Semiconductors 53, 1870 (2019).
- П. А. Гусихин, В. М. Муравьев, И. В. Кукушкин, Письма в ЖЭТФ 100, 732 (2015).
- V. M. Muravev, P. A. Gusikhin, I. V. Andreev, and I. V. Kukushkin, Phys. Rev. Lett. **114**, 106805 (2015).
- V. M. Muravev, P. A. Gusikhin, A. M. Zarezin, A. A. Zabolotnykh, V. A. Volkov, and I. V. Kukushkin, Phys. Rev. B **102**, 081301(R) (2020).
- S.I. Dorozhkin, A.A. Kapustin, I.A. Dmitriev, V. Umansky, K. von Klitzing, and J.H. Smet, Phys. Rev. B 96, 155306 (2017).
- I. V. Andreev, V. M. Muravev, V. N. Belyanin, and I. V. Kukushkin, Phys. Rev. B 96, 161405(R) (2017).
- G.R. Aizin and G.C. Dyer, Phys. Rev. B 86, 235316 (2012).
- V. M. Muravev, N. D. Semenov, I. V. Andreev, P. A. Gusikhin, and I. V. Kukushkin, Appl. Phys. Lett. 117, 151103 (2020).

© 2021 г. 10 июня

Расчет фрагильности высокоэнтропийных объемных аморфных сплавов на основе данных по релаксации сдвиговой упругости

А. С. Макаров⁺¹⁾, Е. В. Гончарова⁺, Ц. Ч. Цзиао^{*2)}, Н. П. Кобелев[×], В. А. Хоник⁺

+Воронежский государственный педагогический университет, 394043 Воронеж, Россия

* School of Mechanics, Civil Engineering and Architecture, Northwestern Polytechnical University, 710072 Xi'an, China

 $^{\times}$ Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Поступила в редакцию 27 апреля 2021 г. После переработки 30 апреля 2021 г. Принята к публикации 30 апреля 2021 г.

Предложен и экспериментально апробирован метод расчета фрагильности высокоэнтропийных объемных аморфных сплавов на основе данных по релаксации сдвиговой упругости в интервале переохлажденной жидкости.

DOI: 10.31857/S1234567821110070

1. Введение. В большинстве случаев аморфные сплавы получают непрерывным охлаждением расплава со скоростью, которая необходима для предотвращения зарождения и роста кристаллов. Если расплав охлаждать со скоростью, превышающей некоторую критическую R_c , то в точке плавления (температура ликвидуса T_m) кристаллизации не происходит, а расплав переходит в состояние переохлажденной жидкости. При дальнейшем переохлаждении расплава атомная подвижность уменьшается настолько, что материал конфигурационно замораживается при некоторой температуре, которая получила название температура стеклования T_g. Следует отметить, что вязкость η играет ключевую роль для объяснения поведения расплава при стекловании. Рост вязкости жидкости в процессе переохлаждения отражает падение атомной подвижности. Переход вещества из жидкого состояния в стеклообразное обычно связывают с достижением вязкости порядка $10^{12} \, \Pi a \cdot c \, [1]$.

Несмотря на десятилетия исследований, многие аспекты стеклования остаются невыясненными [2]. В частности, известно, что изменение вязкости $\eta(T)$ при температурах, близких к температуре стеклования T_g , является специфическим для каждого материала. Однако, природа возникновения значительного различия температурной вязкости $\eta(T)$ в окрестности температуры стеклования T_g у разных материалов остается невыясненной. Вследствие разнообразия кинетики $\eta(T)$ в окрестности T_g были продолжены различные классификации стеклообразую-

щих жидкостей. Одна из первых классификаций была предложена Немиловым еще в середине прошлого века [3], в рамках которой стеклообразующее расплавы классифицировались по энтропии активации вязкого течения вблизи T_g. В настоящее время широко используется классификация Анжела [1, 4, 5]. Согласно этой классификации, стеклообразующие жидкости модно разделить на две категории: "прочные" ("strong") и "хрупкие" ("fragile"). "Прочными" называют стеклообразующие жидкости, демонстрирующие аррениусовскую температурную зависимость вязкости, тогда как "хрупкими" или "фрагильными" называют стеклообразующие жидкости, у которых фиксируется значительное отклонение температурной зависимости вязкости от аррениусовского поведения. К настоящему времени для описания температурных зависимостей вязкости $\eta(T)$ "хрупких/фрагильных" стеклообразующих жидкостей предложен широкий спектр эмпирических соотношений, содержащих по несколько подгоночных параметров [6, 7].

Количественная оценка фрагильности ("хрупкости") m заключается в определении наклона логарифма вязкости $\log_{10} \eta(T_g/T)$ как функции приведенной обратной температуры T_g/T в окрестности T_g :

$$m = \left(\frac{d \log_{10} \eta}{d(T_g/T)} \right) \Big|_{T=T_g}.$$
 (1)

Величина фрагильности *m* составляет 16 для идеально "прочных" стеклообразующих жидкостей и около 200 для экстремально "хрупких" стеклообразователей [8]. К настоящему времени установлено наличие корреляций фрагильности *m* с различными характе-

¹⁾e-mail: a.s.makarov.vrn@gmail.com

²⁾J.C.Qiao.

ристиками металлических стеклообразующих сплавов, а именно: а) выявлена взаимосвязь между m и упругими модулями аморфных сплавов при комнатной температуре [9], б) установлена взаимосвязь между m, стеклообразующей способностью и пластичностью [10], в) найдена корреляция между m и изменением плотности при изотермическом отжиге, намного ниже T_g [11] и др. [12]. Применение указанных корреляций для вычисления фрагильности конкретных составов металлических стеклообразователей сильно затруднено в связи с большим разбросом значений анализируемых эмпирических величин и, как следствие, низкой достоверностью результатов вычислений.

Сравнительно недавно (начало 2010-х гг.) был предложен новый класс металлических стеклообразующих сплавов - высокоэнтропийные объемные аморфные сплавы (ВЭОАС, или HEBMGs - High entropy bulk metallic glasses) [13], обладающих значительным потенциалом прикладного использования [14]. Высокоэнтропийными (ВЭС) называют сплавы, которые содержат пять или более металлических элементов в равных или почти равных (содержание каждого элемента должно лежать интервале от 5 до 35 ат. %) атомных долях [15]. В ходе закалки расплава ВЭС можно получить полностью аморфные образцы ВЭОАС, которые в силу их структурной неупорядоченности проявляют так называемую структурную релаксацию (СР), приводящую к снижению энергии Гиббса.

В литературе отсутствует общепринятая точка зрения о природе термоактивируемых релаксационных процессов в аморфных сплавах, но все большее распространение получает идея о том, что нерелаксированный (мгновенный) модуль сдвига является важнейшим физическим параметром, характеризующим элементарные структурные перестройки в некристаллических веществах при термической обработке [16]. Элементарные акты структурных перестроек происходят на пикосекундном временном масштабе и мгновенные упругие свойства окружающей среды должны поэтому контролировать величину потенциальных барьеров для этих перестроек. Немилов в середине 1960-х гг. предположил, что свободная энергия активации F атомных перестроек и мгновенный модуль сдвига G связаны простым соотношением F = GV, где V – характеристический объем перестройки [17]. Экспериментальная проверка этого соотношения подтвердила его справедливость для оксидных, халькогенидных, органических и металлических переохлажденных жидкостей [18-20]. Далее ряд других исследователей предложили физические модели для интерпретации релаксационных явлений некристаллических веществ, в которых мгновенный модуль сдвига также играл ключевую роль (обзоры [16, 21, 22]). Другим весомым аргументом в пользу того, что величина G является одной из важнейших характеристик некристаллических веществ является успешное описание в рамках межузельной теории (MT) целого спектра релаксационных явлений в стандартных аморфных сплавах на основе одного или двух компонентов [22, 23]. Интерпретация релаксационных явлений в аморфных сплавах в рамках MT [24, 25] основана на гипотезе о том, что эти явления реализуются в наномасштабных "дефектных" областях структуры, которые по своим свойствам аналогичны свойствам межузельных атомов в их наиболее устойчивой гантельной форме, характерной для кристаллов. Главная специфика этих "дефектов" некристаллической структуры состоит в их высокой чувствительности к действию внешнего механического напряжения, что вызывает снижение локального модуля сдвига. Соответственно, изменения концентрации "дефектов" (кавычки далее опущены) отражаются в изменении макроскопической сдвиговой упругости [22, 23, 26].

2. Постановка задачи. Исходя из вышеизложенного, можно ожидать, что фрагильность ВЭОАС m также будет в значительной степени определяться кинетикой мгновенного модуля сдвига в интервале переохлажденной жидкости $G_{sal}(T)$.

В рамках МТ величина $G_{sql}(T)$ будет определяться соотношением

$$G_{sql}(T) = \mu_{sql}(T) \exp(-\alpha\beta c(T)), \qquad (2)$$

где $\mu_{sql}(T)$ – температурная зависимость модуля сдвига кристаллического аналога (ВЭС), безразмерный параметр α является характеристикой поля деформации межузельного дефекта, β – безразмерная сдвиговая восприимчивость, c(T) – температурная зависимость концентрации дефектов типа межузельных гантелей [22].

Согласно [27] скорость изменения равновесной концентрации дефектов c определяет фрагильность по Гранато γ в виде

$$\gamma = \beta T_g \frac{dc}{dT} \bigg|_{T=T_g} . \tag{3}$$

Фрагильность Гранато γ связана с фрагильностью m(уравнение (1)) простым соотношением $m = 17(\gamma + 1)[27]$. Температурная зависимость вязкости $\eta(T)$ стеклообразующего расплава связана с мгновенным модулем сдвига ВЭОАС G(T) соотношением

$$\eta(T) = \eta_0 \exp\left(\frac{G(T)V_c}{k_B T}\right),\tag{4}$$

где η_0 – теоретический температурный предел вязкости, принятый равным 10^{-4} Па · с [18], V_c – характеристический объем элементарных атомных перестроек, k_B – постоянная Больцмана [19, 27]. Для применения уравнения (4) к процессу стеклования расплава ВЭС необходимо принять $\eta = 10^{12}$ Па · с, а вместо G(T) использовать данные в интервале стеклования $G_{sql}(T)$. Тогда с помощью соотношений (2)–(4) можно получить уравнение для расчета фрагильности ВЭОАС m в виде

$$m = \left(1 - T_g \frac{dln G_{sql}}{dT}\right) \log_{10} \frac{\eta_g}{\eta_0}.$$
 (5)

Цель настоящей работы состоит в том, чтобы показать, что фрагильность ВЭОАС может быть рассчитана на основе данных релаксации сдвиговой упругости, фиксируемых в интервале переохлажденной жидкости.

3. Методика эксперимента.

Исследования были реализованы на ВЭОАС Ti_{16.7}Zr_{16.7}Hf_{16.7}Cu_{16.7}Ni_{16.7}Be_{16.7} И Zr₃₅Hf_{17,5}Ti_{5,5}Al_{12,5}Co_{7,5}Ni₁₂Cu₁₀ (ат. %, далее TiZrHfCuNiBe и ZrHfTiAlCoNiCu), именуемые которые обладают высокой стеклообразующей способностью (критический диаметр для TiZrHfCuNiBe и ZrHfTiAlCoNiCu составляет 15 и 18 мм, соответственно [28-30]). Аморфность образцов ВЭОАС контролировалась рентгеновской дифракцией.

Сдвиговая вязкость $\eta(T)$ определялась на основе прямых измерений ползучести в условиях изохронного нагрева при скорости 3 К/мин в вакууме с остаточным давлением $\approx 10^{-2} \, \Pi$ а. Точность поддержания заданной температуры составляла 0.2 К, частота оцифровки данных 0.1 Гц. Для компенсации паразитного теплового расширения элементов измерительной установки каждая зависимость $\eta(T)$ была получена в результате двух измерений ползучести: 1) на высоком напряжении $\sigma_h \approx 110 - 120 \,\mathrm{MHa};$ 2) на низком напряжении $\sigma_l \approx 10-20 \,\mathrm{MHa}$. В силу того, что пластическое течение при напряжениях менее 200 МПа является ньютоновским, то сдвиговая вязкость вычислялась путем численного дифференцирования как $\eta = \sigma_{\text{eff}}/3\dot{\varepsilon}_{\text{eff}}$, где $\sigma_{\text{eff}} = \sigma_h - \sigma_l - \Im\phi$ фективное напряжение, $\dot{\varepsilon}_{eff} = \dot{\varepsilon}_h - \dot{\varepsilon}_l - \Im \phi \phi$ ективная скорость деформации ($\dot{\varepsilon}_h, \dot{\varepsilon}_l$ – скорости деформации соответствующие напряжениям σ_h и σ_l). Также при расчете сдвиговой вязкости учитывалось изменение площади сечения образца при помощью соотношения $S(T) = (t_0 w_0 l_0)/(l_0 + \Delta l(T))$, где $t_0 \approx 30$ мкм, $w_0 \approx 0.5$ мм и $l_0 \approx 20$ мм – начальная толщина, пирина и длина образца, соответственно, $\Delta l(T)$ – продольное удлинение образца, абсолютная погрешность определения которого составляла 10^{-2} мкм.

Для измерения температурной зависимости мгновенного модуля сдвига в интервале переохлажденной жидкости $G_{sal}(T)$ использовался автоматизированный аппаратно-программный комплекс, основанный на методе электромагнитно-акустического преобразования (ЭМАП)[31]. Экспериментальный комплекс ЭМАП позволяет проводить in situ измерения резонансной частоты сдвиговых колебаний ($f \approx$ $\approx 500-600 \,\mathrm{k}\Gamma\mathrm{u}$) с относительной погрешностью 10 ррт при 310 К. С ростом температуры погрешность измерений резонансной частоты f возрастает вследствие увеличения внутреннего трения материала, достигая 100 ppm при 740 К. Измерения f были выполнены при скорости нагрева 3 К/мин на образцах размером $5 \times 5 \times 2$ мм³ при давлении около 10^{-2} Па. Температурная зависимость абсолютного значения модуля сдвига рассчитывалась по формуле G(T) = $= G_{rt} f^2(T) / f_{rt}^2$, где G_{rt} – модуль сдвига при 310 К, f(T) и f_{rt} – текущая и начальная (при T = 310К) резонансные частоты. Абсолютная погрешность определения температуры составляла 0.2 К.

4. Результаты и обсуждение. На рисунке 1 приведены экспериментальные данные логарифма сдвиговой вязкости в зависимости от приведенной обратной температуры T_q/T для ВЭОАС Ті_{16.7}Zr_{16.7}Hf_{16.7}Cu_{16.7}Ni_{16.7}Be_{16.7} (a) и Zr₃₅Hf_{17.5}Ti_{5.5}Al_{12.5}Co_{7.5}Ni₁₂Cu₁₀ (b). Температура, при которой величина сдвиговой вязкости достигает значения $10^{12} \, \Pi a \cdot c$, соответствует температуре стеклования T_q, используемой для расчетов фрагильности при помощи соотношения (1). Эти температуры составляют 664 и 689К для ВЭОАС TiZrHfCuNiBe и ZrHfTiAlCoNiCu, соответственно. Следует отметить, что величины калориметрических температур стеклования T_g для ВЭОАС TiZrHfCuNiBe и ZrHfTiAlCoNiCu, определенных из термограммам дифференциальной сканирующей калориметрии, составляют 667 и 695 К, соответственно [32]. Из рисунка 1 следует, что в результате нагрева от комнатной температуры до T_q сдвиговая вязкость снижается ≈ 4 порядка, от $10^{16}\, {\rm \overline{I}a} \cdot {\rm c}$ до $10^{12}\, {\rm \Pia} \cdot {\rm c}.$

Показанные на рис. 1 экспериментальные данные были использованы для определения фрагильности m по формуле (1). Расчеты дают величины $m = 29.3 \pm 0.7$ и $m = 28.2 \pm 0.8$ для BЭОАС TiZrHfCuNiBe и ZrHfTiAlCoNiCu соответствен-



Рис. 1. (Цветной онлайн) Экспериментальные данные логарифма сдвиговой вязкости $\log_{10} \eta(T)$ как функции приведенной обратной температуры T_g/T для ВЭОАС Ti_{16.7}Zr_{16.7}Hf_{16.7}Cu_{16.7}Ni_{16.7}Be_{16.7} (a) и Zr₃₅Hf_{17.5}Ti_{5.5}Al_{12.5}Co_{7.5}Ni₁₂Cu₁₀ (b)

но. Фрагильность ВЭОАС TiZrHfCuNiBe хорошо согласуется с результатами независимых экспериментальных исследований вязкости [33], в ходе анализа которых получена величина фрагильности 28.7. Литературные данные фрагильности ВЭОАС ZrHfTiAlCoNiCu нам неизвестны.

На рисунке 2 представлены результаты ИЗмерения температурной зависимости модуля исследуемых ВЭОАС сдвига TiZrHfCuNiBe И ZrHfTiAlCoNiCu. Видно, что модуль сдвига G демонстрирует монотонное снижение вплоть до $\approx 500 \,\mathrm{K}$, после чего наблюдается дополнительный рост модуля сдвига G, имеющий место вплоть до температур, близких к калориметрической температуре стеклования T_q (показаны стрелками на рис. 2). Этот рост обусловлен процессами интенсивной СР ВЭОАС. Вблизи и выше калориметрической температуры стеклования Т_q наблюдается значительное увеличение наклона зависимости G(T), вызванное переходом исследуемого ВЭОАС в состояние пе-



Рис. 2. (Цветной онлайн) Экспериментальные данные температурных зависимостей модуля сдвига ВЭОАС $Ti_{16.7}Zr_{16.7}Hf_{16.7}Cu_{16.7}Ni_{16.7}Be_{16.7}$ (а) и $Zr_{35}Hf_{17.5}Ti_{5.5}Al_{12.5}Co_{7.5}Ni_{12}Cu_{10}$ (b). Стрелками показаны калориметрические температуры стеклования T_g при скорости нагрева 3 K/мин [32]. Сплошными линиями показаны температурные интервалы, в которых зависимости G(T) в состоянии переохлажденной жидкости являются линейными

реохлажденной жидкости (интервал температур между температурой стеклования T_g и температурой кристаллизации T_c). Сплошными линиями показаны температурные интервалы, в которых зависимости G(T) в состоянии переохлажденной жидкости являются линейными.

Согласно МТ релаксационная кинетика изменения модуля сдвига ВЭОАС определяется процессами рекомбинации и/или генерации дефектов типа межузельных гантелей. В свою очередь, скорость изменения концентрации дефектов в состоянии переохлажденной жидкости определяет фрагильность стеклообразующего расплава. Для расчетов фрагильности *m* исследуемых ВЭОАС TiZrHfCuNiBe и ZrHfTiAlCoNiCu по формуле (5) были использованы данные релаксации сдвиговой упругости в состоянии переохлажденной жидкости, представленные на рис. 2. Величина $d \ln G_{sql}/dT$ определялась в температурном диапазоне, который на рис. 2 показан сплошными линиями. Значения теоретического температурного предела вязкости η_0 рассчитывались с помощью соотношения $\eta_0 = N_A h/V_\mu$, где N_A – число Авогадро, h – постоянная Планка и V_μ – молярный объем [18]. Для исследуемых ВЭОАС TiZrHfCuNiBe и ZrHfTiAlCoNiCu значения η_0 составили $4.3 \cdot 10^{-5}$ и $3.2 \cdot 10^{-5}$ Па · с соответственно.

В результате расчетов фрагильности *m* по формуле (5) получены величины $m = 30.0 \pm 0.5$ и $m = 29.3 \pm 0.5$ для ВЭОАС TiZrHfCuNiBe и ZrHfTiAlCoNiCu соответственно. Полученные с помощью соотношения (5) значения фрагильности хорошо согласуются с величинами *m*, определенными из наклона логарифма сдвиговой вязкости $\log_{10} \eta(T_a/T)$ как функции приведенной обратной температуры T_g/T в окрестности T_g (1). При этом следует отметить, что в литературе встречается большой разброс значений фрагильности т для одних и тех же составов металлических стеклообразователей [34, 35]. Причин различия значений фрагильности *т* несколько: а) трудности с получением надежных экспериментальных данных сдвиговой вязкости в интересующем диапазоне температур, б) использование различных способов определения фрагильности т. Предложенный способ определения фрагильности ВЭОАС на основе данных по релаксации сдвиговой упругости в интервале переохлажденной жидкости (уравнение (5)) демонстрирует хорошую согласованность с другими методами [33].

5. Заключение. В результате исследований зависимости сдвиговой вязкости от температуры получены значения фрагильности высокоэнтропийных объемных аморфных сплавов. Проведены экспериментальные исследования релаксации сдвиговой упругости высокоэнтропийных объемных аморфных сплавов в интервале переохлажденной жидкости. Высказано предположение о том, что фрагильность высокоэнтропийных объемных аморфных сплавов связана с релаксацией мгновенного модуля сдвига в интервале переохлажденной жидкости и может быть рассчитана на основе межузельной теории.

В работе показано, что фрагильность, рассчитанная с использованием данных релаксации модуля сдвига, хорошо согласуется с прямым определением фрагильности по данным сдвиговой вязкости при стекловании. Этот факт подтверждает гипотезу межузельной теории о том, что мгновенный модуль сдвига является важнейшим термодинамическим параметром, характеризующим элементарные структурные перестройки в аморфных сплавах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук (проект MK-1101.2020.2).

- L.M. Martinez and C.A. Angell, Nature 410, 663 (2001).
- 2. G. McKenna, Nat. Phys. 4, 673 (2008).
- 3. С.В. Немилов, ЖПХ 37, 293 (1964).
- 4. C. A. Angell, J. Phys. Chem. Solids 49, 863 (1988).
- 5. C.A. Angell, Science 267, 1924 (1995).
- C. A. Angell, K. L. Ngai, G. B. McKenna, P. F. McMillan, and S. W. Martin, J. Appl. Phys. 88, 3113 (2000).
- Д.С. Сандитов, М.И. Ожован, УФН 189, 113 (2019).
- R. Bohmer, K. L. Ngai, C. A. Angell, and D. J. Plazek, J. Chem. Phys. 99, 4201 (1993).
- V. N. Novikov and A. P. Sokolov, Nature 431, 961 (2004).
- E. S. Park, J. H. Na, and D. H. Kim, Appl. Phys. Lett. 91, 031907 (2007).
- R. J. Xue, L.Z. Zhao, M.X. Pan, B. Zhang, and W.H. Wang, J. Non-Cryst. Solids 425, 153 (2015).
- D.L. Sidebottom, J. Non-Cryst. Solids 524, 119641 (2015).
- M. H. Tsai and J. W. Yeh, Mater. Res. Lett. 4, 515 (2014).
- Y. Chen, Z. W. Dai, and J. Z. Jiang, J. Alloys Compd. 866, 158852 (2021).
- J. W. Yeh, S. K. Chen, S. J. Lin, J. Y. Gan, T. S. Chin, T. T. Shun, C. H. Tsau, and S. Y. Chang, Adv. Eng. Mater. 6, 299 (2004).
- 16. J.C. Dyre, Rev. Mod. Phys. 78, 953 (2006).
- 17. С.В. Немилов, ЖФХ **42**, 391 (1968).
- 18. S. V. Nemilov, J. Non-Cryst. Solids 352, 2715 (2006).
- J. C. Dyre, N. B. Olsen, and T. Christensen, Phys. Rev. B 53, 2171 (1996).
- V. A. Khonik, Yu. P. Mitrofanov, S. A. Lyakhov, A. N. Vasiliev, S. V. Khonik, and D. A. Khoviv, Phys. Rev. B 79, 132204 (2009).
- 21. W. W. Wang, Prog. Mater. Sci. 57, 487656 (2012).
- 22. V. A. Khonik and N. P. Kobelev, Metals 9, 605 (2019).
- 23. V.A. Khonik, J. Alloys Compd. 853, 157067 (2021).
- 24. A.V. Granato, Phys. Rev. Lett. 68, 974 (1992).
- 25. A.V. Granato, Eur. J. Phys. 87, 18 (2014).
- N. P. Kobelev and V. A. Khonik, J. Non-Cryst. Solids 427, 184 (2015).
- 27. A.V. Granato, J. Non-Cryst. Solids 352, 4821 (2006).

- H. Y. Ding, Y. Shao, P. Gong, J. F. Li, and K. F. Yao, Mater. Lett. **125**, 151 (2014).
- T. Wada, J. Jiang, K. Yubuta, H. Kato, and A. Takeuchi, Materialia 7, 100372 (2019).
- L. T. Zhang, Y. J. Duan, T. Wada, H. Kato, J. M. Pelletier, D. Crespo, E. Pineda, and J. C. Qiao, J. Mater. Sci. Technol. 83, 248 (2021).
- А.Н. Васильев, Ю.П. Гайдуков, УФН 141, 431 (1983).
- А.С. Макаров, Е.В. Гончарова, Г.В. Афонин, Ц.Ч. Цзиао, Н.П. Кобелев, В.А. Хоник, Письма в ЖЭТФ 111, 691 (2020).
- 33. M. Yang, X. J. Liu, Y. Wu, H. Wang, X. Z. Wang, and Z. P. Lu, Mater. Res. Lett. 6, 495 (2018).
- 34. P. Si, X. Bian, J. Zhang, H. Li, M. Sun, and Y. Zhao, J. Phys. Condens. Matter 15, 5409 (2003).
- 35. L. Hu, X. Bian, W. Wang, J. Zhang, W. H. Wang, and Y. Jia, Acta Mater. **52** 4773 (2004).
Связь Вирасоро и суперинтегрируемости. Гауссова матричная модель

А. Миронов $^{a,b,c1)}, \, B. \, Muшняков^{d,a,b\,1)}, \, A. \, Mорозов^{d,b,c\,1)}, \, P. \, Paшков^{e,f\,1)}$

^а Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

^bИнститут теоретической и экспериментальной физики им. А.И. Алиханова, 117218 Москва, Россия

^сИнститут проблем передачи информации им. А. А. Харкевича РАН, 127994 Москва, Россия

^d Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), 141701 Долгопрудный, Россия

^eDepartment of Physics, Sofia University, 1164 Sofia, Bulgaria

^fInstitute for Theoretical Physica, Vienna University of Technology, 1040 Vienna, Austria

Поступила в редакцию 27 апреля 2021 г. После переработки 28 апреля 2021 г. Принята к публикации 28 апреля 2021 г.

Связь между условиями Вирасоро и интегрируемостью КП (детерминантные формулы) в матричных моделях является старой загадкой. Мы объясняем, что ситуация улучшается, когда интегрируемость дополняется до суперинтегрируемости, т.е. явных формул для гауссовых средних от характеров. В этом случае условия Вирасоро эквивалентны простым рекурсивным формулам, решениями которых являются соответствующие комбинации характеров. Более того, мы можем разделить зависимость от размера матрицы и вывести суперинтегрируемость из условий Вирасоро. Мы описываем один из способов это сделать для гауссовой эрмитовой матричной модели. В результате мы переформулируем условия Вирасоро в виде тождеств на функции Шура, вычисленные в соответствующей точке в пространстве времен.

DOI: 10.31857/S1234567821110082

Один из основных результатов в теории матричных моделей [1–6] – это то, что они удовлетворяют набору тождеств Уорда, что позволяет однозначно определить их гауссовы статсуммы и указать их непертурбативное продолжение вне гауссовой точки. Лучше всего изученной (хоть и не самой простой) является гауссова эрмитова модель [7,8], которая описывается статсуммой:

$$\mathcal{Z}\{p\} = \int_{N \times N} dM e^{-\operatorname{tr} M^2} e^{\sum_k \frac{p_k}{k} \operatorname{tr} M^k}.$$
 (1)

Эта статсумма понимается, как (градуированный) ряд по p_k , нормированный так, чтобы $\mathcal{Z}\{0\} = 1$. Вследствие инвариантности интеграла, статсумма удовлетворяет условиям Вирасоро [9–12]

$$L_n \mathcal{Z}\{p\} = 0 \tag{2}$$

где

$$\hat{L}_n := \sum_k (k+n) p_k \frac{\partial}{\partial p_{k+n}} + \sum_{a=1}^{n-1} a(n-a) \frac{\partial^2}{\partial p_a \partial p_{n-a}} + 2Nn \frac{\partial}{\partial p_n} + N^2 \delta_{n,0} + Np_1 \delta_{n+1,0} - (n+2) \frac{\partial}{\partial p_{n+2}}.$$
(3)

Одно из ключевых свойств модели – единственность решения условий Вирасоро в виде степенного ряда.

Недавнее наблюдение [13–15] (см. так же [16]) состоит в том, что эта модель также *супер* интегрируема, т.е. коэффициенты c_R разложения

$$\mathcal{Z}\{N,p\} = \sum_{R} c_R(N) \cdot \chi_R\{p\}$$
(4)

по полиномам Шура $\chi_R\{p\}$ тоже явно вычислимы и выражаются через те же самые χ_R , вычисленные в специальной точке. А именно,

$$c_R(N) = \tilde{c}_R \cdot \frac{\chi_R\{N\}}{\chi_R\{\delta_{k,1}\}} = \tilde{c}_R \cdot \prod_{\square \in R} (N + j_\square - i_\square), \quad (5)$$

¹⁾e-mail: mironov@lpi.ru; mironov@itep.ru; mishnyakovvv@gmial.com; morozov@itep.ru; rash@phys.unisofia.bg; rash@hep.itp.tuwien.ac.at

758

где \tilde{c}_R не зависят от N и равны:

$$\tilde{c}_R = \chi_R\{\delta_{k,2}\}.\tag{6}$$

В настоящем письме мы объясняем, что такое описание может быть выведено из условий Вирасоро. Это наблюдение вносит вклад в понимание триады суперинтегрируемость-тождества Уордаинтегрируемость и обобщается на множества других моделей как матричных, так и тензорных. Вообще говоря, это может быть сделано разными способами. Пример прямолинейного и подробного вычисление в более сложной модели [17] приведен в [18,19]. Мы рассмотрим некоторые из этих способов в другом месте, в этом письме мы сосредоточимся на элегантном и не очевидном обходном пути, который наибольшим образом использует суперинтегрируемость.

Наше рассуждение устроено следующим образом:

1) Мы начинаем с разложения (4) и показываем, что при такой подстановке набор всех условий Вирасоро сводится к двум уравнениям:

Bupacopo
$$\iff \sum_{R+\square} c_{R+\square}(N) = \sum_{R-\square} (N+j_{\square}-i_{\square}) \cdot c_{R-\square}(N)$$
$$\sum_{R+\square} (j_{\square}-i_{\square}) \cdot c_{R+\square}(N) = \sum_{R-\square} (N+j_{\square}-i_{\square})^2 \cdot c_{R-\square}(N) , \qquad (7)$$

 $rge(i_{\Box}, j_{\Box})$ – это координаты квадрата, удаленного или прибавленного к диаграмме Юнга.

2) Мы показываем, что система из двух уравнений вида:

$$\sum_{R+\square} \alpha_m(\square) \cdot c_{R+\square}(N) = \sum_{R-\square} \beta_m(\square) \cdot c_{R-\square}(N), \qquad m = 1, 2$$
(8)

в случае невырожденных коэффициентов α_m , β_m всегда имеет единственное решение.

3) Можно было бы просто использовать известный ответ, но более элегантный подход – отделить зависимость от N с помощью (5) и свести систему уравнений (7) к новой системе, фиксирующей не зависящие от N коэффициенты \tilde{c}_R :

Вирасоро
$$\iff \sum_{R+\square} \tilde{c}_{R+\square} = 0$$

 $\sum_{R+\square} (j_{\square} - i_{\square}) \cdot \tilde{c}_{R+\square} = \sum_{R-\square} \tilde{c}_{R-\square}$
 $\sum_{R+\square} (j_{\square} - i_{\square})^2 \cdot \tilde{c}_{R+\square} = \sum_{R-\square} (j_{\square} - i_{\square}) \cdot \tilde{c}_{R-\square}$
(9)

Любые два из этих уравнений уже имеют единственное решение в соответствии с п. 2).

Следовательно, система переопределена, и, находя ее решение, мы лишний раз проверяем, что разложение (5) в действительности верно.

 В конце концов, мы показываем, что č_R, даваемые формулой (6), решают все 3 этих уравнения и, следовательно, решают условия Вирасоро.

Наше рассуждение основано на наборе комбинаторных тождеств, которые могут быть получены либо из фермионного представления для функций Шура [20], либо из прямого вычисления, используя коэффициенты Литтлвуда–Ричардсона. Последний подход кратко объяснен в Приложении. Замечательно простая форма уравнений (7) и (9) все же требует альтернативного объяснения, которое могло бы, не затрагивая теорию представлений, сделать связь между суперинтегрируемостью и тождествами Уорда более явной и функториальной.

1. Разобьем систему условий Вирасоро (2) на две части

$$L_{-1}\mathcal{Z}\{N,p\} = 0,$$

$$\sum (k-1)p_k \hat{L}_{k-1}\mathcal{Z}\{N,p\} = 0.$$
(10)

Рассмотрим сначала \hat{L}_{-1} -условие. Используя частные случаи формул (33), (36), мы получим

$$\hat{L}_{-1}\chi_R = \sum_{\Box} (N + j_{\Box} - i_{\Box})\chi_{R+\Box} - \sum_{\Box} \chi_{R-\Box}.$$
 (11)

Подставляя это в (4), в итоге получим

$$\sum_{R+\square} c_{R+\square}(N) = \sum_{R-\square} (N+j_{\square}-i_{\square})c_{R-\square}(N) \quad (12)$$

Теперь, используя обозначение для "классической" части W-оператора

$$\hat{w}_n := \sum p_k \hat{l}_{n+k}, \quad \hat{l}_n := \sum (k+n) p_k \frac{\partial}{\partial p_{k+n}} + \sum_{a=1}^{n-1} a(n-a) \frac{\partial^2}{\partial p_a \partial p_{n-a}}, \quad (13)$$

можно переписать второе уравнение из (10) в виде

$$\left(\hat{w}_{n}+2N\sum(k+n)p_{k}\frac{\partial}{\partial p_{n+k}}+N^{2}p_{-n}-\right.\\\left.-\sum(n+2+k)p_{k}\frac{\partial}{\partial p_{n+2+k}}\right)\mathcal{Z}\{N,p\}=0.$$
 (14)

В действительности, достаточно рассмотреть только младшее уравнение бесконечной системы (14) при n = -1, чтобы однозначно зафиксировать $\mathcal{Z}\{N, p\}$. Таким образом, используя

$$\hat{w}_{-1}\chi_R = \sum_{R+\Box} (j_\Box - i_\Box)^2 \chi_{R+\Box},$$
 (15)

мы немедленно получаем уравнение для коэффициентов разложения (4):

$$\sum_{R+\Box} (j_{\Box} - i_{\Box}) c_{R+\Box}(N) = \sum_{R-\Box} (N + j_{\Box} - i_{\Box})^2 c_{R-\Box}(N).$$
(16)

2. В качестве следующего шага давайте объясним, почему наша процедура с заменой всей борелевской части алгебры Вирасоро на L_{-1} - и w_{-1} - условия приводит к единственному решению, которое может быть построено рекурсией уравнения (7). Более того, верно более сильное утверждение: любые два уравнения вида

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

$$\sum_{R+\square} \alpha_m(\square) c_{R+\square} = \sum_{R-\square} \beta_m(\square) c_{R-\square}, \quad m = 1, 2 \quad (17)$$

могут быть решены рекурсивно единственным образом, если коэффициенты α_m , β_m невырождены.

Действительно, для любого R заданной длины l(R) эти уравнения включают только одну диаграмму, которая имеет длину не меньше или равную l(R), а именно – $[R_1, \ldots, R_{l(R)}, 1]$. Благодаря тому, что мы имеем два уравнения, мы можем исключить этот коэффициент и получить рекурсию, включающую только диаграммы фиксированной длины. Одновременно, эти уравнения определяют и сам $c_{[R_1,\ldots,R_{l(R)},1]}$, что служит начальным условием на следующем уровне.

Например, на уровне l(R) = 2, если мы хотим перейти от $c_{[r,4]}$ к $c_{[r,5]}$, уравнения будут включать следующие разбиения:



Покажем, как это работает порядок за порядком и начнем с симметрических представлений:

$$\begin{cases} c_{[r+1]} + c_{[r,1]} = (N+r-1)c_{[r-1]} \\ rc_{[r+1]} - c_{[r,1]} = (N+r-1)^2 c_{[r-1]} \end{cases} \Rightarrow \\ \Rightarrow (r+1)c_{[r+1]} = (N+r-1)(N+r)c_{[r-1]}. \quad (18) \end{cases}$$

Чтобы зафиксировать начальные условия, выберем R = [], что дает

$$c_{[1]} = 0,$$
 (19)

и нормируем $c_{[]} = 1$. Таким образом, получаем

$$c_{[r]} = \begin{cases} \prod_{i=1}^{r-1} (N+r-i) & r = 2k \\ \frac{r!!}{0} & r = 2k + 1 \end{cases}$$
(20)

Из того же уравнения получаем

$$c_{[r,1]} = \begin{cases} \frac{(N-1)\prod_{k=0}^{r-1}(N+k)}{(r+1)!!} & r = 2k-1\\ 0 & r = 2k \end{cases}$$
(21)

Для разбиений длины l(R) = 2 рекурсия начинается с [r, 2]:

$$\begin{cases} c_{[r,1]} + c_{[r-1,2]} + c_{[r-1,1,1]} = (N+r-2)c_{[r-2,1]} + (N-1)c_{[r-1]} \\ (r-1)c_{[r,1]} + 0 - 2c_{[r-1,1,1]} = (N+r-2)^2c_{[r-2,1]} + (N-1)^2c_{[r-1]} \end{cases} \Rightarrow$$
(22)

$$\Rightarrow (r+1)c_{[r,1]} + 2c_{[r-1,2]} = (N+r-2)(N+r)c_{[r-2,1]} + (N-1)(N+1)c_{[r-1]}$$

Следовательно,

$$c_{[r,2]} = \frac{N(N-1)\prod_{k=0}^{r-1}(N+k)}{2(r!!)}$$

$$c_{[r,1,1]} = \frac{r}{2((r+2)!!)} \cdot (N-2)(N-1)\prod_{k=0}^{r-1}(N+k)$$
(23)

для разбиений с четным r, тогда как при нечетном r коэффициенты равны нулю. Для [r, 3]:

$$(r+2)c_{[r+1,2]} + 3c_{[r,3]} = (N+r-2)(N+2)c_{[r-1,2]} + N^2c_{[r-1]}$$
(24)

и так далее.

3. Мы можем показать, что решение имеет вид (5)–(6), действуя рекурсивно, как в предыдущем параграфе. Вместо этого, проверим явно, что ответ дается (5)–(6).

Начнем с формулы (5). Из нее следует, что

$$c_{R+\square}(N) = \tilde{c}_{R+\square} \cdot (N+j_{\square}-i_{\square}) \cdot \frac{c_R(N)}{\tilde{c}_R}, \qquad (N+j_{\square}-i_{\square}) \cdot c_{R-\square}(N) = \tilde{c}_{R-\square} \cdot \frac{c_R(N)}{\tilde{c}_R}.$$
 (25)

Теперь подставим эти формулы в уравнения (7),

$$\sum_{\Box} (N+j_{\Box}-i_{\Box}) \cdot \tilde{c}_{R+\Box} = \sum_{\Box} \tilde{c}_{R-\Box}, \qquad \sum_{\Box} (j_{\Box}-i_{\Box}) \cdot \tilde{c}_{R+\Box} = \sum_{\Box} (N+j_{\Box}-i_{\Box}) \cdot \tilde{c}_{R-\Box}$$
(26)

и рассмотрим каждый порядок по N. Это даст *три* уравнения (9).

Как мы объяснили в предыдущем параграфе, любые два из этих трех уравнений фиксируют единственное решение, таким образом, система переопределена. В следующем параграфе мы проверим, что решением является (6), и оно удовлетворяет всем трем уравнениям одновременно.

4. Чтобы доказать, что (9) выполнены для

$$\tilde{c}_R = \chi_R\{\delta_{k,2}\},\tag{27}$$

мы используем тождества (15), (30), (33), (36),

$$p_1 \chi_R = \sum_{R+\square} \chi_{R+\square}$$
$$\hat{l}_{-1} \chi_R = \sum_{R+\square} (j_\square - i_\square) \chi_{R+\square} \qquad \frac{\partial \chi_R}{\partial p_1} = \sum_{R-\square} \chi_{R-\square}$$
(28)

$$\hat{w}_{-1}\chi_R = \sum_{R+\Box} (j_{\Box} - i_{\Box})^2 \chi_{R+\Box} \qquad \hat{l}_1\chi_R = \sum_{R-\Box} (j_{\Box} - i_{\Box})\chi_{R-\Box}$$

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

и подставим в них $p_k = \delta_{k,2}$:

$$p_{1}\chi_{R}|_{p_{k}=\delta_{k,2}} = 0$$

$$\hat{l}_{-1}\chi_{R}\Big|_{p_{k}=\delta_{k,2}} = \sum_{k} (k-1)p_{k}\frac{\partial\chi_{R}}{\partial p_{k-1}}\Big|_{p_{k}=\delta_{k,2}} = \frac{\partial\chi_{R}}{\partial p_{1}}\Big|_{p_{k}=\delta_{k,2}}$$

$$\hat{w}_{-1}\chi_{R}|_{p_{k}=\delta_{k,2}} = \sum_{k} p_{k}\hat{l}_{k-1}\chi_{R}\Big|_{p_{k}=\delta_{k,2}} = \hat{l}_{1}\chi_{R}\Big|_{p_{k}=\delta_{k,2}}$$
(29)

Подставляя сюда (28), мы получим в точности (9) для $\tilde{c}_R = \chi_R \{ \delta_{k,2} \}$.

Приложение. В рассуждениях выше мы использовали следующие свойства полиномов Шура [21]:

• Формулу Пьери,

$$p_1\chi_R\{p\} = \sum_{\Box} \chi_{R+\Box}\{p\},$$
 (30)

где сумма пробегает все возможные диаграммы Юнга, полученые добавлением клетки к *R*.

• Используя формулу Фробениуса

$$p_k = \sum_Q \psi_Q([k])\chi_Q,\tag{31}$$

где характер симметрической группы $\psi_Q([k]) = (-1)^a$ для $Q = [a, 1^{k-a}]$, и $\psi_Q([k]) = 0$ в других случаях, и

$$\chi_Q \left\{ k \frac{\partial}{\partial p_k} \right\} \cdot \chi_R \{ p_k \} = \chi_{R/Q} \{ p_k \}, \qquad (32)$$

где $\chi_{R/Q}$ косая функция Шура, мы получим

$$k\frac{\partial\chi_R}{\partial p_k} = \sum_Q \psi_Q([k])\chi_{R/Q} =$$
$$= \sum_{a,P} (-1)^a \mathcal{N}_{P,[a,1^{k-a}]}^R \chi_P.$$
(33)

Коэффициенты Литтлвуда–Ричардсона определены формулой:

$$\chi_P \cdot \chi_Q = \sum_R \mathcal{N}_{PQ}^R \chi_R. \tag{34}$$

• Из (31) и (34) следует, что

$$p_k \chi_R \{p\} = \sum \psi_Q([k]) \mathcal{N}_{QR}^P \chi_P = \sum_{a,P} (-1)^a \mathcal{N}_{R,[a,1^{k-a}]}^P \chi_P,$$
(35)

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

и, следовательно,

$$\sum k p_{k+n} \frac{\partial \chi_R}{\partial p_k} = \sum_S {}_n B^S_R \chi_S, \qquad (36)$$

где, в частности,

$${}^{\pm 1}B_{R}^{S} :=$$

$$:= \sum_{k,a,b,P} (-1)^{a+b} \mathcal{N}_{P,[a,1^{k-a}]}^{R} \mathcal{N}_{P,[b,1^{k-b\pm 1}]}^{S} =$$

$$= (j_{\Box} - i_{\Box}) \delta_{S,R\pm \Box}.$$
(37)

Мы благодарны Е. Зенкевичу за полезное обсуждение.

Исследование выполнено при частичной финансовой поддержке РФФИ и Национального научного фонда Болгарии 19-51-18006 (А. Миронов, А. Морозов), РФФИ и ТУБИТАК в рамках научного проекта 21-51-46010 (А. Миронов, А. Морозов), РФФИ и Министерством по науке и технологиям Тайваня в рамках научного проекта 21-52-52004 (А. Миронов, А. Морозов, В. Мишняков). Работа также частично поддержана грантом Фонда развития теоретической физики "Базис" (А. Миронов), грантами РФФИ 19-01-00680 (А. Миронов, В. Мишняков) и 19-02-00815 (А. Миронов). Исследование Р. Рашкова было частично поддержано FNI/BG-RU-2018/246, BNSF, гранты H-28/5 и DN-18/1.

- 1. A. Morozov, Phys.-Uspekhi (UFN) 37, 1 (1994).
- 2. A. Morozov, hep-th/9502091.
- 3. A. Morozov, hep-th/0502010.
- 4. A. Mironov, Int. J. Mod. Phys. A $\mathbf{9},\,4355$ (1994).
- 5. A. Mironov, Phys. Part. Nucl. **33**, 537 (2002).
- 6. A. Mironov, hep-th/9409190.
- 7. E. P. Wigner, Ann. Math. **53**, 36 (1951).
- 8. F. J. Dyson, J. Math. Phys. 3, 140 (1962).
- 9. F. David, Mod. Phys. Lett. A 5, 1019 (1990).
- A. Mironov and A. Morozov, Phys. Lett. B 252, 47 (1990).

- J. Ambjørn and Yu. Makeenko, Mod. Phys. Lett. A 5, 1753 (1990).
- H. Itoyama and Y. Matsuo, Phys. Lett. B 255, 20 (1991).
- A. Mironov and A. Morozov, Phys. Lett. B 771, 503 (2017); arXiv:1705.00976.
- A. Mironov and A. Morozov, Phys. Lett. B 774, 210 (2017); arXiv:1706.03667.
- A. Mironov and A. Morozov, JHEP **1808**, 163 (2018); arXiv:1807.02409.

- 16. S. Natanzon and A. Orlov, arXiv:1407.8323.
- A. Mironov and A. Morozov, Eur. Phys. J. C 81, 270 (2021); arXiv:2011.12917.
- 18. X. Liu and C. Yang, arXiv:2103.14318.
- 19. X. Liu and C. Yang, arXiv:2104.01357.
- E. Date, M. Jimbo, M. Kashiwara, and T. Miwa, J. Phys. Soc. Jpn. 50, 3806 (1981).
- W. Fulton, Young tableaux: with applications to representation theory and geometry, LMS, Cambridge University Press, London (1997)

Переключение моды собственных низкочастотных колебаний вируса табачной мозаики при изменении температуры его водной суспензии

А. Ф. Бункин⁺, М. А. Давыдов⁺¹⁾, А. Н. Федоров⁺, М. В. Архипенко^{*}, В. Б. Ошурко^{+×}, С. М. Першин⁺

+Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, 119991 Москва, Россия

*Биологический факультет, МГУ им. М.В.Ломоносова, 119991 Москва, Россия

[×] Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Московский государственный технологический университет "СТАНКИН", 127055 Москва, Россия

> Поступила в редакцию 23 апреля 2021 г. После переработки 29 апреля 2021 г. Принята к публикации 30 апреля 2021 г.

В суспензии вируса табачной мозаики (ВТМ), при концентрациях частиц суспензии ~ 1×10^{12} и ~ 2.0×10^{12} см⁻³, был зарегистрирован сигнал низкочастотного вынужденного рассеяния (НВР) с частотами ~ 31.17 и ~ 43.5 ГГц, который обусловлен наличием собственных колебательных частот исследуемых частиц ВТМ. Изменение температуры суспензии при заданной концентрации частиц вируса приводит к существенному изменению наблюдаемого спектра НВР. Обнаруженный когерентный сигнал первой стоксовой компоненты с частотным сдвигом (~ 43.5 ГГц) хорошо совпадает с проведенными нами оценками значений собственных частот колебаний цилиндрических наночастиц в жидкой среде.

DOI: 10.31857/S1234567821110094

Введение. Изучение нелинейно-оптических явлений в жидких суспензиях наночастиц представляет большой интерес, поскольку, с одной стороны, это позволяет с помощью методов нелинейной оптики эффективно изучать биологические объекты (образцы крови, суспензии вирусов), с другой стороны, в перспективе это позволит создавать эффективные источники терагерцового электромагнитного излучения, возникающего в жидкой суспензии за счет когерентного возбуждения пульсаций наночастиц под действием пондеромоторных сил лазерного электромагнитного поля. Особый интерес, несомненно, здесь представляет поиск механизма подавления вирусов электромагнитным полем при неинвазивном воздействии на организм.

В ряде работ исследовали нелинейно-оптические свойства жидких суспензий наночастиц при вынужденном рассеянии, например, в [1] исследовали процессы вынужденного рассеяния в водных суспензиях наночастиц золота и серебра, а в [2] – в водной суспензии золотых наностержней, где сообщали о наблюдении низкочастотного вынужденного рассеяния (HBP), обусловленного взаимодействием лазерного излучения с акустическими модами наночастиц. Отмечена, в частности, высокая эффективность преобразования лазерного излучения в излучение HBP. Целью данной работы являлось изучение особенностей HBP в водной суспензии вируса табачной мозаики (BTM) при варьировании концентрации и температуры вируса в жидкости.

Объекты исследования и методика измерений. В эксперименте, в качестве объекта исследования были использованы водные суспензии ВТМ с начальной концентрацией 0.5×10^{12} см⁻³ (a). Суспензия была залита в кварцевую кювету Cell. Концентрацию суспензии последовательно увеличивали до 1.0×10^{12} см⁻³ (б) и до 2.0×10^{12} см⁻³ (в) путем частичного испарения воды из суспензии при комнатной температуре. Отметим, что ВТМ представляет собой макромолекулу РНК, заключенную в белковую оболочку. Формально, в первом приближении, вирус можно представить как упругий стержень длиной ~ 300 нм и диаметром ~18.0 нм.

Кювета была размещена на установке (рис. 1), [3,6]. Излучение второй гармоники YAG: Nd³⁺ лазера, работающего в одночастотном режиме (длина

В недавних работах [3–5] нами было обнаружено аналогичное рассеяние в водной суспензии диэлектрических наночастиц (сферы полистирола, диаметр ~70 нм) и суспензиях вирусов капустной и табачной мозаики. Учитывая связь между собственными акустическими частотами вирусов и их морфологией, НВР света может быть использовано для их идентификации.

 $^{^{1)}}$ e-mail: sbs_michail@mail.ru



Рис. 1. Схема эксперимента. Веат splitter – клиновидная делительная пластинка (стекло K-8); Mirror 1, Mirror 2 – поворотные зеркала; Lens 1, Lens 2 – софокусные линзы f = 30 мм; Cell – кварцевая кювета с исследуемой суспензией (рабочая длина 20 мм); Fabri–Perot 1, Fabri–Perot 2 – интерферометры Фабри–Перо с фокусирующей оптикой (область дисперсии каждого – 2.5 см⁻¹); CMOS 1, CMOS 2 – фотокамеры; Power meter IMO-2N – измеритель энергии лазера

волны излучения $\lambda = 0.532$ нм, ширина линии излучения $\Delta \nu \sim 0.005 \, \mathrm{cm}^{-1}$, длительность импульса излучения $t \sim 10 \, {\rm hc},$ энергия в импульсе E_p – до 40 мДж, нестабильность по энергии импульса ~5-7%) фокусировали с помощью линзы Lens 1 с фокусным расстоянием ~ 30 мм в середину кюветы Cell. Возбуждаемое в кювете вынужденное рассеяние отводили для регистрации на интерферометры Фабри-Перо (Fabri–Perot 1, 2) с помощью клиновидной стеклянной пластинки Beam splitter и зеркала Mirror 2. После интерферометров оптический сигнал попадал на фотокамеры CMOS 1, 2 и затем обрабатывался на компьютере в программной среде LABVIEW. Пороговую энергию вынужденного рассеяния контролировали с помощью измерителя энергии IMO-2N. С помощью лавинного фотодиода LFD-2A и осциллографа АКТАКОМ ADS-2332 (ширина полосы ~ 300 МГц) контролировали стабильность излучения лазера. В процессе измерений энергию лазерного импульса увеличивали от ~1 мДж до ~40 мДж. Измерения проводили при температурах кюветы с суспензией вируса ~ 10 °C, ~ 25 °C и ~ 35 °C. Геометрия установки была едина для всего цикла измерений.

Результаты эксперимента. Результаты измерений при температуре кюветы ~ 25 °C представлены на рис. 2а–с и при температурах ~ 10 °C и ~ 35 °C – на рис. 3а, b. Измерения показали, что для концентрации (а) ВТМ, при увеличении энергии ла-

зера до максимальной, в спектре излучения присутствует только линия вынужденного рассеяния Мандельштама–Бриллюэна (ВРМБ) "назад" (величина стоксова сдвига $\Delta \nu \sim 0.241 \,\mathrm{cm^{-1}}$). Соответствующий спектр изображен на рис. 2а. При концентрации (б) (рис. 2b) и энергии лазера $\sim 20 \,\mathrm{мДж}$ в спектре НВР "вперед" и "назад" появилась линия с частотным сдвигом $\Delta \nu \sim 1.45 \,\mathrm{cm^{-1}}$ ($\sim 43.5 \,\Gamma\Gamma\eta$). Линия ВРМБ при этом отсутствовала. При концентрации (в) и энергии лазера $\sim 20{-}30 \,\mathrm{мДж}$ в спектре (рис. 2c) появилась линия НВР "вперед" и "назад" со сдвигом $\Delta \nu \sim 1.039 \,\mathrm{сm^{-1}}$ ($\sim 31.17 \,\Gamma\Gamma\eta$). Линия ВРМБ при этой концентрации частиц вируса также отсутствовала.

При температуре кюветы ~10 °С и концентрации вируса ~2.0 × 10¹² см⁻³ в спектре вынужденного рассеяния в суспензии ВТМ при энергии лазерного импульса ~20 мДж наблюдали линию НВР "вперед" и "назад" с частотным сдвигом $\Delta \nu ~ 1.45$ см⁻¹ (43.5 ГГц), как при концентрации частиц вируса ~ 1.0×10^{12} см⁻³ (рис. 3а). При нагревании кюветы до ~35 °С и той же концентрации вируса в спектре НВР "назад" (рис. 3b) наблюдали одновременно две стоксовых линии с частотными сдвигами $\Delta \nu ~ 1.039$ см⁻¹ (31.17 ГГц) и 1.45 см⁻¹ (43.5 ГГц).

В итоге:

1. При концентрации вируса $\sim 0.5 \times 10^{12}\,{\rm cm}^{-3}$ HBP не наблюдали. Можно допустить, что это свя-



Рис. 2. (Цветной онлайн) (a) – Спектр ВРМБ "назад" при концентрации ВТМ ~ 0.5×10^{12} см⁻³, $T_c = 25$ °C, $\Delta \nu \sim 0.241$ см⁻¹. Здесь и далее на денситограммах: "Laser line" – линия излучения лазера; "SBS line" – линия излучения ВРМБ; "SLFRS line" – линия излучения НВР. (b) – Спектр НВР "назад" при концентрации ВТМ ~ 1.0×10^{12} см⁻³, $T_c = 25$ °C, $\Delta \nu \sim 1.45$ см⁻¹ (43.5 ГГц). (c) – Спектр НВР "назад" при концентрации ВТМ 2.0×10^{12} см⁻³, $T_c = 25$ °C, $\Delta \nu \sim 1.039$ см⁻¹ (31.17 ГГц)

зано с недостаточным количеством частиц вируса в области перетяжки.

2. При увеличении концентрации вируса до $\sim 1.0 \times 10^{12}\,{\rm cm}^{-3}$ в спектре НВР наблюдали линию с частотным сдвигом $\Delta \nu \sim 1.45\,{\rm cm}^{-1}$ (43.5 ГГц).

3. При концентрации вируса $\sim 2.0 \times 10^{12}\,{\rm cm}^{-3}$ в спектре наблюдали одновременно две стоксовы линии с частотным сдвигом $\Delta\nu~\sim~1.039\,{\rm cm}^{-1}$ (31.17 ГГц) и 1.45 см $^{-1}$ (43.5 ГГц).

Таким образом, эксперимент показал, что ВТМ имеет, по крайней мере, две характерных частотных моды (31.17 и 43.5 ГГц), участвующих в образовании спектра НВР. Проявление этих резонансов в спектрах НВР зависит от концентрации частиц вируса в суспензии и температуры жидкости. Отметим, что при изменении концентрации вируса от $\sim 0.5 \times 10^{12} \, {\rm cm}^{-3}$ до $\sim 2.0 \times 10^{12} \, {\rm cm}^{-3}$ физические параметры суспензии частиц вируса существенно не ме-

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11–12 2021



Рис. 3. (Цветной онлайн) (a) – Спектр HBP "назад" при концентрации BTM ~ 2.0×10^{12} см⁻³, $T_c = 10$ °C, $\Delta \nu \sim 1.45$ см⁻¹ (43.5 ГГц). (b) – Спектр HBP "назад" при концентрации BTM ~ 2.0×10^{12} см⁻³, $T_c = 35$ °C, видны 2 компоненты $\Delta \nu \sim 1.039$ см⁻¹ (31.17 ГГц, SLFRS1), $\Delta \nu \sim 1.45$ см⁻¹ (43.5 ГГц, SLFRS2)

няются. Так, характерные расстояния между соседними частицами изменяются от 0.8 мкм до 1.3 мкм, что существенно больше размеров ВТМ, при этом существенного изменения вязкости буферного раствора также не происходит. Ранее проведенные оценки [7] показывают, что вязкость рассматриваемого раствора меняется незначительно – в диапазоне 1.001– 1.0037 сР. Из оценки собственных частот, проведенных в [7] следует, что в суспензии рассеивающих цилиндров с радиусом $R \sim 10^{-6}$ см, резонансные частоты имеют тот же порядок, что и экспериментально полученные в настоящей работе.

Заключение. Таким образом, впервые проведены эксперименты по регистрации HBP в водной суспензии BTM при различных концентрациях взвешенных частиц и различных температурах исследованной жидкости. Обнаружено существование двух характерных собственных частот цилиндрических наночастиц вируса: ~ 31.17 и ~ 43.5 ГГц, наблюдаемых в спектре HBP в зависимости от физических характеристик суспензии: концентрации частиц в суспензии и температуры жидкости. Как упомянуто выше, BTM состоит из капсида и одноцепочной PHK. Капсид ВТМ представляет собой спираль, сформированную из идентичных молекул белка. Генетическим материалом ВТМ является одноцепочечная РНК. Молекула РНК глубоко погружена в белок и повторяет шаг белковой спирали. Как видно из структуры, механические свойства вируса сильно связаны со свойствами белков, входящих в состав капсида. Нативная конформация белка устойчива лишь условно [8]. Небольшие изменения окружающих параметров среды могут привести к структурной перестройке белка, которая отразится на его биологических функциях, а также на его физических свойствах. Преобразование механических и структурных свойств белков, входящих в состав вируса, может приводить к варьированию собственных частот, либо к "перескоку" наблюдаемый частоты на другую колебательную моду, имеющую меньший акустический импеданс для новых внешних условий. Таким образом, изменение внешней температуры даже в небольшом диапазоне может существенно менять физические свойства такой сложной структуры, как вирус.

Результаты данной работы позволяют, на наш взгляд, рассматривать возможность селективного воздействия на вирус лазерным импульсом на одной или одновременно на двух обнаруженных резонансных частотах, тем самым имея возможность его модификации, а, возможно, и подавления его "жизненного цикла".

Данная работа частично поддержана грантом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации # 075-15-2020-912 для организации и развития исследовательских центров мирового уровня.

- N.V. Tcherniega, K.I. Zemskov, V.V. Savranskii, A.D. Kudryavtseva, A.Yu. Olenin, and G.V. Lisichkin, Opt. Lett. 38, 824 (2013).
- J. Shi, H. Wu, J. Liu, Sh. Li, and X. He, Sci. Rep. 5, 11964 (2015); DOI: 10.1038/srep11964.
- A.F. Bunkin, M.A. Davydov, A.N. Fedorov, V.N. Lednev, and S.M. Pershin, Laser Phys. Lett. 16, 015701 (2019); https://doi.org/10.1088/1612-202x/aaef9a.

- N.V. Tcherniega, S.M. Pershin, A.F. Bunkin, E.K. Donchenko, O.V. Karpova, A.D. Kudryavtseva, V.N. Lednev, T.V. Mironova, M.A. Shevchenko, M.A. Strokov, and K.I. Zemskov, Laser Phys. Lett. 15, 095603 (2018); http://doi.org/10.1088/1612-202X/aad28d.
- A.F. Bunkin, V.G. Mikhalevich, S.M. Pershin, V.N. Streltsov, and N.V. Tcherniega, Physics of Wave Phenomena 25(1), 254 (2017); DOI: 10.3103/S1541308X17040033.
- V.S. Gorelik, A.F. Bunkin, M.A. Davydov, A.N. Fedorov, S.M. Pershin, A.Yu. Pyatyshev, and M. Wu, Appl. Phys. Lett. **117**, 141101 (2020); doi: 10.1063/5.0024816.
- M. V. Arkhipenko, A. F. Bunkin, M. A. Davydov, O. V. Karpova, V. B. Oshurko, S. M. Pershin, V. N. Streltsov, and A. N. Fedorov, JETP Lett. 109(9), 578 (2019); DOI: 10.1134/S0021364019090066.
- 8. А. Ленинджер, *Основы биохимии*, в 3 т., Мир, М. (1985).

Фотоуправляемые возвратно-поступательные молекулярные машины типа "гость-хозяин"

В. М. Розенбаум⁺¹⁾, М. Л. Дехтярь^{*}, И. В. Шапочкина[×], Л. И. Трахтенберг^{о∇}

+Институт химии поверхности им. А.А.Чуйко НАН Украины, 03164 Киев, Украина

*Институт органической химии НАН Украины, 02660 Киев, Украина

[×]Белорусский государственный университет, физический факультет, 220050 Минск, Беларусь

^о Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, 119991 Москва, Россия

<sup>
¬</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 21 апреля 2021 г. После переработки 26 апреля 2021 г. Принята к публикации 26 апреля 2021 г.

Установлены общие принципы функционирования управляемых светом молекулярных машин (lightdriven molecular machines) с различными потенциальными энергиями броуновской частицы в силовом поле окружения в основном и возбужденном состояниях. Оптико-механическая связь временных зависимостей заселенности фотовозбужденного состояния частицы и ее координаты описывается в рамках теории, построенной для возвратно-поступательного броуновского фотомотора, состоящего из молекул красителя-гостя и кавитанда-хозяина и приводимого в действие лазерными импульсами. Рассчитаны временные зависимости спектроскопических и механических характеристик в приближении параболических потенциальных профилей основного и возбужденного состояний. Показано, что зависимость средней скорости возвратно-поступательного движения от периода следования сверхкоротких лазерных импульсов является немонотонной функцией с максимумом, определяющим оптимальный режим работы молекулярной машины. В случае, когда втягивание молекулы красителя в полость кавитанда затрудняет образование тушащего флуоресценцию скрученного состояния и константа скорости дезактивации молекулы-гостя убывает с ее координатой, время жизни флуоресценции полностью втянутого в кавитанд красителя существенно увеличивается, в согласии с имеющимися экспериментальными данными. Представленные в работе аналитические соотношения между механическими и оптическими характеристиками рассматриваемых возвратно-поступательных молекулярных машин открывают широкие возможности для управления их движением, а также наблюдаемой для них флуоресценцией.

DOI: 10.31857/S1234567821110100

Принципы действия наномашин, преобразующих различные виды неравновесных флуктуаций в направленное движение, обычно описываются соответствующими моделями броуновских рэтчетов. В таких моделях подразумевается, что поступление энергии в систему характеризуется временной зависимостью потенциальной энергии U(x,t) броуновской частицы, взаимодействующей с окружением (x = x(t) – координата частицы, t – время). Эта временная зависимость может возникать вследствие различных процессов: конформационных переходов под действием протекающих в частицах химических реакций (как в белковых молекулярных моторах), переключения электрических полей между электродами, изменения температуры системы, интерференции лазерных пучков или лазерных импульсов, вызывающих электронные переходы в частицах [1–4]. Важную роль в функционировании броуновских рэтчетов играют также симметрийные закономерности [5, 6].

Если направленное (поступательное, вращательное или возвратно-поступательное) движение наночастиц инициируется их фотовозбуждением, то говорят о броуновских фотомоторах [7–10]. Такие наноустройства характеризуются различными распределениями плотности заряда частицы (молекулы) в основном S₀ и возбужденном S₁ электронных состояниях и, следовательно, различными соответствующими потенциальными энергиями $U_0(x)$ и $U_1(x)$. Анализ координатных зависимостей потенциальных профилей $U_0(x)$ и $U_1(x)$ позволяет наглядно объяснить принципы работы поступа-

¹⁾e-mail: vik-roz@mail.ru

тельных [10] и вращательных [11] фотомоторов. Если плотность вероятности нахождения частицы с координатой в состоянии S_i (j = 0, 1) в момент времени t обозначить через $\rho_i(x,t)$, то средняя потенциальная энергия определяется соотношением $U(x,t) = \sum_{j} \rho_{j}(x,t)U_{j}(x)$ (приближенно можно считать, что $U(x,t) = \sum_{j} n_{j}(t)U_{j}(x)$ [10], где $n_{j}(t) = \int \rho_{j}(x,t)dx$ – заселенность состояния S_i). Часто также рассматривается пространственно-временная зависимость потенциальной энергии аддитивно-мультипликативного вида $U(x,t) = u(x) + \sigma(t)w(x)$ [12,13], в котором u(x) и w(x) – произвольные функции координаты, а функция $\sigma(t) = \pm 1$ описывает детерминистический или стохастический дихотомный процесс. В данной статье мы представляем общую схему описания фотомоторов, управляемых периодически следующими мгновенными лазерными импульсами, причем такой подход не требует введения средней потенциальной энергии.

Управляющим уравнением для функций распределения $\rho_j(x,t)$, описывающих диффузионную динамику и перераспределение частиц между состояниями S_j, является уравнение Смолуховского с источниками и стоками [14]:

$$\frac{\partial \rho_j(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial J_j(x,t)}{\partial x} + (-1)^j \Gamma(x) \rho_1(x,t), \quad j = 0, 1,$$
(1)

где

$$J_{j}(x,t) = -D_{j}e^{-\beta U_{j}(x)}\frac{\partial}{\partial x}e^{\beta U_{j}(x)}\rho_{j}(x,t) =$$
$$= -D_{j}\frac{\partial}{\partial x}\rho_{j}(x,t) - \zeta_{j}^{-1}U_{j}'(x)\rho_{j}(x,t)$$
(2)

– поток частиц $(U'_j(x) = dU_j(x)/dx, \zeta_j$ – коэффициент трения в состоянии $S_j, D_j = k_B T/\zeta_j$ – соответствующий коэффициент диффузии, $\beta = (k_B T)^{-1}, k_B$ – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура), а $\Gamma(x)$ – полная константа скорости перехода из возбужденного электронного состояния в основное (учитывающая как излучательные, так и безызлучательные процессы), которая в общем случае может зависеть от координаты частицы (рис. 1).

Выведем уравнения для первых моментов распределений, а именно, заселенностей $n_j(t) = \int \rho_j(x,t)dx$ и средних значений координаты $\langle x(t) \rangle_j = \int x \rho_j(x,t)dx$ в состояниях S_j (область интегрирования зависит от типа рассматриваемого движения). Уравнение для $n_j(t)$ получается путем почленного интегрирования уравнения (1) по периоду поступательного или вращательного движения, или же по всей области изменения координаты,



Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема функционирования управляемой светом возвратно-поступательной молекулярной машины типа "гость-хозяин", состоящей из молекул красителя и кавитанда. Под действием сверхкороткого лазерного импульса молекула красителя переходит во франк-кондоновское состояние, а затем релаксирует в возбужденное состояние с потенциальным профилем, обеспечивающим полное втягивание молекулы красителя в полость кавитанда. После дезактивации возбужденного состояния, вызванной излучательными и безызлучательными переходами в основное состояние, молекула красителя возвращается в начальное (частично втянутое в кавитанд) положение.

описывающей возвратно-поступательное движение. Уравнение для $\langle x(t) \rangle_j$ получается аналогично, но с почленным домножением (1) на x и последующим использованием интегрирования по частям. В случае поступательного или вращательного движения интегралы от производных периодических функций по периоду равны нулю, тогда как для возвратнопоступательного движения они обращаются в нуль вследствие обращения в нуль функций распределения и потоков на границах рассматриваемой области $(U_j(\pm\infty) \rightarrow 0, U_j(x)$ – удерживающие потенциалы). В результате получаем следующие уравнения, справедливые для всех вышеуказанных типов движения броуновского фотомотора:

$$\frac{dn_j(t)}{dt} = (-1)^j \langle \Gamma(x) \rangle_1, \quad \sum_j n_j(t) = 1,$$

$$\frac{d\langle x(t) \rangle_j}{dt} = -\zeta_j \langle U'_j(x) \rangle_j + (-1)^j \langle x \Gamma(x) \rangle_1.$$
(3)

Для рассматриваемого в данной статье возвратно-поступательного движения потенциальные энергии $U_j(x)$ соответствуют удерживающим потенциалам, форма которых определяется рассматриваемым объектом. Например, для полимеров, состоящих из бистабильных фоточувствительных азобензольных звеньев, можно чередовать удлиненное и сжатое состояния, переключая лазерными импульсами транс- и цис-конфигурации азогрупп [15]. При этом потенциальный профиль $U_0(x)$ – двухъямный (бистабильный), а $U_1(x)$ – параболический. Сдвинутыми относительно друг друга параболическими профилями $U_0(x)$ и $U_1(x)$ описывается возвратно-поступательное движение двух связанных белковых частиц, которое вследствие специфики белкового трения (зависимости коэффициента трения от скорости скольжения) может быть преобразовано в поступательное движение этих частиц вдоль поверхности [16–18].

Если рассматривать потенциальные профили в параболическом приближении $U_i(x) = k_i (x - a_i)^2 / 2$, а константу скорости дезактивации считать независящей от координаты, т.е. $\Gamma(x) = \gamma$, то средние значения величин в уравнениях (3) можно выразить через первые моменты распределений $\rho_i(x,t)$: $\langle U'_i(x) \rangle_i =$ $=k_j\langle x(t)\rangle_j - k_j a_j n_j(t), \langle \Gamma(x)\rangle_1 = \gamma n_1(t), \langle x \Gamma(x)\rangle_1 =$ $= \gamma \langle x(t) \rangle_1$. С учетом этого система уравнений (3) дает замкнутое описание возвратно-поступательного движения. Для простоты будем считать, что кривизна потенциальных рельефов и коэффициенты трения одинаковы в основном и возбужденном состояниях $(k_i = k, \zeta_i = \zeta)$, а минимумы парабол в этих состояниях находятся в начале координат x = 0 и в точке x = a $(a_0 = 0, a_1 = a)$, так что возвратнопоступательное движение фотомотора совершается между этими точками (рис. 1).

В современной нанофотонике используются фемтосекундные лазерные импульсы, позволяющие достигать высоких интенсивностей электромагнитного излучения без необратимого разрушения материала и таким образом осуществлять уникальные режимы взаимодействия света с наноструктурами и молекулярными агрегатами [19]. Поскольку движение нанообъектов характеризуется временами порядка пикои наносекунд, то импульсы с длительностями менее 40 фс [20] можно считать практически мгновенными. В момент окончания сверхкороткого лазерного импульса успевает измениться (за 10⁻¹⁵ с) только распределение электронной плотности молекулы, в то время как положения ядер и, соответственно, положение молекулы в целом остаются неизменными, т.е. молекула переходит во франк-кондоновское возбужденное состояние [21] согласно адиабатическому приближению Борна-Оппенгеймера. Поэтому начальное положение молекулы (со средней координатой x) после действия импульса остается неизменным, тогда как минимум потенциальной энергии сдвигается в точку x = a.

Возвратно-поступательное движение молекулы можно осуществить путем генерации периодических сверхкоротких лазерных импульсов с периодом τ . В таком процессе текущее время t удобно характеризовать номером лазерного импульса l = 1, 2, ... и промежутком времени \tilde{t} после его окончания, так что $t = (l - 1)\tau + \tilde{t}$, где $0 < \tilde{t} < \tau$. Тогда при сделанных выше допущениях и введении новых обозначений $x_l(\tilde{t}) = \sum_j \langle x(t) \rangle_j$, $n_l(\tilde{t}) = n_1(t)$ из уравнений (3) получается следующая система уравнений для функций $x_l(\tilde{t})$ и $n_l(\tilde{t})$:

$$\begin{cases} \dot{x}_l(\tilde{t}) + \kappa x_l(\tilde{t}) = \kappa a n_l(\tilde{t}), \\ \dot{n}_l(\tilde{t}) + \gamma n_l(\tilde{t}) = 0, \end{cases}$$
(4)

(где $\kappa = k/\zeta$).

Далее зададим начальные условия для системы (4), учитывающие, что молекулярное распределение электронной плотности, как отмечалось выше, подстраивается под лазерный импульс практически мгновенно, в то время как сама молекула не меняет свое положение (значения координаты до и сразу после лазерного импульса совпадают), а при небольших τ не успевает возвращаться в исходное положение:

$$n_l(0) = 1, \quad x_1(0) = 0, \quad x_l(0) = x_{l-1}(\tau) \quad (l = 2, 3, \ldots).$$
(5)

Тогда $n_l(\tilde{t}) = \exp(-\gamma \tilde{t})$, а решение системы уравнений (4) для $x_l(\tilde{t})$ принимает вид:

$$x_l(\tilde{t}) = x_l(0)e^{-\kappa\tilde{t}} + \frac{\kappa a}{\kappa - \gamma}(e^{-\gamma\tilde{t}} - e^{-\kappa\tilde{t}}), \ 0 \le \tilde{t} \le \tau,$$
(6)

$$x_{l}(0) = \frac{\kappa a}{\kappa - \gamma} (e^{-\gamma \tau} - e^{-\kappa \tau}) \frac{1 - e^{-\kappa \tau (l-1)}}{1 - e^{-\kappa \tau}}, \quad l = 1, 2, \dots$$

На вставке к рис. 2 изображена зависимость $x_l(\tilde{t})$ при $\gamma = 50 \Gamma \Gamma$ ц и $\kappa = 25$, $250 \Gamma \Gamma$ ц для первых пяти импульсов с интервалом следования $\tau = 30$ пс. Эта зависимость имеет переходную область с шириной порядка $\tau + \kappa^{-1}$, в которой функция x(t) изменяется от начального значения x(0) = 0 до области установившихся значений $(l \gg 1)$, где она становится периодической, $x(t + \tau) = x(t)$. При этом минимальные значения x_{\min} , принимаемые функцией x(t), определяются соотношением (6) для $x_l(0)$ с $e^{-\kappa \tau (l-1)} \ll 1$, а ее максимальные значения x_{\max} определяются выражениями

$$x_{\max}(\tilde{t}_{\max}) = ae^{-\gamma \tilde{t}_{\max}} = a\left(\frac{\kappa}{\gamma}\frac{1-e^{-\gamma\tau}}{1-e^{-\kappa\tau}}\right)^{\gamma/(\gamma-\kappa)}, \quad (7)$$

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021



Рис. 2. (Цветной онлайн) Динамика x(t) (на вставке) и средняя скорость возвратно-поступательного движения как функции безразмерного периода $\xi = \gamma \tau$ следования лазерных импульсов, рассчитанные по формулам (6) и (8). Кривые в основной области графика соответствуют снизу вверх $\lambda = \kappa/\gamma = 0.2, 0.5, 1, 2, 5,$ 20, 100. На вставке $\tau = 30$ пс, $\gamma = 50$ ГГц и $\lambda = 0.5, 5$ (кривые снизу вверх)

$$\tilde{t}_{\max} = \frac{1}{\kappa - \gamma} \ln \left(\frac{\kappa}{\gamma} \frac{1 - e^{-\gamma \tau}}{1 - e^{-\kappa \tau}} \right)$$

откуда следует аналитическое представление для средней скорости возвратно-поступательного движения:

$$v \equiv \frac{\omega_{\max} - \omega_{\min}}{\tau} =$$

$$= \frac{\gamma a}{\xi} \left[\left(\lambda \frac{1 - e^{-\xi}}{1 - e^{-\lambda\xi}} \right)^{1/(1-\lambda)} + \frac{\lambda}{1 - \lambda} \frac{e^{-\xi} - e^{-\lambda\xi}}{1 - e^{-\lambda\xi}} \right] \xrightarrow[\lambda \to 1]{} \xrightarrow[\lambda \to 1]{} \frac{\gamma a}{\xi} [e^{-\eta(\xi)} + \eta(\xi) - 1], \quad (8)$$

=

$$\eta(\xi) \equiv 1 - \frac{\xi}{e^{\xi} - 1}, \quad \lambda \equiv \frac{\kappa}{\gamma}, \quad \xi \equiv \gamma \tau.$$

Зависимость средней скорости от безразмерного периода следования импульсов ξ оказывается немонотонной функцией с максимумом, определяющим оптимальный режим работы возвратнопоступательного броуновского мотора. Заметим, что система уравнений (4) и ее решения (6)–(8) не зависят от температуры. Это полностью согласуется с выводами нашей работы [22], в которой было показано, что если константы скоростей переходов не зависят от координаты, а потенциальные энергии $U_j(x)$ на больших расстояниях ведут себя как x^{α} , то тепловой шум играет конструктивную ($\alpha > 2$) или деструктивную ($\alpha < 2$) роль, а при $\alpha = 2$, т.е. при параболических потенциалах, как в нашем случае, играет нейтральную роль.

Перейдем к рассмотрению экспериментально важного случая, когда константа скорости дезактивации $\Gamma(x)$ зависит от координаты молекулы. Влияние зависимости $\Gamma(x)$ на свойства фотомотора проанализирована на примере супрамолекулярной системы типа "гость-хозяин", которая состоит из молекул органического стирилового красителя и кавитанда кукурбитурила и обладает функциями молекулярной машины [23, 24]. Установлено, что в основном электронном состоянии данного комплекса молекула красителя одним из своих концов частично входит в полость молекулы кавитанда. Такое начальное положение центра масс молекулы красителя относительно кавитанда характеризуется значением координаты x = 0 (на длинной оси молекулыхозяина), в соответствии с положением минимума параболы $U_0(x)$ в точке $a_0 = 0$. В возбужденном состоянии минимум потенциальной энергии $U_1(x)$ сдвинут по оси x в точку, соответствующую центру масс молекулы красителя, полностью втянутой в кавитанд, $a_1 = a$ (рис. 1).

Мгновенный лазерный импульс вызывает ряд процессов разного временного масштаба. Во-первых, вследствие быстрой колебательной релаксации $(10^{-12} - 10^{-11} c)$ и достаточно быстрой (10⁻¹¹-10⁻¹⁰ с) внутренней конверсии происходит распад франк-кондоновского состояния во флуоресцентное возбужденное состояние (уровень S₁ на рис. 1). Эти быстрые процессы не входят в наше описание, которое включает только последующую деградацию флуоресцентного состояния (соответственно, временная зависимость заселенности этого состояния описывается чисто убывающей функцией, а экспериментально наблюдаемый начальный участок возрастания этой величины в течение нескольких пикосекунд после импульса не рассматривается). Распад состояния S₁ включает медленный (10⁻⁹-10⁻⁷ с) излучательный переход в основное состояние с константой скорости γ и безызлучательные процессы, среди которых преобладает быстрая (10⁻¹³-10⁻¹¹ с) релаксация путем ортогонального скручивания в состояние TICT (twisted intermolecular charge transfer state – скрученное возбужденное состояние с переносом заряда [25]) с константой скорости $\tilde{\gamma}$.

Состояние TICT часто дезактивируется посредством мгновенного безызлучательного перехода молекулы в основное состояние через коническое пересечение состояний S_1-S_0 (так называемую фотохимическую воронку [25]). По мере втягивания молекулы красителя под действием кулоновских сил [24] в полость кавитанда она вынуждена принимать те

конформации, которые оптимально заполняют пространство полости, так что ортогонально скрученное состояние TICT, ведущее к безызлучательной дезактивации, становится все более затрудненным. Поэтому можно предположить, что квантовый выход флуоресценции (а значит, и ее продолжительность) для молекулы красителя, полностью втянутой в полость кавитанда, будет больше, чем в случае частичного втягивания (только одного конца молекулы) [26]. С учетом этого константу скорости распада возбужденного состояния молекулы красителя $\Gamma(x)$ можно задать для простоты линейно убывающей функцией координаты в интервале 0 < x < a:

$$\Gamma(x) = \begin{cases} \gamma + \tilde{\gamma}, & x < 0\\ \gamma + \tilde{\gamma}(1 - x/a), & 0 < x < a, \\ \gamma, & x > a. \end{cases}$$
(9)

Измерение многоэкспоненциального затухания флуоресценции действительно подтверждает, что полное втягивание молекулы стирилового красителя вглубь полости кукурбитурила значительно увеличивает самое продолжительное время флуоресценции: примерно с 50 до 100–200 пс [24]. Эти времена по порядку величины определяют значения введенных в соотношениях (9) параметров $\tilde{\gamma}^{-1}$ и γ^{-1} , соответственно.

Если период следования лазерных импульсов τ удовлетворяет условию $\tau \gg \gamma^{-1} > \tilde{\gamma}^{-1}$, то молекула красителя успевает между импульсами возвратиться в исходное положение, и все последующие периоды повторяют первый. Введем нормированные на единицу равновесные функции распределения $\rho_j^{(eq)}(x)$, соответствующие потенциальным профилям $U_j(x)$ (j = 0, 1):

$$\rho_j^{(\text{eq})}(x) = \exp(-\beta U_j(x)) \bigg/ \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-\beta U_j(x)).$$
(10)

Тогда можно выбрать следующие начальные условия для уравнений (1), (2) (соответствующие моменту времени сразу после окончания очередного сверхкороткого лазерного импульса): $\rho_0(x,\tau) = \rho_1(x,0) = \rho_0^{(eq)}(x), \rho_1(x,\tau) = \rho_0(x,0) = 0$. Эти уравнения с заданными начальными условиями были решены численно для получения временных зависимостей заселенности возбужденного состояния и средней координаты молекулы красителя (рис. 3).

Зависимости $n_1(t)$ и x(t) включают два характерных временных интервала. На первом из них, с продолжительностью порядка κ^{-1} , функция $n_1(t)$ быстро спадает (с коэффициентом затухания порядка $\gamma + \tilde{\gamma}$), а функция x(t) быстро возрастает до максимального значения. Обе функции почти не зависят от



Рис. 3. (Цветной онлайн) Временные зависимости заселенности флуоресцентного уровня (а) и координаты (b) молекулы красителя для одного цикла возбуждения при $\tilde{\gamma} = 100 \,\Gamma\Gamma \eta$, $\gamma = 1 \,\Gamma\Gamma \eta$. Кривые 1–3 соответствуют значениям $D/a^2 = 1$, 10, 100 $\Gamma\Gamma \eta$ с $\kappa = 600 \,\Gamma\Gamma \eta$, а кривые 4–6 – тем же значениям D/a^2 с $\kappa = 300 \,\Gamma\Gamma \eta$

величины коэффициента диффузии, что свидетельствует о движении за счет быстрого спуска частицы к минимуму потенциальной ямы в точке x = a(недиффузионная стадия движения). На втором интервале временных зависимостей функция распределения становится пропорциональной $\rho_1^{(eq)}(x)$ с коэффициентом пропорциональности $n_1(t)$: $\rho_1(x,t) \approx n_1(t)\rho_1^{(eq)}(x)$ (установление квазиравновесия). Подставляя это распределение в выражение для среднего значения $\langle \Gamma(x) \rangle_1$, определяющего скорость ухода системы из возбужденного состояния (см. первое уравнение в (3)), получаем $\langle \Gamma(x) \rangle_1 \approx \overline{\Gamma} n_1(t)$, где величина $\overline{\Gamma}$, в дальнейшем называемая коэффициентом затухания, – константа скорости распада возбужден-

машины.

ного состояния на втором временном интервале, на котором функции $n_1(t)$ и x(t) медленно спадают до нуля. Если известен потенциальный профиль возбужденного состояния $U_1(x)$ (а значит, и функция $\rho_1^{(eq)}(x)$, заданная соотношением (10)) и вид функции $\Gamma(x)$, то коэффициент затухания $\overline{\Gamma}$ определится соотношением:

$$\bar{\Gamma} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Gamma(x) \rho_1^{(\text{eq})}(x).$$
(11)

На втором временном интервале функции $n_1(t)$ и x(t) существенно зависят от коэффициента диффузии (диффузионная стадия движения). Для параболической потенциальной энергии $U_1(x)$ и функции $\Gamma(x)$, задаваемой соотношением (9), вычисление интеграла в (11) приводит к следующему выражению для коэффициента затухания $\overline{\Gamma}$:

$$\bar{\Gamma} = \gamma + \frac{1}{2} \tilde{\gamma} \left[\operatorname{erfc}(z) + (z\sqrt{\pi})^{-1}(1 - e^{-z^2}) \right] \underset{z \gg 1}{\approx}$$
$$\underset{z \gg 1}{\approx} \gamma + \frac{1}{2z\sqrt{\pi}} \tilde{\gamma} \left(1 - \frac{1}{2z^2} e^{-z^2} \right), \qquad (12)$$
$$z = \sqrt{\kappa a^2/(2D)} = \sqrt{ka^2/2k_BT}$$

(erfc(z) – дополнительная функция опибок). Чем выше температура (больше значения параметра D/a^2), тем больше значения $\overline{\Gamma}$ и меньше длительность флуоресценции. Длительности спадания функций на втором участке, рассчитанные по формуле (12), совпадают с полученными из численных зависимостей (рис. 3) и хорошо согласуются со спектроскопическими данными [24]. Подчеркнем, что зависимость обсуждаемых величин от температуры появляется исключительно из-за координатной зависимости константы скорости распада $\Gamma(x)$. Как отмечалось выше, если $\Gamma(x) = \text{const}$, то характеристики возвратнопоступательного движения в параболических потенциалах не зависят от температуры в полном согласии с нашими прежними результатами [22].

Таким образом, в настоящей работе механизм функционирования управляемых светом возвратнопоступательных молекулярных машин (*light-driven molecular machines*) схематически рассмотрен на примере броуновского фотомотора. Он описан с помощью потенциальных энергий частицы в основном и возбужденном состояниях, а также координатной зависимости константы скорости распада возбужденного состояния. Эта модель имеет общий характер, единообразно описывая действие трансляционных, вращательных и возвратно-поступательных молекулярных машин.

При анализе возвратно-поступательных броуновских моторов их потенциальные энергии играют роль удерживающих потенциалов. Использование параболического приближения для этих потенциалов позволило получить самосогласованное описание в терминах не зависящей от температуры средней координаты частицы. Если период следования сверхкоротких лазерных импульсов меньше времени релаксации рассматриваемой системы, то частица не успевает возвращаться в начальное состояние. В таком случае возвратно-поступательное движение характеризуется переходной областью, в которой средняя координата частицы x(t) претерпевает колебания между начальным значением и областью установившихся значений, где функция x(t) становится периодической. Рассматриваемые процессы могут быть описаны аналитически, если константа скорости распада возбужденного состояния частицы не зависит от ее координаты. Средняя скорость возвратно-поступательного движения в установившемся режиме оказывается немонотонной функцией периода следования лазерных импульсов. Положение максимума этой функции задает оптимальный режим работы рассматриваемой молекулярной

Описание возвратно-поступательного движения конкретизировано для молекулярной машины типа "гость-хозяин", в которой молекула красителя полностью втягивается в полость кавитанда при возбуждении лазерным импульсом и возвращается в начальное частично втянутое положение после дезактивации возбужденного состояния. Как обнаружено ранее [26], флуоресценция фотовозбужденной молекулы красителя тем продолжительнее, чем больше она втянута в кавитанд. Наблюдаемый эффект объясняется тем, что при полном втягивании молекулы красителя в кавитанд она не может релаксировать из возбужденного состояния в состояние TICT, гасящее флуоресценцию. Данный эффект количественно описывается константой скорости распада возбужденного состояния, которая является убывающей функцией координаты молекулы красителя.

Построенная теория учитывает оптикомеханическую временных связь зависимостей заселенности возбужденного состояния частицы и ее координаты и тем самым объясняет известный экспериментальный факт – существенное увеличение времени жизни флуоресценции молекулы, полностью втянутой в кавитанд [24]. Получены общие соотношения, позволяющие выражать коэффициент затухания (обратную длительность флуоресценции) через потенциальный профиль возбужденного

состояния, координатную зависимость константы скорости дезактивации системы и параметры модели.

Авторы благодарны Н. Х. Петрову за плодотворное обсуждение работы.

Работа выполнена в рамках Государственного задания 45.22 (регистрационный номер АААА-А18-118012390045-2) и поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проекты 20-57-00007_Bel_аи 21-57-52006_MNT_а) и Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований (проект Ф20Р-032).

- P. Hänggi and F. Marchesoni, Rev. Mod. Phys. 81, 387 (2009).
- O. Kedem, B. Lau, M. A. Ratner, and E. A. Weiss, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **114**, 8698 (2017).
- Ю. В. Гуляев, А. С. Бугаев, В. М. Розенбаум, Л. И. Трахтенберг, УФН 190, 337 (2020) [Phys.-Uspekhi 63, 311 (2020)].
- J. A. Fornés, Principles of Brownian and Molecular Motors, Springer, Cham (2021).
- 5. P. Reimann, Phys. Rev. Lett. 86, 4992 (2001).
- В. М. Розенбаум, И. В. Шапочкина, Ё. Тераниши, Л. И. Трахтенберг, Письма в ЖЭТФ 107, 525 (2018) [JETP Lett. 107, 506 (2018)].
- M. L. Dekhtyar, A. A. Ishchenko, and V. M. Rozenbaum, J. Phys. Chem. B **110**, 20111 (2006).
- S. Saha and J.F. Stoddart, Chem. Soc. Rev. 36, 77 (2007).
- Y.B. Zheng, H. Qingzhen, Y.-W. Yang, B. Kiraly, I.-K. Chiang, and T.J. Huang, J. Nanophotonics 4, 042501 (2010).
- V. M. Rozenbaum, M. L. Dekhtyar, S. H. Lin, and L. I. Trakhtenberg, J. Chem. Phys. **145**, 064110 (2016).
- 11. R. Augulis, M. Klok, B.L. Feringa, and

P.H.M. van Loosdrecht, Phys. Status Solidi C 6, 181 (2009).

- В. М. Розенбаум, Письма в ЖЭТФ 88, 391 (2008) [JETP Lett. 88, 342 (2008)].
- В. М. Розенбаум, И. В. Шапочкина, Л. И. Трахтенберг, УФН 189, 529 (2019) [Phys.-Uspekhi 62, 496 (2019)].
- 14. P. Reimann, Phys. Rep. 361, 57 (2002).
- T. Hugel, N.B. Holland, A. Cattani, L. Moroder, M. Seitz, and H.E. Gaub, Science **296**, 1103 (2002).
- A. Mogilner, M. Mangel, and R. J. Baskin, Phys. Lett. A 237, 297 (1998).
- H. C. Fogedby, R. Metzler, and A. Svane, Phys. Rev. E 70, 021905 (2004).
- Yu.A. Makhnovskii, V.M. Rozenbaum, D.-Y. Yang, S.H. Lin, and T.Y. Tsong, Eur. Phys. J. B 52, 501 (2006).
- А. А. Иванов, М. В. Алфимов, А. М. Желтиков, УФН
 174, 743 (2004) [Phys.-Uspekhi 47, 687 (2004)].
- V. V. Yakovlev, A. A. Ivanov, and V. Shcheslavskiy, Appl. Phys. B **74**, 145 (2002).
- Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика. Нерелятивистская теория, Наука, М. (1974).
- Yu. A. Makhnovskii, V. M. Rozenbaum, S.-Y. Sheu, D.-Y. Yang, L. I. Trakhtenberg, and S. H. Lin, J. Chem. Phys. 140, 214108 (2014).
- A. I. Vedernikov, N. A. Lobova, L. G. Kuz'mina, J. A. K. Howard, Yu. A. Strelenko, M. V. Alfimov, and S. P. Gromov, J. Mol. Struct. 989, 114 (2011).
- N.Kh. Petrov, D.A. Ivanov, Yu.A. Shandarov, I.V. Kryukov, A.A. Ivanov, M.V. Alfimov, N.A. Lobova, and S.P. Gromov, Chem. Phys. Lett. 647, 157 (2016).
- Z. R. Grabowski, K. Rotkiewicz, and W. Rettig, Chem. Rev. 103, 3899 (2003).
- 26. Z. Li, S. Sun, F. Liu, Y. Pang, J. Fan, F. Song, and X. Peng, Dyes Pigm. 93, 1401 (2012).

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

ПИСЬМА

B

ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

том 113

Выпуск 12 25 июня 2021

Журнал издается под руководством Отделения физических наук РАН

Главный редактор В. М. Пудалов

Заместители главного редактора Г. Е. Воловик, В. П. Пастухов

Зав. редакцией И.В.Подыниглазова

Адрес редакции	119334 Москва, ул. Косыгина 2
тел./факс	(499)-137-75-89
e-mail	letters@kapitza.ras.ru
Web-страница	http://www.jetpletters.ru

Интернет-версия английского издания http://www.springerlink.com/content/1090-6487

[©] Российская академия наук, 2021

[©] Редколлегия журнала "Письма в ЖЭТФ" (составитель), 2021

Распад $au o K^- \pi^0 u_{ au}$ в модели Намбу–Иона-Лазинио с учетом взаимодействия мезонов в конечном состоянии

М. К. Волков¹⁾, А. А. Пивоваров¹⁾

Лаборатория теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова, Объединенный институт ядерных исследований,

141980 Дубна, Россия

Поступила в редакцию 10 апреля 2021 г. После переработки 30 апреля 2021 г. Принята к публикации 9 мая 2021 г.

Распад $\tau \to K^- \pi^0 \nu_{\tau}$ описан в модели Намбу–Иона-Лазинио с учетом контактного вклада, а также вклада от промежуточного векторного мезона. Взаимодействие мезонов в конечном состоянии учтено посредством рассмотрения расходящихся мезонных петель. Дополнительный параметр ультрафиолетового обрезания в этих петлях фиксируется по экспериментальной ширине рассматриваемого процесса.

DOI: 10.31857/S1234567821120016

1. Введение. В недавнем эксперименте [1] были сделаны оценки для ширин распадов $\tau \to K^- n \pi^0 \nu_{\tau}$ (n = 0, 1, 2, 3), причем значение ширины распада $\tau \to K^- \pi^0 \nu_{\tau}$ несколько отличается от данных, приведенных в Particle Data Group (PDG) [2], а также от данных экспериментальной работы [3]. Интерес к этому процессу обусловлен тем, что он используется при изучении поляризации вакуума, а также тем, что он содержит одновременно странные и нестранные частицы. Кроме того, вычисление этого процесса в рамках модели Намбу-Иона-Лазинио (НИЛ) [4-11] с учетом $a_1 - \pi$ и $K_1 - K$ переходов приводит к довольно сильному отклонению от экспериментальных данных, в то время как данная модель позволяет описать большое количество процессов распадов au лептона в удовлетворительном согласии с экспериментом (см., например, [12–15]). Это может свидетельствовать о необходимости учета дополнительных эффектов. В то же время в нашей недавно опубликованной теоретической работе был удовлетворительно описан похожий процесс $\tau \to \pi^- \pi^0 \nu_{\tau}$ [16] с использованием модели НИЛ, но с небольшим выходом за ее рамки для учета взаимодействия пионов в конечном состсоянии. Подобный же метод можно применить и к описанию распада $\tau \to K^- \pi^0 \nu_{\tau}$. Этому и посвящена настоящая работа.

Взаимодействие в конечном состоянии здесь описывается с помощью треугольных мезонных петель, содержащих каон, пион и векторный мезон. Другие диаграммы дают лишь незначительные поправки. Такие петли содержат квадратичную и логарифмическую расходимость. При этом величина обрезания будет фиксироваться по значению экспериментальной ширины.

Однако следует отметить, что при описании распада $\tau \to \pi^- \pi^0 \nu_{\tau}$ для фиксации возникающего неопределенного параметра ультрафиолетового обрезания расходящейся мезонной петли был использован процесс $e^+e^- \to \pi^-\pi^+$. В случае же распада $\tau \to K^-\pi^0\nu_{\tau}$, рассматриваемого в данной работе, не удалось найти такой дополнительный процесс, используя который можно было бы зафиксировать аналогичный параметр. Однако, мы можем претендовать на описание механизма этого распада. Также в данной работе исследуется влияние учета взаимодействия в конечном состоянии на дифференциальное распределение.

2. Лагранжиан взаимодействия модели НИЛ. В стандартной модели НИЛ кварк-мезонный лагранжиан взаимодействия псевдоскалярных и векторных мезонов, содержащий нужные нам вершины, принимает вид [7]:

$$\Delta L_{\rm int} = \bar{q} \left[i g_{\pi} \gamma^5 \lambda_0^{\pi} \pi^0 + i g_K \gamma^5 \lambda_{\pm}^K K^{\pm} + \frac{g_{\rho}}{2} \gamma^{\mu} \lambda_{\pm}^{\rho} \rho_{\mu}^{\pm} + \frac{g_{K^*}}{2} \gamma^{\mu} \lambda_{\pm}^K K_{\mu}^{*\pm} + \frac{g_{K^*}}{2} \gamma^{\mu} \lambda_0^K K_{\mu}^{*0} + i g_{\pi} \gamma^5 \lambda_{\pm}^{\pi} \pi^{\pm} \right] q, (1)$$

где q и \bar{q} – u-, d- и s-кварковые поля с составляющими массами $m_u=m_d=280\,{\rm M}{\rm sB},\,m_s=420\,{\rm M}{\rm sB},\,\pi^0,\,\pi^\pm,\,K^\pm,\,\rho^\pm,\,K^{*0}$ и $K^{*\pm}$ – псевдоскалярные и векторные мезоны, $\lambda^\pi_0,\,\lambda^K_\pm,\,\lambda^\rho_\pm,\,\lambda^K_\pm,\,\lambda^K_0$ и λ^π_\pm – линейные комбинации матриц Гелл-Манна.

Константы связи:

$$g_{\pi} = \sqrt{\frac{Z_{\pi}}{4I_{20}}}, \ \ g_{\rho} = \sqrt{\frac{3}{2I_{20}}}$$

 $^{^{1)}}$ e-mail: volkov@theor.jinr.ru; tex_k@mail.ru

$$g_K = \sqrt{\frac{Z_K}{4I_{11}}}, \ g_{K^*} = \sqrt{\frac{3}{2I_{11}}},$$

где

$$Z_{\pi} = \left(1 - 6\frac{m_u^2}{M_{a_1}^2}\right)^{-1},$$

$$Z_K = \left(1 - \frac{3}{2}\frac{(m_u + m_s)^2}{M_{K_{1A}}^2}\right)^{-1},$$

$$M_{K_{1A}}^2 = \left(\frac{\sin^2\alpha}{M_{K_1(1270)}^2} + \frac{\cos^2\alpha}{M_{K_1(1400)}^2}\right)^{-1},$$
(2)

 Z_{π} – множитель, соответствующий $\pi - a_1$ переходам, Z_K – множитель, соответствующий $K - K_1$ переходам, $M_{a_1} = 1230$ МэВ, $M_{K_1(1270)} = 1272$ МэВ, $M_{K_1(1400)} = 1403$ МэВ [2] – массы аксиально векторных a_1 и K_1 мезонов. Интегралы, входящие в определения констант связи, принимают следующий вид:

$$I_{nm} = -i \frac{N_c}{(2\pi)^4} \int \frac{\theta(\Lambda^2 + k^2)}{(m_u^2 - k^2)^n (m_s^2 - k^2)^m} \mathrm{d}^4 k, \quad (3)$$

Λ = 1250 МэВ – параметр обрезания [7]. Этот параметр, применяемый в данной версии модели НИЛ, больше значений, используемых в некоторых других версиях этой модели. Версия Намбу–Иона-Лазинио с таким обрезанием, применяемая в данной работе, позволила описать большое количество прецессов в удовлетворительном согласии с экспериментом.

3. Процесс $\tau \to K^- \pi^0 \nu_{\tau}$. Диаграммы процесса $\tau \to K^- \pi^0 \nu_{\tau}$ в лидирующем по $1/N_c$ приближении изображены на рис. 1, 2.



Рис. 1. Контактная диаграмма процесса $\tau \to K^- \pi^0 \nu_{\tau}$

Амплитуда этого процесса в данном приближении в модели НИЛ принимает вид:



Рис. 2. Диаграмма процесса $\tau \to K^- \pi^0 \nu_\tau$ с промежуточным мезоном

$$M(\tau \to K^{-}\pi^{0}\nu_{\tau})_{\text{tree}} = -3G_{f}V_{us}\frac{g_{K}g_{\pi}}{g_{K^{*}}^{2}}L_{\mu} \times \\ \times \left[g^{\mu\nu} + \frac{g^{\mu\nu}q^{2}f(q^{2}) - q^{\mu}q^{\nu}f(M_{K^{*}}^{2})}{M_{K^{*}}^{2} - q^{2} - i\sqrt{q^{2}}\Gamma_{K^{*}}}\right] \times \\ \times (A_{K}p_{K\nu} - A_{\pi}p_{\pi\nu}), \qquad (4)$$

где G_f – константа Ферми, V_{us} – элемент матрицы Кабиббо–Кобаяши–Маскава, L_{μ} – лептонный ток, A_K и A_{π} – константы, возникающие в результате учета π – a_1 и K – K_1 переходов:

$$A_{\pi} = 1 - 3 \frac{m_u (3m_u - m_s)}{M_{a_1}^2},$$

$$A_K = 1 - 3 \frac{m_s (m_u + m_s)}{M_{K_{1A}}^2}.$$
(5)

Функция

$$f(q^2) = 1 - \frac{3}{2} \frac{(m_s - m_u)^2}{q^2} \tag{6}$$

введена для удобства записи.

С помощью этой амплитуды можно получить следующее значение парциальной ширины данного распада:

$$Br(\tau \to K^- \pi^0 \nu_\tau)_{\rm tree} = 2.92 \times 10^{-3}.$$
 (7)

Экспериментальные значения:

$$Br(\tau \to K^{-}\pi^{0}\nu_{\tau})_{\exp} = (5.05 \pm 0.17) \times 10^{-3} [1],$$

$$Br(\tau \to K^{-}\pi^{0}\nu_{\tau})_{\exp} = (4.33 \pm 0.15) \times 10^{-3} [2],$$

$$Br(\tau \to K^{-}\pi^{0}\nu_{\tau})_{\exp} = (4.16 \pm 0.21) \times 10^{-3} [3].$$
(8)

Как видно, вычисленное в рамках модели НИЛ значение парациальной ширины для рассматриваемого процесса значительно отличается от экспериментальных данных. Это может говорить о необходимости учета взаимодействия в конечном состоянии.

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

Для этих целей требуется выход за пределы лидирующего по $1/N_c$ приближения, в котором сформулирована модель НИЛ.

4. Учет взаимодействия в конечном состоянии. Взаимодействие в конечном состоянии можно учесть с помощью диаграмм, изображенных на рис. 3. В отличие от процесса $\tau \to \pi \pi \nu_{\tau}$, здесь необходимо учесть уже три возможных варианта.

Амплитуда процесса $K^{*-} \to K^- \pi^0$ в лидирующем по $1/N_c$ приближении может быть описана полностью в рамках стандартной модели НИЛ. Она принимает вид:

$$M(K^{*-} \to K^{-}\pi^{0})_{\text{tree}} = 3\frac{g_{K}g_{\pi}}{g_{K^{*}}}e_{\mu}(p)\left(A_{K}p_{K}^{\mu} - A_{\pi}p_{\pi}^{\mu}\right), \qquad (9)$$

где $e_{\mu}(p)$ – поляризационный вектор распадающегося мезона, p_{K} и p_{π} – импульсы конечных мезонов.

На основе данной амплитуды можно записать соответствующую вершину мезонного лагранжиана:

$$-i3\frac{g_K g_\pi}{g_{K^*}} K^{*-}_{\mu} \left(A_K \pi^0 \partial^{\mu} K^+ - A_\pi K^+ \partial^{\mu} \pi^0 \right).$$
(10)

Аналогично можно получить остальные вершины [7, 17]:

$$-i3\sqrt{2}\frac{g_{K}g_{\pi}}{g_{K^{*}}}K_{\mu}^{*-}\left(A_{K}\pi^{+}\partial^{\mu}K^{0}-A_{\pi}K^{0}\partial^{\mu}\pi^{+}\right),\\ -i3\sqrt{2}\frac{g_{K}g_{\pi}}{g_{K^{*}}}\bar{K}_{\mu}^{*0}\left(A_{K}\pi^{-}\partial^{\mu}K^{+}-A_{\pi}K^{+}\partial^{\mu}\pi^{-}\right),\\ -i3\frac{g_{K}g_{\pi}}{g_{K^{*}}}K_{\mu}^{*0}\left(A_{K}\pi^{0}\partial^{\mu}\bar{K}^{0}-A_{\pi}\bar{K}^{0}\partial^{\mu}\pi^{0}\right),\\ -i\frac{\sqrt{2}}{2}g_{\rho}\rho_{\mu}^{-}\left(K^{+}\partial^{\mu}\bar{K}^{0}-\bar{K}^{0}\partial^{\mu}K^{+}\right),\\ -ig_{\rho}\rho_{\mu}^{+}\left(\pi^{-}\partial^{\mu}\bar{\pi}^{0}-\bar{\pi}^{0}\partial^{\mu}\pi^{-}\right).$$
 (11)

Эти мезонные петли приводят к следующим интегралам:

$$F_{\mu}^{K^{*\pm}} = \int \frac{(A_{K}k - (A_{K} + A_{\pi}) p_{\pi})_{\lambda} (A_{\pi}k + (A_{K} + A_{\pi}) p_{K})_{\nu} ((A_{K} + A_{\pi}) k + A_{\pi}p_{K} - A_{K}p_{\pi})_{\mu} \left(g^{\nu\lambda} - \frac{k^{\nu}k^{\lambda}}{M_{K^{*}}^{2}}\right)}{[k^{2} - M_{K^{*}}^{2}] [(k + p_{K})^{2} - M_{\pi}^{2}] [(k - p_{\pi})^{2} - M_{K}^{2}]} \frac{d^{4}k}{(2\pi)^{4}},$$

$$F^{\rho}_{\mu} = \int \frac{(k-2p_{\pi})_{\lambda} (k+2p_{K})_{\nu} ((A_{K}+A_{\pi})k + A_{K}p_{K} - A_{\pi}p_{\pi})_{\mu} \left(g^{\nu\lambda} - \frac{k^{\nu}k^{\lambda}}{M_{\rho}^{2}}\right)}{\left[k^{2} - M_{\rho}^{2}\right] \left[(k+p_{K})^{2} - M_{K}^{2}\right] \left[(k-p_{\pi})^{2} - M_{\pi}^{2}\right]} \frac{d^{4}k}{(2\pi)^{4}},$$

$$F^{K^{*0}}_{\mu} = F^{K^{*\pm}}_{\mu}.$$
(12)

Данные интегралы расходятся и могут быть регуляризованы обрезанием с помощью параметра Λ_M .

Интегралы (12) можно вычислить по аналогии с тем, как вычислялись интегралы по кварковым петлям в модели НИЛ, т.е. разложением знаменателя по внешним импульсам и удержанием только расходящихся членов (см. Приложение).

В результате, мы можем записать дополнительные вклады от мезонных петель в процесс $\tau \to K^- \pi^0 \nu_{\tau}$:

$$M(\tau \to K^{-}\pi^{0}\nu_{\tau})_{\text{loop}} = -3iG_{f}V_{us}\frac{g_{K}g_{\pi}}{g_{K^{*}}^{2}}L_{\mu} \times \\ \times \left[g^{\mu\nu} + \frac{g^{\mu\nu}q^{2}f(q^{2}) - q^{\mu}q^{\nu}f(M_{K^{*}}^{2})}{M_{K^{*}}^{2} - q^{2} - i\sqrt{q^{2}}\Gamma_{K^{*}}}\right] \\ \left\{-\left(3\frac{g_{K}g_{\pi}}{g_{K^{*}}}\right)^{2}F_{\nu}^{K^{*\pm}} + g_{\rho}^{2}F_{\nu}^{\rho} + 2\left(3\frac{g_{K}g_{\pi}}{g_{K^{*}}}\right)^{2}F_{\nu}^{K^{*0}}\right\}.(13)$$

Сравнение результата с экспериментальной пириной, взятой из PDG [2], дает значение параметра $\Lambda_M = 950$ МэВ. Если сравнивать с экспериментальным значением, приведенным в работе [1], мы полу-

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

чаем $\Lambda_M = 1100$ МэВ. Эксперимент [3] приводит к $\Lambda_M = 910$ МэВ.

При учете взаимодействия в конечном состоянии аналогичным способом в процессе $\tau \to \pi^- \pi^0 \nu_{\tau}$ был получен параметр обрезания $\Lambda_M = 740$ МэВ [16]. Эти процессы отличаются заменой пиона на более массивный каон. Естественно, что такая замена должна вести к увеличению обрезания. Следовательно, полученный здесь результат не противоречит предыдущему.

График зависимости дифференциальной ширины процесса от инвариантной массы конечных мезонов представлен на рис. 4. Как видно, учет взаимодействия мезонов в конечном состоянии посредством дополнительных мезонных петель не искажает форму данной зависимости.



Рис. 3. Дополнительные петлевые вклады вершины $K^{*-}(W^-) \to K^- \pi^0$



Рис. 4. Зависимости дифференциальной ширины процесса $\tau \to K^- \pi^0 \nu_{\tau}$ от инвариантной массы конечных мезонов для случая учета взаимодействия в конечном состоянии при $\Lambda_M = 910$ МэВ (сплошная линия) и для случая древесного приближения по мезонным полям (пунктирная линия). Экспериментальные точки взяты из работы [3]

Вершина лагранжиана взаимодействия скалярного мезона K_0^* с каоном и пионом в минимальном порядке не содержит производных:

$$2m_s \frac{g_K g_\pi}{g_{K_0^*}} K_0^{*-} K^+ \pi^0.$$
 (14)

Поэтому, взаимодействие в конечном состоянии путем обмена скалярным мезоном, изображенное на рис. 5, в минимальном порядке по внешним импульсам приводит к сходящемуся интегралу, который дает результат на несколько порядков меньше экспериментального.

Четырехмезонная вершина взаимодействия каонов и пионов в минимальном порядке также не содержит производных:

$$-\frac{1}{2}g_{\pi}^{2}K^{+}K^{-}\pi^{0}\pi^{0}.$$
 (15)

Поэтому, если рассмотреть взаимодействие в конечном состоянии посредством четырехмезонной вершины (рис. 6), то мы получаем расходящийся интеграл, который дает результат на два порядка меньше вкладов с обменом векторным мезоном. По этой причине для учета взаимодействия в конечном состоянии мы ограничились только диаграммами, изображенными на рис. 3.



Рис. 5. Взаимодействие в конечном состоянии посредством обмена скалярным мезоном



Рис. 6. Взаимодействие в конечном состоянии с четырехмезонной вершиной

5. Заключение. Процесс $\tau \to K^- \pi^0 \nu_{\tau}$ вычислен с использованием модели НИЛ. Взаимодействие адронов в конечном состоянии представлено через

обмен векторными мезонами K^* и ρ . Это привело к необходимости выхода за пределы лидирующего по $1/N_c$ приближения, в котором сформулирована стандартная модель НИЛ. Полученные расходящиеся треугольные диаграммы были регуляризованы обрезанием. Так как нет подходящего процесса, по которому можно было бы зафиксировать параметр обрезания в данных трелугольниках, он был определен по экспериментальной ширине рассматриваемого распада. Поэтому полученные результаты не обладают предсказательной силой, но могут претендовать на описание механизма данного процесса. Дополнительные члены составили порядка 30 %, что и позволяет рассматривать их как поправки следующего порядка разложения по $1/N_c$.

Учет треугольных диаграм с обменом скалярными мезонами, а также диаграмм с четырехмезонной вершиной приводит к незначительным поправкам.

Данный распад также изучался во многих теоретических работах других авторов [18–20]. Как правило, при этом использовалась киральная теория возмущений, резонансная киральная теория, дисперсионные соотношения и модель векторной доминантности. Возникающие параметры фиксировались по экспериментальным данным.

Приложение. Интегралы $F_{\mu}^{K^*}$ и F_{μ}^{ρ} из (12) вычислялись разложением знаменателей в ряд и удержанием расходящихся членов. Во многих расходящихся слагаемых в числителе возникает квадрат импульса интегрирования. К нему можно прибавить и вычесть квадрат массы мезона $k^2 - M^2 + M^2$. В результате одно слагаемое сокращается с одним из знаменателей пропагатора, и там расходимость остается прежней, а во втором слагаемом расходимость понижается вплоть до появления сходящихся членов. Если отбросить все сходящиеся части, то возникнет неопределенность ответа, зависящая от того, массы каких мезонов мы прибавляли и вычитали. Для избежания этой неопределенности такие сходящиеся слагаемые учитывались при вычислении.

$$\begin{split} F^{K^*\mu} &= -\frac{i}{24M_{K^*}^2} \left\{ 2 \left\{ 3 \left[A_\pi \left(5A_K^2 + 2A_K A_\pi + A_\pi^2 \right) p_\pi^\mu - A_K \left(A_K^2 + 2A_K A_\pi + 5A_\pi^2 \right) p_K^\mu \right] \right. \\ & \times \left[I_{K^*} - I_{K^*K} \left(M_K^2 + M_\pi^2 \right) + I_{K^*K\pi} M_\pi^4 \right] - 3M_\pi^2 \left[A_K \left(A_K^2 + 2A_K A_\pi + 5A_\pi^2 \right) p_K^\mu \right] \right. \\ & - A_\pi \left(5A_K^2 + 2A_K A_\pi + A_\pi^2 \right) p_\pi^\mu \right] \left[I_{K^*K} - I_{K^*K\pi} \left(M_K^2 + M_\pi^2 \right) + I_{K^*2K\pi} M_K^4 \right] \right. \\ & + 3M_K^2 \left[I_{K^*K} - 2I_{K^*K\pi} M_\pi^2 + I_{K^*K2\pi} M_\pi^4 \right] \left[A_\pi \left(5A_K^2 + 2A_K A_\pi + A_\pi^2 \right) p_\pi^\mu \right] \\ & - A_K \left(A_K^2 + 2A_K A_\pi + 5A_\pi^2 \right) p_K^\mu \right] + 2 \left[I_{K^*K} - I_{K^*K\pi} M_\pi^2 + 3I_{K^*K2\pi} M_\pi^4 - I_{K^*K3\pi} M_\pi^6 \right] \\ \left[p_\mu^\mu \left(3A_M^3 M_K^2 + A_K^2 A_\pi \left(7M_K^2 + M_\pi^2 - q^2 \right) + A_K A_\pi^2 \left(11M_K^2 + 2 \left(M_\pi^2 - q^2 \right) \right) \right. \\ & + A_\pi^3 \left(M_K^2 + M_\pi^2 - q^2 \right) \right) - A_\pi^2 M_K^2 \left(7A_K^2 + 2A_K A_\pi + A_\pi^2 \right) p_\pi^\mu \right] \\ & - 6A_K A_\pi \left(A_K + A_\pi \right) \left[I_{K^*} - I_{K^*K} \left(2M_K^2 + M_\pi^2 \right) - I_{K^*K\pi} \left(M_K^4 + M_K^2 M_\pi^2 + M_\pi^4 \right) \right. \\ & - I_{K^*2K\pi} M_K^6 \right] p_\pi^\mu + 6A_K A_\pi \left(A_K + A_\pi \right) \left[I_{K^*} - I_{K^*K} \left(M_K^2 + 2M_\pi^2 \right) + 3I_{K^*K\pi} M_\pi^4 - I_{K^*K2\pi} M_\pi^6 \right] p_K^\mu \\ & + 4A_K A_\pi \left(A_K + A_\pi \right) \left[\left(M_K^2 + M_\pi^2 - q^2 \right) p_\pi^\mu - M_\pi^2 p_K^\mu \right] \left[I_{K^*K} - 2I_{K^*K\pi} \left(M_K^2 + M_\pi^2 \right) \right] \\ & + I_{K^*2K\pi} \left(3M_K^4 + 2M_K^2 M_\pi^2 + M_\pi^4 \right) - 4I_{K^*2K\pi} M_K^6 + I_{K^*3K2\pi} M_K^6 \right] + 6A_K A_\pi \left(A_K + A_\pi \right) \\ & - 4I_{K^*2K2\pi} M_K^6 \right] + 4A_K A_\pi \left(A_K + A_\pi \right) \left[M_K^2 p_\pi^2 - \left(M_K^2 + M_\pi^2 - q^2 \right) p_K^\mu \right] \left[I_{K^*K} \right] \\ & - I_{K^*K\pi} \left(M_K^2 + 3M_\pi^2 \right) + I_{K^*K2\pi} \left(M_K^4 + 2M_K^2 M_\pi^2 + 3M_\pi^4 \right) - I_{K^*K3\pi} \left(M_K^2 + M_\pi^2 \right) \right] \left[M_K^* M_\pi^2 + M_\pi^2 \right] \\ & + I_{K^*2K3\pi} M_K^8 \right] M_\pi^2 p_\pi^\mu + 12A_K A_\pi \left(A_K + A_\pi \right) \left[I_{K^*K\pi} M_\pi^2 - 3I_{K^*K2\pi} M_\pi^4 - 3I_{K^*3\pi\pi} M_\pi^6 \right] \\ & I_{K^*K4\pi} M_K^8 \right] M_\pi^2 p_\pi^\mu + 12A_K A_\pi \left(A_K + A_\pi \right) \left[I_{K^*K\pi} M_\pi^2 - 3I_{K^*K2\pi} M_\pi^4 - 3I_{K^*3\pi\pi} M_\pi^6 \right] \\ & + I_{K^*4K\pi} M_K^8 \right] M_\pi^2 p_\pi^\mu + 12A_K A_\pi \left(A_K + A_\pi \right) \left[I_{K^*K\pi} M_\pi^2 - 3I_{K^*K2\pi} M_\pi^4 - 3I_{K^*3\pi\pi} M_\pi^6 \right] \\ \\ & + I_{K^*4\pi\pi} M_\pi^8$$

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

$$-2I_{K^{*}K\pi}M_{\pi}^{2} + I_{K^{*}K2\pi}M_{\pi}^{4}] \left[\left(A_{K}^{2}\left(M_{K}^{2} + M_{\pi}^{2} - q^{2}\right) + 2A_{K}A_{\pi}\left(4M_{K}^{2} + M_{\pi}^{2} - 3M_{K^{*}}^{2} - q^{2}\right) + 4A_{\pi}^{2}\left(M_{K}^{2} + M_{\pi}^{2} - q^{2}\right) p_{K}^{\mu} - \left(7A_{K}^{2}M_{K}^{2} + A_{K}A_{\pi}\left(5M_{K}^{2} + 3M_{\pi}^{2} - 3q^{2}\right) + A_{\pi}^{2}M_{K}^{2}\right) p_{\pi}^{\mu} \right] \\ + 2\left[I_{K^{*}K} - I_{K^{*}K\pi}\left(M_{K}^{2} + 2M_{\pi}^{2}\right) + I_{K^{*}K2\pi}\left(M_{K}^{4} + M_{K}^{2}M_{\pi}^{2} + M_{\pi}^{4}\right) - I_{K^{*}2K2\pi}M_{K}^{6}\right] \\ \left[\left(A_{K}^{3}\left(M_{K}^{2} + M_{\pi}^{2} - q^{2}\right) + A_{K}A_{\pi}\left(A_{K} + 2A_{\pi}\right)\left(2M_{K}^{2} + 3M_{\pi}^{2} - 2q^{2}\right) + A_{\pi}^{3}M_{\pi}^{2}\right) p_{K}^{\mu} \right] \\ - \left(A_{\pi}^{3}\left(M_{K}^{2} + M_{\pi}^{2} - q^{2}\right) + A_{K}A_{\pi}\left(2A_{K} + A_{\pi}\right)\left(3M_{K}^{2} + 2M_{\pi}^{2} - 2q^{2}\right) + A_{K}^{3}M_{K}^{2}\right) p_{\pi}^{\mu} \right] \\ - 2\left[I_{K^{*}K} - I_{K^{*}K\pi}\left(2M_{K}^{2} + M_{\pi}^{2}\right) + 3I_{K^{*}2K\pi}M_{K}^{4} - I_{K^{*}3K\pi}M_{K}^{6}\right] \left[\left(A_{K}^{3}\left(M_{K}^{2} + M_{\pi}^{2} - q^{2}\right) + A_{K}^{2}A_{\pi}\left(2M_{K}^{2} + 11M_{\pi}^{2} - 2q^{2}\right) + A_{K}A_{\pi}^{2}\left(M_{K}^{2} + 7M_{\pi}^{2} - q^{2}\right) + 3A_{\pi}^{3}M_{\pi}^{2}\right) p_{\pi}^{\mu} \\ - A_{K}\left(A_{K}^{2} + 2A_{K}A_{\pi} + 7A_{\pi}^{2}\right)M_{\pi}^{2}p_{K}^{\mu} \right] \right\} \right\},$$

$$(16)$$

$$\begin{split} F^{\rho\mu} &= \frac{i}{6M_{\rho}^{2}} \left\{ 6 \left(A_{K} + A_{\pi} \right) \left[I_{\rho K\pi} M_{K}^{2} - 3 I_{\rho 2K\pi} M_{K}^{4} + 3 I_{\rho 3K\pi} M_{K}^{6} - I_{\rho 4K\pi} M_{K}^{8} \right] M_{K}^{2} p_{K}^{\mu} \\ &+ 6 \left(A_{K} + A_{\pi} \right) \left[-I_{\rho K\pi} M_{\pi}^{2} + 3 I_{\rho K 2\pi} M_{\pi}^{4} - 3 I_{\rho K 3\pi} M_{\pi}^{6} + I_{\rho K 4\pi} M_{\pi}^{8} \right] M_{\pi}^{2} p_{\pi}^{\mu} \\ &- 3 \left[I_{\rho} - I_{\rho K\pi} \left(M_{K}^{4} + M_{K}^{2} M_{\pi}^{2} + M_{\pi}^{4} \right) + I_{\rho K\pi} \left(M_{K}^{6} + M_{\pi}^{2} \right) \right] \left[(3A_{K} + A_{\pi}) p_{K}^{\mu} - (A_{K} + 3A_{\pi}) p_{\pi}^{\mu} \right] \\ &+ 3 \left(A_{K} + A_{\pi} \right) \left[I_{\rho} - I_{\rho K} \left(2M_{K}^{2} + M_{\pi}^{2} \right) + I_{\rho K\pi} \left(M_{K}^{4} + M_{K}^{2} M_{\pi}^{2} + M_{\pi}^{4} \right) - I_{\rho 2K\pi} M_{K}^{6} \right] p_{\pi}^{\mu} \\ &- 3 \left(A_{K} + A_{\pi} \right) \left[I_{\rho} - I_{\rho K} \left(M_{K}^{2} + 2M_{\pi}^{2} \right) + 3 I_{\rho K\pi} M_{\pi}^{4} - I_{\rho 2K\pi} M_{\pi}^{6} \right] p_{\pi}^{\mu} \\ &- 3 \left(A_{K} + A_{\pi} \right) \left[I_{\rho K} - I_{\rho K\pi} \left(M_{K}^{2} + 2M_{\pi}^{2} \right) + I_{\rho K 2\pi} \left(M_{K}^{4} + M_{K}^{2} M_{\pi}^{2} + M_{\pi}^{4} \right) - I_{\rho 2K\pi} M_{K}^{6} \right] \\ \times \left[M_{K}^{2} p_{\pi}^{\mu} - M_{\pi}^{2} p_{K}^{\mu} \right] + 2 \left(A_{K} + A_{\pi} \right) \left[I_{\rho K} - 2I_{\rho K\pi} \left(M_{K}^{2} + M_{\pi}^{2} \right) + I_{\rho K 2\pi} \left(M_{K}^{4} + 2M_{K}^{2} M_{\pi}^{2} + M_{\pi}^{4} \right) \\ &- 4I_{\rho 2K 2\pi} M_{K}^{6} + I_{\rho 3K 2\pi} M_{K}^{3} \right] \left[M_{K}^{2} p_{\pi}^{\mu} - \left(M_{K}^{2} + M_{\pi}^{2} - q^{2} \right) p_{\mu}^{\mu} \right] - 2 \left(A_{K} + A_{\pi} \right) \left(I_{\rho K} - I_{\rho K\pi} \left(M_{K}^{2} + M_{\pi}^{2} \right) + I_{\rho K 2\pi} \left(M_{K}^{4} + M_{\pi}^{2} \right) + I_{\rho K 2\pi} M_{K}^{4} \right] \right] \\ &- I_{\rho 3K \pi} M_{K}^{6} \right] \left[\left(\left(TA_{K} + 4A_{\pi} \right) M_{K}^{2} + \left(A_{K} - A_{\pi} \right) M_{\pi}^{2} - \left(A_{K} + A_{\pi} \right) M_{K}^{2} + I_{\rho K 2\pi} M_{\pi}^{4} - I_{\rho K 3\pi} \left(M_{K}^{2} + M_{\pi}^{2} \right) + I_{\rho K 2\pi} M_{\pi}^{4} + I_{\rho K 3\pi} M_{\pi}^{6} \right] \left[\left(IA_{K} + 7A_{\pi} \right) M_{2}^{2} + I_{\rho K 2\pi} M_{K}^{4} \right] \\ &- \left(I_{\rho K} - 3I_{\rho K \pi} M_{\pi}^{2} + I_{\rho K 2\pi} M_{\pi}^{4} - I_{\rho K 3\pi} M_{\pi}^{6} \right] \left[\left((A_{K} + A_{\pi}) M_{K}^{2} + (A_{K} + A_{\pi}) M_{K}^{2} + A_{\pi} \right) M_{K}^{2} + I_{\rho K 2\pi} M_{\pi}^{4} + I_{\rho K 2\pi} M_{\pi}^{4} + I_{\rho K 2\pi} M_{\pi}^{4} \right] \\ &- \left(I_{\rho K} - 3I_{\rho K \pi} M_{\pi}^{2} + I_{\rho K 2\pi} M_{\pi}^{4} - I_$$

где

$$I_{K^*n_1Kn_2\pi} = -\frac{i}{(2\pi)^4} \int \frac{\mathrm{d}^4k}{(M_{K^*}^2 - k^2) (M_K^2 - k^2)^{n_1} (M_\pi^2 - k^2)^{n_2}},$$

$$I_{\rho n_1Kn_2\pi} = -\frac{i}{(2\pi)^4} \int \frac{\mathrm{d}^4k}{(M_\rho^2 - k^2) (M_K^2 - k^2)^{n_1} (M_\pi^2 - k^2)^{n_2}}.$$
(18)

Сходящихся слагаемых в полученных выражениях большинство. Если их отбросить, то ответ изменится всего приблизительно на 5%. Это дает основания полагать, что конечные части вносят небольшой вклад. Настоящая работа выполнена в данном предположении. Полное вычисление всех конечных частей и уточнение полученных результатов может рассматриваться как отдельная задача для будущих работ.

Авторы выражают благодарность А.Б. Арбузову за интерес к данной работе и полезные обсуждения.

٦

783

- A. Lusiani (BaBar), PoS EPS-HEP2019, 216 (2020); doi 10.22323/1.364.0216.
- P. A. Zyla, R. M. Barnett, J. Beringer et al. (Particle Data Group), PTEP **2020**(8), 083C01 (2020).
- B. Aubert, M. Bona, D. Boutigny et al. (BaBar), Phys. Rev. D 76, 051104 (2007).
- Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, Phys. Rev. **122**, 345 (1961).
- 5. T. Eguchi, Phys. Rev. D 14, 2755 (1976).
- 6. D. Ebert and M. K. Volkov, Z. Phys. C 16, 205 (1983).
- M. K. Volkov, Sov. J. Part. Nucl. **17**, 186 (1986) [Fiz. Elem. Chast. Atom. Yadra **17**, 433 (1986)].
- D. Ebert and H. Reinhardt, Nucl. Phys. B 271, 188 (1986).
- U. Vogl and W. Weise, Prog. Part. Nucl. Phys. 27, 195 (1991).
- D. Ebert, H. Reinhardt, and M. K. Volkov, Prog. Part. Nucl. Phys. 33, 1 (1994).

- M. K. Volkov and A. E. Radzhabov, Phys. Usp. 49, 551 (2006).
- M. K. Volkov, A. B. Arbuzov, and D. G. Kostunin, Phys. Rev. D 86, 057301 (2012).
- M.K. Volkov, A.A. Pivovarov, and K. Nurlan, Eur. Phys. J. A 55(9), 165 (2019).
- M. K. Volkov and A. A. Pivovarov, JETP Lett. 110(4), 237 (2019).
- M. K. Volkov, A. A. Pivovarov, and K. Nurlan, Nucl. Phys. A **1000**, 121810 (2020).
- M.K. Volkov, A.B. Arbuzov, and A.A. Pivovarov, JETP Lett. **112**(8), 457 (2020).
- D. Ebert and M.K. Volkov, Fortsch. Phys. 29, 35 (1981).
- 18. M. Finkemeier and E. Mirkes, Z. Phys. C 72, 619 (1996).
- M. Jamin, A. Pich, and J. Portoles, Phys. Lett. B 640, 176 (2006).
- D. R. Boito, R. Escribano, and M. Jamin, Eur. Phys. J. C 59, 821 (2009).

Вакуумные условия и время жизни пучка однозарядных ионов гелия Бустере NICA (Первый сеанс)

А. В. Бутенко⁺, А. Р. Галимов⁺, И. Н. Мешков^{+*1)}, Е. М. Сыресин^{+ \circ}, И. Ю. Толстихина[×], А. В. Тузиков⁺, А. В. Филиппов⁺, Г. Г. Ходжибагиян⁺, В. П. Шевелько[×]

+Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

*Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 С.-Петербург, Россия

 $^{\times} \Phi$ изический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

[°]Государственный университет "Дубна", 141980 Дубна, Россия

Поступила в редакцию 31 марта 2021 г. После переработки 16 мая 2021 г. Принята к публикации 16 мая 2021 г.

Приведены результаты первого сеанса (декабрь 2020 г.) по вводу в действие Бустера – нового сверхпроводящего синхротрона, построенного в Объединенном институте ядерных исследований: анализ вакуумных условий и измерений времени жизни пучка однозарядных ионов гелия при энергии инжекции 3.2 МэВ/н, и демонстрация ускорения ионов до энергии 100 МэВ/н. Измеренная величина времени жизни пучка $\tau_{exp} = (1.32\pm0.06)$ с сравнивается с теоретическим расчетом $\tau_{theor} = (1.74\pm0.50)$ с, полученным с помощью оригинальных компьютерных программ. Представлены результаты первого включения системы электронного охлаждения.

DOI: 10.31857/S1234567821120028

1. Введение. В Лаборатории физики высоких энергий им. В.И. Векслера и А.М. Балдина Объединенного института ядерных исследований осуществляется проект Nuclotron-based Ion Collider fAcility (NICA), являющийся одним из четырех национальных Мегапроектов. Первой и главной целью проекта является поиск и исследование новых состояний кварк-глюонной материи и фазовых превращений между ними в экстремальных условиях высоких температур и максимально достижимых в лабораторных условиях барионных плотностей. В естественных условиях такая материя, возможно, существовала на разных стадиях эволюции Вселенной и существует в недрах нейтронных звезд, и может быть получена в лабораторных условиях в результате соударений релятивистских тяжелых ионов на Коллайдере создающегося ускорительного комплекса NICA [1, 2].

Первым циклическим ускорителем в цепочке трех синхротронов комплекса NICA является Бустер – новый сверхпроводящий (СП) протонный синхротрон, предназначенный для накопления и ускорения ионов от энергии инжекции 3.2 МэВ/н до энергии около 600 МэВ/н и их последующей инжекции в синхротрон Нуклотрон.

В первом ускорительном сеансе Бустера проверялась работоспособность всех его систем - магнитной отклоняющей и фокусирующей, ускоряющей высокочастотной (ВЧ), системы электронного охлаждения (СЭО), и других. Среди них одной из важнейших является вакуумная система пучковой камеры, тестирование которой производится на конечной стадии измерением времени жизни пучка, циркулирующего в синхротроне. В данном случае таким был пучок однократно ионизованных ионов гелия (He¹⁺), ускоренных в Линейном Ускорителе Тяжелых Ионов (ЛУТИ) до энергии инжекции 3.2 МэВ/н. Этот ион был выбран из-за отсутствия спектра "примесей": "моно пучок", удобный для измерения эффективности его транспортировки от инжектора до синхротрона. Источник таких ионов позволял получить пучок с высокой интенсивностью и стабильными параметрами.

2. Распределение давления и состав остаточного газа в вакуумной камере Бустера. Пучковая камера Бустера (рис. 1) разделена затворами с металлическими уплотнениями на "теплые" прямолинейные промежутки (ПП), находящиеся при

¹⁾e-mail: meshkov@jinr.ru

комнатной температуре, и "холодные" квадранты (Кв.), температура которых варьируется в диапазоне от 4.2 до 77.4 °К.



Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема вакуумных объемов пучковой камеры Бустера

Перед началом сеанса с целью достижения рабочего давления и оптимального состава остаточного газа, "теплые" ПП предварительно прогревались [3] до температуры 250 °C в течение 48 ч. Рабочее давление достигалось магниторазрядными насосами в комбинации с распыляемыми или нераспыляемыми геттерными.

Измерение давления в арках производилось датчиками с холодным катодом, расположенными на постах откачки при комнатной температуре и соединенными с пучковой камерой через патрубок Ду 100 мм. Расстояние от холодных поверхностей до места установки датчика около 0.5 м. Состав остаточного газа в точке измерения давления не контролировался. Результаты измерений на стенде при аналогичных температурных и вакуумных условиях дают состав – 90 % Н₂ и 10 % по остальным газам.

В отсеченных "теплых" ПП после прогрева давление было получено на уровне $(0.2 \div 2.0) \cdot 10^{-8}$ Па. Измерение давления производилось датчиками с холодным катодом, откалиброванными относительно друг друга и установленными непосредственно на элементах пучковой камеры.

Распределение давления по кольцу Бустера при "охлажденной" СП магнитно-криостатной системе [3] измерялось как до начала работы с пучком (рис. 2a), так и в процессе работы с ним (рис. 2b). В первом случае, вакуумные затворы, разделяющие единый вакуумный объем на "теплые" и "холодные" участки, были закрыты до 17.12.2020 г., и среднее давле-



Рис. 2. Распределение давления по кольцу Бустера: (а) – до начала работы с пучком; (b) – в период работы с пучком. Здесь приняты обозначения участков, в которых расположены датчики давления: ПП 1 (SS 1) – участок инжекции с электростатическим септумом. Кв. 1 (Q 1) – арка 1, ПП 2 (SS 2) – участок с ускоряющей станцией; Кв. 2 (Q 2) – арка 2, ПП 3 (SS 3) – участок вывода пучка в Нуклотрон; Кв. 3 (Q 3) – арка 3, ПП 4 (SS 4) – участок с СЭО; Кв. 4 (Q 4) – арка 4. Масштаб по оси абсцисс произвольный

ние по кольцу Бустера, рассчитанное с учетом длин "теплых" и "холодных" участков, составляло около $8 \cdot 10^{-9}$ Па (0.06 нТорр). Во втором случае (работа с пучком, вакуумные затворы открыты) среднее давление выросло до $1.9 \cdot 10^{-8}$ Па (0.14 нТорр). При открытии вакуумных затворов на участках ПП 1, ПП 2 и ПП 3 открылись течи из атмосферы в объем пучковой камеры, локализованные с помощью гелиевого течеискателя.

Для определения состава остаточного газа (рис. 3) в ПП 3 был установлен анализатор остаточного газа – квадрупольный масс-спектрометр с диапазоном измеряемых масс до 100 а.е.м.

В составе остаточного газа в ПП 3 основные пики соответствуют массам 2, 14 и 28 а.е.м. Для чистых (с низким содержанием углеводородов) прогретых "теп-



Рис. 3. Масс-спектр состава остаточного газа в ПП 3 (SS 3) вакуумной камеры Бустера. Цифры в легенде показывают значения масс основных компонент остаточного газа в а.е.м.

лых", но не отожженных систем характерно преобладание в составе остаточного газа молекулярного водорода (пики 1 и 2 а.е.м.). Присутствие атмосферных течей приводит к возникновению пика 28 а.е.м. $(N_2^+ и/или CO^+)$. Практика работы с СП кольцевыми укорителями показывает, что давление остаточного газа в пучковых камерах "холодных" участков, при отсутствии поступления гелия в пучковую камеру, определяется молекулярным водородом, так как все остальные газы, кроме таких, как аргон или неон, сорбируются на наиболее "холодных" участках камеры [3].

Возможные варианты состава остаточного газа в "теплом" ПП 3 Бустера (табл. 1) отличаются наличием компонент H₂ или He, неразличимых для доступных масс-спектрометров. Вероятные причины появления пиков 14 и 28 а.е.м. обсуждаются в [3].

Таблица 1. Возможные составы остаточного газа в "теплом" ПП 3 Бустера

#	Масс-спектр	Возможный источник			
Ι	3% H, 67% H_2, 6% N, 24% N_2	Атмосферная течь			
Π	3% H, 67% He, 6% N, 24% N_2	Гелиевая и азотная течи			

3. Измерение времени жизни ионов He^{1+} , циркулирующих в Бустере. Значения времени жизни $\tau_{\text{ехр}}$ пучка ионов He^{1+} при энергии 3.2 МэВ/н определялись для двух независимых измерений зависимости тока пучка от времени, измеренной с помощью параметрического трансформатора тока пучка (ПТТ) и с хорошей точностью аппроксимировавшейся экспоненциальной функцией $e^{-t/\tau_{\text{ехр}}}$. По результатам двух измерений (рис. 4) получены значения $\tau_{\exp 1} = 1.28$ с (набор точек 1) и $\tau_{\exp 2} = 1.36$ с (набор точек 2), что дает среднее значение:

$$\langle \tau_{\rm exp} \rangle = (1.32 \pm 0.06) \,\mathrm{c.}$$
 (1)



Рис. 4. Зависимость сигнала ПТТ от времени при циркуляции ионов He¹⁺ на плато магнитного поля при энергии инжекции 3.2 МэВ/н

Такие же измерения времени жизни пучка проводились при включенной СЭО [3] и различных значениях энергии электронов. При приближении значения этой энергии к оптимальному (соответствующему равенству скоростей электронов и охлаждаемых ионов) наблюдалось уменьшение времени жизни ионов, что указывает на работоспособность СЭО. Более точные и детальные измерения планируется провести в следующем сеансе.

Интересно отметить, что такой же эффект уменьшения времени жизни пучка наблюдался в первых экспериментах по электронному охлаждению на накопителе НАП-М [4] (ИЯФ СО АН СССР, 1974 г.).

4. Результаты теоретических расчетов и сравнение их с экспериментом. Расчеты времени жизни пучка ионов He^{1+} проводились в предположении, что потери интенсивности пучка вызваны только взаимодействием ионов с атомами и молекулами остаточного газа в вакуумной камере Бустера. Поскольку Бустер имеет "теплые" и "холодные" участки вакуумной камеры, для расчета времени жизни τ_{theor} использовалась формула

$$\frac{1}{\tau_{\text{theor}}} = \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha} \beta c n_{\alpha} + \sum_{\alpha'} \sigma_{\alpha'} \beta c n_{\alpha'}.$$
 (2)

Здесь $\beta = v/c$ – релятивистский фактор, v – скорость ионов пучка, c – скорость света, σ_{α} и $\sigma_{\alpha'}$ – сумма сечений ионизации (обдирки) и перезарядки ионов He¹⁺, n_{α} и $n_{\alpha'}$ – концентрации частиц остаточного газа, α и α' – сорта остаточного газа в "теп-

лой" (L_{warm}) и "холодной" (L_{cold}) частях вакуумной камеры Бустера соответственно:

$$n_{\alpha} = \frac{L_{\text{warm}}}{L} n_{\alpha,\text{warm}}, \ n_{\alpha'} = \frac{L_{\text{cold}}}{L} n_{\alpha',\text{cold}}, \qquad (3)$$

где концентрации $n_{\alpha,\text{warm}}$, $n_{\alpha',\text{cold}}$ рассчитывались по формулам, учитывающим эффект Кнудсена [5] по измеренным средним давлениям (рис. 2b), $L_{\text{warm}} = 24$ м и $L_{\text{cold}} = 187$ м – длины "теплого" и "холодного" участков вакуумной камеры Бустера с периметром L = 211 м.

Сечения ионизации и перезарядки ионов Не¹⁺ вычислялись по программам RICODE-М и CAPTURE, описанным в работах [6,7] и [8] соответственно. В программе RICODE-М вычисляются сечения ионизации (обдирки) атомов и ионов в релятивистском приближении Борна [6,7] с учетом магнитного взаимодействия между сталкивающимися частицами и использовании релятивистских волновых функций электронов в дискретном и непрерывном спектрах. Программа CAPTURE основана на использовании приближения Бринкмана-Крамерса с учетом нормировки сечений перезарядки. Сечения взаимодействия с молекулами определялись согласно правилу аддитивности Брэгга, т.е. для молекул полагалось $\sigma(H_2) = 2\sigma(H)$ и $\sigma(N)_2 = 2\sigma(N).$

Расчет сечений ионизации и перезарядки ионов Не¹⁺ для мишеней Н, Не и N в широкой области энергий $E = 0.1 \div 100 \,\mathrm{MeB/h}$ показал, что сечения хорошо согласуются с экспериментальными данными и расчетами других авторов, и сечения ионизации на много порядков превосходят сечения перезарядки. Точность расчета сечений при энергии $E > 1 \,\mathrm{M}$ эВ/н составляет $20 \div 30 \,\%$. Вычисленные сечения при $E = 3.2 \,\mathrm{MigB/h}$ приведены в табл. 2, а в табл. 3 – времена жизни пучка при различных параметрах остаточного газа Бустера и предположении однокомпонентного состава остаточного газа в "холодных" арках, состоящего из молекулярного водорода H₂. Таким образом, основным процессом изменения зарядового состояния ионов He¹⁺ в Бустере является ионизация с образованием альфа-частиц, а вклад процессов перезарядки пренебрежимо мал. Из таблицы 3 видно, что при фиксированной температуре "холодной" части T_{cold} времена жизни для составов газа I и II практически одинаковы, а при разных значениях $T_{\rm cold}$ = 4.2 и 10 °K отличаются в 1.8 раз.

Если принять температуру в "холодной" части Бустера равной температуре жидкого гелия $T_{\rm cold} = 4.2$ °K, то среднее, вычисленное с точностью 30 %

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

Таблица 2. Значения сечений ионизации и перезарядки на атомах и молекулах остаточного газа, вычисленные для ионов He^{1+} при энергии $3.2 M \Im B/h$

Атом,	Сечения	Сечения	
молекула	ионизации, cm^2	перезарядки, см 2	
Н	$1.60 \cdot 10^{-18}$	$8.21 \cdot 10^{-25}$	
H_2	$3.20 \cdot 10^{-18}$	$1.64 \cdot 10^{-25}$	
He	$2.78 \cdot 10^{-18}$	$6.82 \cdot 10^{-24}$	
Ν	$2.10 \cdot 10^{-17}$	$1.22 \cdot 10^{-21}$	
N_2	$4.20 \cdot 10^{-17}$	$2.44 \cdot 10^{-21}$	

время жизни пучка совпадает с экспериментальным значением (1):

$$\tau_{\rm theor} = (1.74 \pm 0.50) \,\mathrm{c.}$$
 (4)

Причиной сокращения времени жизни частиц, циркулирующих в кольце, могло быть также возмущение их динамики полем пространственного заряда ионного пучка. Однако, как показывают оценки, сдвиги частот бетатронных колебаний под действием этого поля (Ласлеттовский сдвиг частот) на энергии инжекции и при интенсивности пучка $3 \cdot 10^{10}$ ионов He^{1+} не превышают $\Delta Q = 0.02$, что означает практически полное отсутствие влияния пространственного заряда, что подтверждается также фитированием кривых рис. 4 экспонентами с постоянным показателем.

Заключение. Выполнены первые эксперименты по измерению времени жизни пучка ионов He¹⁺ при энергии E = 3.2 МэВ/н в Бустере нового национального проекта NICA: $\langle \tau_{exp} \rangle = (1.32 \pm 0.06)$ с. При температуре в "холодной" части вакуумной камеры, равной температуре жидкого гелия $T_{cold} = 4.2$ °K, теоретическое значение согласуется с экспериментальной величиной: $\tau_{theor} = (1.74 \pm 0.50)$ с. Значения времени жизни пучка ионов He¹⁺, рассчитанные для постоянной температуры T_{cold} для обоих вариантов остаточного газа, близки друг к другу.

Основным процессом, определяющим время жизни ионного пучка, является ионизация ионов He¹⁺ при столкновениях с атомами и молекулами остаточного газа. Влияние ошибок фокусирующей системы Бустера и пространственного заряда пучка пренебрежимо мало, что является наиболее существенным результатом первого сеанса.

В заключительной части сеанса было проведено успешное ускорение ионов до энергии 100 МэВ/н [3], что показало возможность работы Бустера для полученного значения "вакуумного" времени жизни ионов при энергии инжекции.

$T_{\rm warm}$,	$P_{\rm warm},$	$n_{\rm warm},$	$T_{\rm cold},$	$P_{\rm cold},$	$n_{\rm cold},$	$\tau(I),$	τ (II),
K	нПа/нТорр	10^{7} cm^{-3}	°K	нТорр	10^{7} cm^{-3}	с	с
300	135/1.01	3.25	10	0.03	2.89	3.07	3.10
300	135/1.01	3.25	4.2	0.03	6.43	1.74	1.75

Таблица 3. Значения времени жизни τ пучка He^{1+} , вычисленные по формуле (2) для газовых составов I и II (табл. 1) для значений температуры, давления и плотности "геплой" и "холодной" частей Бустера

- G. Trubnikov, A. Butenko, E. Donets et al. (Collaboration), Project of The Nuclotron-Based Ion Collider Facility (NICA) at JINR, Proc. European Part. Accel. Conf. EPAC08, Genoa, Italy (2008).
- V.D. Kekelidze, R. Lednicky, V.A. Matveev, I.N. Meshkov, A.S. Sorin, and G.V. Trubnikov, The European Physical Journal A – Hadrons and Nuclei 52(8), 211 (2016).
- Итоги первого ускорительного сеанса Бустера Нуклотрона. Препринт ОИЯИ, издательский отдел ОИЯИ, Дубна (2021), (в печати).
- Г.И. Будкер, Я.С. Дербенев, Н.С. Диканский, В.И. Куделайнен, И.Н. Мешков, В.В. Пархомчук,

Д.В. Пестриков, А.Н. Скринский, Б.Н. Сухина, Атомная энергия **40**(1), 49 (1976).

- 5. Р. Хэфер, *Криовакуумная техника*, Энергоатомиздат, М. (1983).
- И. Ю. Толстихина, В. П. Шевелько, Письма в ЖЭТФ 94, 2 (2011) [I. Yu. Tolstikhina, V. P. Shevelko, JETP Lett. 94, 152 (2011)].
- И. Ю. Толстихина, И. И. Тупицын, С. Н. Андреев, В. П. Шевелько, ЖЭТФ **146**, 5 (2014)
 [I. Yu. Tolstikhina, I. I. Tupitsyn, S. N. Andreev, and V. P. Shevelko, JETP **119**, 1 (2014)].
- V. P. Shevelko, O. Rosmej, H. Tawara, and I. Yu. Tolstikhina, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. 37, 201 (2004).

Super-Penrose process for nonextremal black holes

O. B. Zaslavskii¹⁾

Institute of Astronomy, Kharkov V. N. Karazin National University, 61022 Kharkov, Ukraine

Institute of Mathematics and Mechanics, Kazan Federal University, 420008 Kazan, Russia

Submitted 4 March 2021 Resubmitted 4 March 2021 Accepted 9 May 2021

DOI: 10.31857/S123456782112003X

If two particles collide near a black hole, under cerain conditions the energy m_0 in the center of mass frame can become unbounded. This is the so-called Bañados– Silk–West (BSW) effect. Since the discovery of this effect, the main emphasis was made on extremal black holes. Moreover, it was a general belief that this effect takes place for extremal black holes only. Meanwhile, it turned out later that it is possible for nonextremal ones as well. In doing so, one should distinguish between m_0 and the Killing energy of debris at inifnity. For rotating neutral black holes, E is always finite. For charged black holes, say, the Reissner–Nordström (RN) one, E can be unbounded even without rotation. This is called the super-Penrose process (SPP). However, this was found for extremal black holes only.

In the present work, we show that the SPP is possible for static charged nonextremal black holes as well. It is possible also for uncharged ones if some external force acts on particles.

Let us consider the black hole metric

$$ds^{2} = -N^{2}dt^{2} + N^{-2}dt^{2} + r^{2}(d\theta^{2} + \sin^{2}\theta d\phi^{2}).$$
 (1)

Let particles 1 and 2 with masses $m_{1,2}$ move from infinity and collide in some point r_c . They produce particles 3 and 4. The energy m_0 in the center of mass frame

$$m_0^2 = -(m_1 u_1^{\mu} + m_2 u_2^{\mu})(m_1 u_{1\mu} + m_2 u_{2\mu}) =$$

= $m_1^2 + m_2^2 + 2m_1 m_2 \gamma,$ (2)

where $\gamma = -u_{1\mu}u^{2\mu}$ is the Lorentz factor of relative motion. It follows from the above equations that

$$\gamma = \frac{X_1 X_2 - \sigma_1 \sigma_2 P_1 P_2}{m_1 m_2 N^2},\tag{3}$$

where $X = E - q\varphi$, φ being the electric potential of a black hole, q particle's charge, P radial momentum.

The outcome of collision depends strongly on the relation between particles' parameters, say, the energy

and charge in the RN case. Then, we classify all particles depending on $X(r_+)$, where r_+ corresponds to the horizon. If $X(r_+) > 0$ is separated from zero, a particle is called usual. If $X(r_+) = 0$, a particle is called critical. If $X(r_+) = O(N_c)$, where $N_c \ll 1$, a particle is called near-critical (subscript "c" refers to the point of collision). We assume some nonzero aceleration a(r). For simplicity, we consider pure radial motion. We assume also that particle 1 is near-critical and particle 2 is usual. More precisely, we specify deviation from the criticality in the form

$$b_1(r_+) = E_1(1+\delta_1), \tag{4}$$

where $b = m \int_{r}^{\infty} dr' a(r')$,

$$\delta_1 = C_1 N_c + O(N_c^2) \tag{5}$$

with $C_1 < 0$ and in the point of collision r_c we have $N_c \ll 1$. Then, it turns out that in the vicinity of the horizon

$$X_1 = E_1 |C_1| N_c + O(N^2).$$
(6)

$$m_0^2 \approx \frac{2(X_2)_+ z}{N_c},$$
 (7)

where

789

$$z = E_1 C_1 - \sqrt{E_1^2 C_1^2 - m_1^2}.$$
 (8)

Particle 3 proves to be near-critical. It is the outcome of reaction escaping to inifnity. We obtained

$$X_3 \approx \frac{N_c}{2} (z + \frac{m_3^2}{z}) \approx |C_3| E_3 N_c.$$
 (9)

As a result,

$$E_3 \approx \frac{1}{2|C_3|} \left(z + \frac{m_3^2}{z} \right).$$
 (10)

If we choose $C_3 \to 0$, then formally $E_3 \to \infty$ becomes unbounded, as it should be for the SPP. Thus we see that for nonextremal black holes the SPP is indeed possible, provided the coefficient C_3 has to be small.

We showed that a nonextremal static black hole is pertinent to the SPP. In doing so, there is a restriction on a mass escaping to infinity but there is no

¹⁾e-mail: zaslav@ukr.net

upper bound on its energy. (This holds true as long as backreaction is negligible, so test particle approximation is valid.) Thus the SPP exists both for the extremal and nonextremal RN black hole. Moreover, all this consideration applies even to the Schwarzschild black hole, provided some force is exerted on the critical particle. This includes both any external force or electric repulsive force in the RN metric, if this force is small enough. The latter means that the force does not changes background significantly (that remains approximately Schwarzschildean) but affects particle's motion.

Usually, the electric charge is similar to rotation in black hole physics in many aspects. In particular, this concerns the BSW effect. However, now this similarity breaks down since the SPP does not exist for rotating neutral black holes but is possible for static charged ones. Now, this is seen not only for extremal black holes but also for nonextremal ones.

The key difference between rotating and static black holes and in the context under discussion lies in the role of the centrifugal barrier. One of two new particles after collision should be near-critical. In the first case, this barrier prevents the critical particle with very high energy from reaching infinity after collision that destroys the SPP reach infinity after collision in the first case that destroys the SPP both in the extremal and nonextremal cases. However, for static black holes (say, the RN one) there is no such a barrier at all. The results of the present work extends essentially the area of validity of high energy processes since astrophysically relevant black holes are nonextremal. It is of interest to understand, how the effects of such a kind can reveal themselves in the accretion discs around black holes and for the charge which is not electric but tidal.

Full text of the paper is published in JETP Letters journal. DOI: 10.1134/S0021364021120043

Влияние движения атомов и столкновений с антирелаксационным покрытием стенок газовых ячеек на форму и сдвиг резонанса когерентного пленения населенностей

А. Н. Литвинов¹⁾, И. М. Соколов¹⁾

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 195251 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 21 апреля 2021 г. После переработки 17 мая 2021 г. Принята к публикации 19 мая 2021 г.

На основе решения квантового кинетического уравнения для одноатомной матрицы плотности определена форма резонанса когерентного пленения населенностей в оптически тонких ячейках с антирелаксационным покрытием стенок. Обнаружено, что учет влияния движения и столкновений со стенками в случае невырожденных основного и возбужденного состояний приводит к существенному изменению формы спектра, появлению гребенки дополнительных резонансов, а также сдвигам "основного" резонанса когерентного пленения населенностей, которые оказываются немонотонно зависящими от размеров ячейки.

DOI: 10.31857/S1234567821120041

Целью настоящей работы является теоретический анализ особенностей формирования резонанса когерентного пленения населенностей (КПН) [1-4] в ячейках с антирелаксационным покрытием стенок. Использование эффекта КПН в таких ячейках рассматривается как один из возможных способов построения квантовых стандартов частоты [5-8]. При этом, как и при иных метрологических применениях явления КПН, очень важным является вопрос о форме и сдвиге частоты этого резонанса. В отличие от газовых ячеек с буферным газом, эффект КПН в которых исследовался достаточно детально в течении длительного времени (см., например, [9-14] и литературу там), случай ячеек с покрытием к настоящему моменту изучен существенно менее подробно. Пристальное внимание к таким ячейкам возникло после обнаружения того факта, что свойства антирелаксационного покрытия сохраняются в течение весьма продолжительного времени [15]. В настоящее время имеется ряд работ, в которых исследуются как непосредственно свойства таких покрытий, так и прецизионная спектроскопия атомарных газов, находящихся в соответствующих ячейках [16–25]. Однако ряд важных аспектов остается неисследованным. Например, совершенно не изучено влияние конечных размеров ячеек на величины сдвигов КПН резонансов.

Эффект КПН обычно регистрируется по ослаблению поглощения излучения накачки при достижении условий двухфотонного резонанса. В оптически тонкой среде, рассмотрению которой посвящена данная работа, поглощение пропорционально заселенности возбужденных состояний атомов. Поэтому мы можем ограничиться анализом состояния атомного ансамбля, проводимым на основе решения системы квантовых кинетических уравнений для одноатомной матрицы плотности. Такой подход многократно апробирован для ячеек с буферным газом [9, 10]. Имеется также несколько работ, в которых он использовался при описании явления КПН [26–28] и двойного радиооптического резонанса в ячейках с покрытием [29].

При решении системы квантовых кинетических уравнений мы сделаем ряд приближений, которые, по нашему мнению, не являются критичными для обнаруженных нами физических особенностей эффекта КПН. Мы будем рассматривать модельную четырехуровневую систему (рис. 1). Мы покажем, что учет уже одного дополнительного возбужденного уровня существенно изменяет характер резонанса КПН по сравнению с трехуровневой Л-схемой. Мы ограничимся одномерным случаем, когда границы ячейки перпендикулярны направлению распространения волны накачки. Концентрацию атомов считаем малой настолько, чтобы пренебречь коллективными эффектами, вызванными резонансным диполь-дипольным взаимодействием [30-32] и использовать приближение оптически тонкой среды. Поле накачки бихроматическое, ширина каждой спектральной компоненты предполагается мень-

¹⁾e-mail: andrey.litvinov@mail.ru; ims@is12093.spb.edu



Рис. 1. Схема энергетических уровней рассматриваемых модельных четырехуровневых атомов

ше естественной ширины атомного перехода. Первая компонента настроена в точный резонанс с переходом $|1\rangle \leftrightarrow |3\rangle$, отстройка Δ_2 может изменятся. Частоты Раби двух полей будем считать равными $\Omega_1 = \Omega_2 = \Omega$. При этом отличие от трехуровневой схемы, для которой в этом случае световой сдвиг резонанса КПН отсутствует, проявится наиболее ярко.

Антирелаксационное покрытие предполагается идеальным, столкновения с которым не изменяют внутреннего состояния атома [33]. Это приближение достаточно хорошо выполняется для используемых в настоящее время покрытий, поскольку они допускают $10^4 - 10^6$ столкновений без релаксации атомного спина [19, 24]. Что касается скорости атомов, то ее изменение при отражении существенно зависит от характера взаимодействия атома с поверхностью. Если процесс отражения сопровождается адсорбцией атома на сравнительно длительное время, то скорость отлетающего от поверхности атома не зависит от начальной и определяется температурой стенки. Происходит полная термализация при однократном отражении. Такая ситуация типична для парафиновых покрытий. Для некоторых материалов, например, для покрытий типа OTS (Octadecyltrichlorosilane) характерное время адсорбции в несколько раз меньше, чем для парафинов [18, 19]. Это означает, что для них вероятность полной термализации будет существенно меньше. Отражения с малым изменением величины скорости будут более вероятны. При отсутствии адсорбции возможно и упругое отражение.

При теоретическом описании обычно используют два предельных случая – предположение о полной термализации (см. [17, 25]) и модель абсолютно упругого отражения [16, 26, 33]. Первое предположение успешно использовалось для описания результатов экспериментов по наблюдению эффекта электромагнитно индуцированной прозрачности [17]. В данной работе мы ограничимся моделью упругих столкновений. Данная модель давала хорошее согласие с экспериментом по ширине и амплитуде резонанса КПН [16]. Сравнение ее предсказаний с результатами экспериментов позволит судить об относительной роли упругих столкновений для разных конкретных типов антирелаксационных покрытий.

В этой работе вместо решения системы дифференциальных уравнений с граничными условиями, как это делалось, например, в [17, 25, 26], мы решаем динамическую задачу. При сделанных приближениях временная эволюция внутреннего состояния атома на каждом этапе его свободного пролета от стенки до стенки описывается матричной экспонентой. Конечное состояние при ударе о стенку является начальным для следующего этапа. Это позволяет нам следить за эволюцией каждого отдельного атома в ансамбле. Полная населенность возбужденных состояний всех атомов получается усреднением по их начальному однородному пространственному распределению и распределению Максвелла по скоростям.

На рисунке 2 показано изменение суммарной населености возбужденных состояний атома, который в момент включения накачки находился посередине ячейки и двигался со скоростью $v_{\rm at} = 0.04 v_T (v_T$ наиболее вероятная скорость). Расчеты проведены для ячейки длиной $L = 20 \,\mathrm{cm}, \,\Omega = 2 \cdot 10^5 \,\mathrm{c}^{-1}.$

Две кривые соответствуют двум начальным состояниям атома. Синяя пунктирная получена для атома, находящегося на одном из подуровней основного состояния, красная сплошная – некогерентной суперпозиции нижних состояний. Различие кривых наблюдается только на начальном этапе эволюции. По истечении характерных времен релаксации текуцее состояние атома не зависит от начального. Этот рисунок демонстрирует несколько важных результатов. Основной из них состоит в том, что столкновения со стенками влияют на спектроскопические свойства атомного ансамбля даже в идеальном случае, когда они происходят без модификации внутреннего состояния атома. При изменении направле-


Рис. 2. (Цветной онлайн) Динамика суммарной населенности возбужденных состояний атома. Расчет проведен для $\omega_{43} = 400 \text{ MF}$ ц, $v_{at} = 0.04 v_T$, L = 20 см, $\Omega = 2 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$. В момент включения излучения накачки атом находился посередине ячейки. Две кривые соответствуют двум различным начальным состояниям. Сплошная соответствует $\rho_{11} = 0.5$, $\rho_{22} = 0.5$, пунктирная – $\rho_{11} = 1$, $\rho_{22} = 0$

ния движения при столкновении в системе координат атома имеет место скачкообразное изменение частоты полей накачки. Это приводит к тому, что после каждого удара о стенку начинается переходной процесс установления равновесного внутреннего состояния атома. Завершится ли этот процесс до следующего столкновения, зависит от многих факторов – скорости атома, размеров ячейки, интенсивности внешнего поля, скоростей спонтанного распада и т.д.

Кривые на рис. 2 рассчитаны для таких условий, для которых переходные процессы успевают закончится, и к моменту следующего удара атом находится в равновесном состоянии. При этом очевидно, что в атомном ансамбле существует группа быстрых атомов, для которых релаксация не успевает произойти. Более того, для многоуровневой системы даже для одного и того же атома равновесные значения когерентностей для одних переходов могут успевать установиться, для других – нет. Мы имеем дело со сложной физической системой, находящейся в неравновесном состоянии. Различные факторы, определяющие спектры резонансов, действуют одновременно и могут усиливать или ослаблять друг друга.

Вторым важным результатом является зависимость устанавливающегося равновесного состояния от направления движения атомов. Горизонтальные участки, соответствующие этому состоянию, на четных и нечетных интервалах различаются по высоте. Это означает, что атомы, движущиеся в противоположных направлениях с одинаковой по величине скоростью, дают разный вклад в атомное возбуждение и, как следствие, в эффект КПН. Наши расчеты по-

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

казывают, что величина этого различия существенно зависит от расстояния между возбужденными подуровнями ω_{43} . При увеличении этого расстояния различие уменьшается. В модельном случае трехуровневой схемы оно полностью отсутствует. Оно также отсутствует для вырожденного основного состояния, когда $k_1 = k_2$.

Наиболее заметно различие вкладов атомов, двигающихся в противоположных направлениях, при высоких скоростях, когда доплеровское смещение частоты становится соизмеримо с частотой перехода ω_{43} . При малых отстройках $\Delta_2 \ll \omega_{43}$ атомы, для которых $v_z = -\omega_{43}/k_1 \approx -\omega_{43}/k_2$, резонансно возбуждаются не на уровень $|3\rangle$, а на более высокий энергетический уровень $|4\rangle$. При этом атомы, двигающиеся в противоположном направлении, вклада в формирование КПН резонанса практически не дают.

Возможность возбуждения этого отстроенного перехода движущимися атомами приводит для невырожденного основного состояния, когда $k_1 \neq k_2$, к существенной модификации спектра КПН. Это хорошо демонстрируется рис. 3, на котором показаны спектры КПН для различных размеров ячеек при двух интенсивностях излучения накачки.

Для сравнительно низких интенсивностей $\Omega = 2 \cdot 10^5 \, \mathrm{c}^{-1}$ (рис. 3, верхний) мы имеем целую гребенку резонансов. Наряду с "основным" пиком, центрированным вблизи нулевой двухфотонной отстройки, наблюдается несколько дополнительных квазиэквидистантных резонансов приблизительно одинаковой ширины.

Появление дополнительного КПН резонанса, обусловленного группой быстро движущихся атомов, резонансно возбуждаемых на переходах $|1\rangle \leftrightarrow |4\rangle$ и $|2\rangle \leftrightarrow |4\rangle$, очевидно, должно наблюдаться и для безграничной среды. Оно связано с тем, что при $k_1 \neq k_2$, помимо доплеровского сдвига однофотонных резонансов, имеет место сдвиг двухфотонного перехода Δ_D . Величина этого сдвига определяется различием волновых чисел $\Delta k = k_1 - k_2$ двух спектральных компонент поля накачки $\Delta_D = \omega_{43} \Delta k/k$, где $k = k_1 \approx k_2$. Именно на этой сдвинутой частоте и появляется дополнительный КПН резонанс в случае безграничной среды.

В случае ячеек с покрытием мы имеем серию резонансов, положение которых зависит от расстояния *L* между стенками

$$\Delta_n = \frac{\pi n}{kL} \omega_{43}; \ n = 0, \pm 1, \pm 2...$$
 (1)

Сдвиги (1) обратно пропорциональны размеру и прямо пропорциональны частоте ω_{43} . Отрицатель-



Рис. 3. (Цветной онлайн) Спектр КПН для ячеек разного размера: (верхний) $\Omega = 2 \cdot 10^5 \,\mathrm{c}^{-1}$, (нижний) $\Omega = 5 \cdot 10^5 \,\mathrm{c}^{-1}$. Расчеты проведены для $\omega_{43} = 400 \,\mathrm{M}$ Гц, $T = 50 \,^{\circ}$ С, $\Delta k = 1.43 \,\mathrm{cm}^{-1}$, $\lambda = 2\pi/\Delta k$

ным *n* соответствуют пики с отрицательной отстройкой. Их амплитуды очень малы, но видны на некоторых кривых на вставке рис. 3, верхний.

Появление гребенки пиков объясняется тем, что в системе отсчета, связанной с каждым атомом, внешние поля являются модулированными по частоте. Вместо анализа динамики внутреннего состояния движущегося атома в бихроматическом поле мы можем рассмотреть эволюцию неподвижного атома в полихроматическом поле. Частота модуляции определяется скоростью атома и размером ячейки $\omega_{\rm mod} = 2\pi/T = v_{at}\pi/L$. Это модулированное поле можно разложить в ряд Фурье. Учитывая, что скорость атомов, обуславливающих эти резонансы, имеет величину порядка $v_z \approx -\omega_{43}/k$, получаем приведенную выше формулу.

Амплитуды возникающих пиков сложным образом зависят от их номера. Одним из факторов, влияющих на эту амплитуду, является амплитуда Фурьегармоники поля, определяющая соответствующий резонанс. Эти амплитуды можно рассчитать, совершив адиабатическое исключение оптических когерентностей. Тогда в уравнении для низкочастотной когерентности основного состояния для атома, летящего в одну сторону, сдвиг равен $+\Delta k v_z$, а в противоположную $-\Delta k v_z$. В системе отсчета, связанной с атомом, это соответствует модуляции частоты внешнего эффективного поля, возбуждающего эту низкочастотную когерентность. Амплитуды соответствующих компонент равны

$$A_{\pm n} = -\frac{i}{2} \frac{1 - e^{-i(\Delta kL - n\pi)}}{\Delta kL - n\pi} - \frac{i}{2} \frac{1 - e^{-i(\Delta kL + n\pi)}}{\Delta kL + n\pi}.$$
 (2)

Заметим, что эти амплитуды не зависят от скорости атома. При целых $m = \Delta k L / \lambda$ максимальное значение модуля коэффициента Фурье достигается для n = m, причем величина $|A_n|$ не зависит от n. Помимо $|A_n|$, амплитуды "дополнительных" резонансов КПН зависят и от других параметров, например, от упоминавшихся выше температуры и расстройки ω_{43} . Имеется также очень сильная зависимость от знака *n*, несмотря на то, что амплитуды компонент Фурье $|A_n|$ от знака *n* не зависят. В области отрицательных отстроек амплитуды дополнительных пиков очень малы. Сильная асимметрия связана с тем, что вклад в формирование этих дополнительных пиков дают только атомы, двигающиеся против направления волнового вектора лазерных полей. Доплеровский сдвиг первого поля больше, поскольку $k_1 > k_2$. Чтобы обеспечить в таких условиях двухфотонный резонанс, частота второго поля должна быть больше, чем у первого. Таким образом, все дополнительные двухфотонные резонансы эффективно наблюдаются только при положительных *n*.

При повышении интенсивности накачки до $\Omega = 5 \cdot 10^5 \, {\rm c}^{-1}$ (рис. 3, нижний) ширина как основного, так и дополнительных резонансов КПН увеличивается. Это приводит к их перекрыванию, и мы наблюдаем достаточно сложную форму спектра двухфотонного резонанса. Помимо искажения формы имеет место и сдвиг максимума, что особенно важно при использовании эффекта КПН для задач стандартизации частоты. Особенно ярко модификация спектра проявляется для ячеек, размеры которых соизмеримы или больше длины волны радиочастотного перехода. Для малых ячеек в силу большой частоты модуляции сдвиги (1) велики и искажение "основного" пика КПН незначительно.

Модуляция частоты полей накачки проявляется и для атомов, двигающихся с малыми скоростями и возбуждаемых на переходах $|1\rangle \leftrightarrow |3\rangle$ и $|2\rangle \leftrightarrow |3\rangle$. Эти атомы дают основной вклад в резонанс, центрированный вблизи нулевой двухфотонной отстройки. При этом парциальный вклад любой скоростной группы таких атомов имеет сложную спектральную зависимость. В качестве примера на рис. 4 показаны спектральные зависимости заселенности возбужденных состояний атомов, двигающихся со скоростью $v_{\rm at} = 0.1v_T$. Двум кривым соответствуют два разных размера ячейки $L = \lambda$ и $L = 1.5\lambda$.



Рис. 4. (Цветной онлайн) Парциальный вклад в спектр КПН атомов, двигающихся с заданной скоростью. Расчет проведен для $\omega_{43} = 400 \text{ M}$ Гц, $v_{\text{at}} = 0.1 v_T$, $\Omega = 2 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$. Сплошная кривая соответствует $L = 1.5\lambda$, пунктирная – $L = \lambda$

Здесь мы также наблюдаем сложную спектральную структуру, состоящую из ряда хорошо различимых спектральных компонент, частоты которых определяются скоростью атомов и размерами ячейки $\omega_n = 2\pi n/T = nv_{\rm at}\pi/L$. Для медленно движущихся атомов картина более симметричная, различие резонансов, соответствующих разным знакам n, мало. Амплитуды отдельных компонент определяются соотношением (2). При рассмотренных размерах часть амплитуд равна нулю. Так для $L = \lambda$ отсутствуют резонансы, соответствующие $n = 0, n = \pm 4..., для L = 1.5\lambda - n = \pm 1, n = \pm 5....$

Наблюдаемый спектр КПН определяется суммой вкладов атомов, двигающихся с разными скоростями. При таком сложении спектральный профиль КПН сглаживается, но сдвиг резонанса сохраняется в силу упомянутого выше различия влияния атомов, двигающихся в противоположных направлениях. Зависимость сдвига максимума резонанса (минимума населенности возбужденных состояний) от размеров ячейки для двух интенсивностей полей накачки показана на рис. 5. Сдвиг стремится к нулю при уменьшении размеров ячейки, а при их увеличении выхо-

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021



Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость величины сдвига максимума резонанса КПН от размеров ячейки. Расчеты проведены для $\omega_{43} = 800 \text{ M}\Gamma$ ц, $T = 50 \degree$ C, $k_1 - k_2 = 1.43 \text{ см}^{-1}$. Сплошная кривая соответствует $\Omega_1 = \Omega_2 = 2 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$, пунктирная $\Omega_1 = \Omega_2 = 5 \cdot 10^5 \text{ c}^{-1}$

дит на значение, характерное для безграничной среды. При этом наблюдается немонотонное поведение с некоторой квазипериодичностью с характерным масштабом, равным длине волны радиочастотного перехода основного состояния.

Такое поведение может быть объяснено на основе анализа характера частотной модуляции полей, вызывающих КПН резонанс. Спектральная компонента $\omega_n = n v_{\rm at} \pi / L$ с n = 0 не вызывает какоголибо сдвига. Сдвиг обусловлен различием характера резонансов, соответствующих разным знакам n, т.е. по существу с отмеченным выше разным вкладом атомов, двигающихся в противоположных направлениях. Это различие невелико, поэтому наличие или отсутствие компоненты с n = 0 оказывается существенным. Расчет по формуле (2) показывает, что при размерах, кратных целому числу длин волн λ , т. е. при $\Delta kL = 2n\pi, n = 1, 2...,$ в спектре Фурье отсутствует компонента на нулевой частоте (см., например, синюю пунктирную кривую на рис. 4). Для размеров, кратных полуцелому числу λ , эта компонента имеется (красная сплошная на рис. 4). Таким образом, максимальные сдвиги наблюдаются при $\Delta kL = 2n\pi, n = 1, 2...,$ минимальные – при $\Delta kL = (2n-1)\pi$, n = 1, 2..., что и соответствует результатам, показанным на рис. 5.

В заключение отметим, что анализ эффекта КПН проведен нами для модельной четырехуровневой системы при использовании ряда приближений. Использование модели упругого отражения от покрытия ограничивает возможности количественного сравнения с экспериментом. Однако и искажения формы спектра и сложная зависимость сдвига резонанса от размеров системы обусловлены влиянием таких факторов, которые имеют место для реальных атомарных газов в ячейках. Это движение атомов и изменение направления этого движения, вызванное столкновениями со стенками, наличие нескольких атомных возбужденных состояний, а также невырожденность основного и возбужденного состояний. По этой причине мы считаем, что предсказываемые в данной работе эффекты необходимо учитывать во всех потенциальных приложениях эффекта КПН, в которых используются газовые ячейки с антирелаксационным покрытием стенок.

Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2020-0024). Результаты работы были получены с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (http://www.spbstu.ru).

- G. Alzetta, A. Gozzini, L. Moi, and G. Orriols, Nuovo Cim. B 36(1), 5 (1976).
- E. Arimondo and G. Orriols, Lett. Nuovo Cimento 17, 333 (1976).
- H.R. Gray, R. M. Whitley, and C. R. Stroud, Jr., Opt. Lett. 3, 218 (1978).
- Б.Д. Агапьев, М.Б. Горный, Б.Г. Матисов, Ю.В. Рождественский, УФН 163, 1 (1993).
- J. Vanier and C. Audoin, *The Quantum Physics of Atomic Frequency Standards*, Adam Higler, Bristol (1989), 567 c.
- С. А. Зибров, В. Л. Величанский, А. С. Зибров, А. В. Тайченачев, В. И. Юдин, Письма в ЖЭТФ 82, 534 (2005).
- S.A. Zibrov, I. Novikova, D.F. Phillips, R.L. Walsworth, A.S. Zibrov, V.L. Velichansky, A. V. Taichenachev, and V.I. Yudin, Phys. Rev. A 81, 013833 (2010).
- S. Khripunov, D. Radnatarov, and S. Kobtsev, Proc. SPIE **9378**, 93780A (2015).
- A.V. Taichenachev, V.I. Yudin, R. Wynands, M. Stahler, J. Kitching, and L. Hollberg, Phys. Rev. A 67, 033810 (2003).
- G. Kazakov, B. Matisov, I. Mazets, G. Mileti, and J. Delporte, Phys. Rev. A 72, 063408 (2005).
- S. Brandt, A. Nagel, R. Wynands, and D. Meschede, Phys. Rev. A 56, R1063 (1997).
- S. Knappe, R. Wynands, J. Kitching, H.G. Robinson, and L. Hollberg, J. Opt. Soc. Am. B 18, 1545 (2001).

- S. Knappe, P.D.D. Schwindt, V. Gerginov, V. Shah, L. Liew, J. Moreland, H.G. Robinson, L. Hollberg, and J. Kitching, J. Opt. A 8, 318 (2006).
- M. Merimaa, T. Lindvall, I. Tittonen, and E. Ikonen, J. Opt. Soc. Am. B 20, 273 (2003).
- D. Budker, L. Hollberg, D.F. Kimball, J. Kitching, S. Pustelny, and V.V. Yashchuk, Phys. Rev. A 71, 012903 (2005).
- E. Breschi, G. Kazakov, C. Schori, G. Di Domenico, G. Mileti, A. Litvinov, and B. Matisov, Phys. Rev. A 82, 063810 (2010).
- K. Nasyrov, S. Gozzini, A. Lucchesini, C. Marinelli, S. Gateva, S. Cartaleva, and L. Marmugi, Phys. Rev. A 92, 043803 (2015).
- M. A. Hafiz, V. Maurice, R. Chutanil, N. Passilly, C. Gorecki, S. Guerande, E. de Clercq, and R. Boudot, J. Appl. Phys. **117**, 184901 (2015).
- H. Chi, W. Quan, J. Zhang, L. Zhao, and J. Fang, Applied Surface Science 501, 143897 (2020).
- S. J. Seltzera and M. V. Romalis, J. Appl. Phys. 106, 114905 (2009).
- M. V. Balabas, K. Jensen, W. Wasilewski, H. Krauter, L. S. Madsen, J. H. Muller, T. Fernholz, and E. S. Polzik, Opt. Express 18, 5825 (2010).
- 22. K. A. Barantsev, S. V. Bozhokin, A. S. Kuraptsev, A. N. Litvinov, and I. M. Sokolov, JOSA B 38, 1613 (2021).
- A. Krasteva, R. K. Nasyrov, N. Petrov, S. Gateva, S. Cartaleva, and K. A. Nasyrov, Optoelectron. Instrument. Proc. 54, 307 (2018).
- W. Li, M. Balabas, X. Peng, S. Pustelny, A. Wickenbrock, H. Guo, and D. Budker, J. Appl. Phys. **121**, 063104 (2017).
- 25. К.А. Насыров, Автометрия 52, 85 (2016).
- G. Kazakov, B. Matisov, A. Litvinov, and I. Mazets, J. Phys. B 40, 3851 (2007).
- G. A. Kazakov, A.N. Litvinov, B.G. Matisov, V.I. Romanenko, L. P. Yatsenko, and A. V. Romanenko, J. Phys. B 44, 235401 (2011).
- M. Klein, M. Hohensee, D. F. Phillips, and R. L. Walsworth, Phys. Rev. A 83, 013826 (2011).
- A. Litvinov, G. Kazakov, B. Matisov, and I. Mazets, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 41, 125401 (2008).
- 30. И.М. Соколов, Письма в ЖЭТФ 106, 317 (2017).
- S. E. Skipetrov and I. M. Sokolov, Phys. Rev. B 98(6), 064207 (2018).
- A. S. Kuraptsev and I. M. Sokolov, Phys. Rev. A 91(5), 053822 (2015).
- H. M. Goldenberg, D. Kleppner, and N. F. Ramsey, Phys. Rev. **123**, 530 (1961).

Микродоменная инженерия в волноводных и слоистых структурах на основе сегнетоэлектриков для применений в элементах фотоники (Миниобзор)

Т. Р. Волк⁺, Я. В. Боднарчук⁺¹⁾, Р. В. Гайнутдинов⁺, Л. С. Коханчик^{*}, С. М. Шандаров[×]

⁺Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова Федеральный научно-исследовательский центр "Кристаллография и фотоника" РАН, 119333 Москва, Россия

* Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, 142432 Черноголовка, Россия

[×] Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, 634050 Томск, Россия

Поступила в редакцию 22 апреля 2021 г. После переработки 29 апреля 2021 г. Принята к публикации 30 апреля 2021 г.

Представлен обзор результатов исследований сегнетоэлектрических нано- и микродоменных структур, сформированных в оптических волноводах на LiNbO₃. В волноводном сэндвиче LNOI (LiNbO₃on-insulator) полярной (Z) ориентации полем зонда AFM записаны нанодоменные структуры заданной конфигурации и исследованы их свойства. На доменных стенках обнаружена статическая проводимость $\sigma_{\rm DW}$. Ее оценка выполнена с помощью оригинального метода, основанного на характеристиках AFM записи доменов. Найденная величина $\sigma_{\rm DW} \approx 8 \cdot 10^{-4} ({\rm OM} \cdot {\rm cm})^{-1}$ не менее, чем на 12 порядков, превышает объемную проводимость LiNbO₃. В планарных оптических волноводах He: LiNbO₃ и Ti: LiNbO₃, сформированных на неполярных (X и Y) поверхностях кристалла электронно-лучевым методом,записаны микродоменные решетки с заданными периодами. Исследования нелинейно-оптического преобразования излучения в записанных структурах показали, что оптимальные характеристики волноводного преобразования во вторую гармонику достигаются при соответствии глубины записанных доменов T_d толщине волноводного слоя. Величина T_d задается ускоряющим напряжением (U) SEM.

 ${\rm DOI:}\ 10.31857/S1234567821120053$

Введение. Сегнетоэлектрические доменные структуры лежат в основе ряда практических применений. В настоящее время можно выделить два основных направления работ в этой области: исследования эффекта проводимости доменных стенок (domain-wall conductivity – DWC) и исследования нелинейного преобразования оптического излучения на доменной структуре в режиме фазового квазисинхронизма (QPM).

Эффект повышения проводимости на сегнетоэлектрической доменной стенке, предсказанный в 1973 г. [1], был подтвержден экспериментально сравнительно недавно [2]. Потенциальные практические возможности этого эффекта и необходимость переосмысления некоторых базовых положений физики сегнетоэлектричества стимулировали резкий рост исследований, нашедший отражение в нескольких обзорах [3–6]. Проводимость доменной стенки обусловлена ее наклоном относительно полярной оси и, как следствие, возникновением на стенке заряда экранирования с плотностью $\sigma_{\rm DW} = 2P_s \sin \theta$ (где P_s – спонтанная поляризация, θ – угол наклона стенки). Для количественной иллюстрации этого эффекта можно упомянуть, что экспериментально заданный угол $\theta = 1^0$ в кристалле LiNbO₃ обеспечил величину $\sigma_{\rm DW} \approx 0.02 \, ({\rm Om}^{-1} \cdot {\rm cm}^{-1})$ [7], которая не менее, чем на 12 порядков, превышает проводимость кристалла. Заметим, что даже в случае $\theta = 0^0$ локальные несовершенства реальной доменной стенки могут привести к появлению заметной DWC [8]. Сочетание высокой проводимости доменной стенки с фундаментальным свойством – контролируемым пространственным смещением под действием приложенного поля – позволяет рассматривать ее в качестве электрически управляемого проводящего наноразмерного слоя ("нанопровода"). В этом контексте была сформулирована концепция "наноэлектроники на доменных стенках" ("DW nanoelectronics" [4]).

Принцип преобразования частоты оптического излучения в режиме QPM на сегнетоэлектрической

¹⁾e-mail: deuten@mail.ru

доменной структуре основан на зависимости знака нелинейного коэффициента d_{ijk} от направления спонтанной поляризации P_s . Для реализации нелинейного преобразования во вторую гармонику (SH) период Λ модуляции 180⁰-доменной структуры должен отвечать условию [9]

$$\Lambda = m(2l_c) = \frac{m\lambda}{[2(n_{2\omega} - n_{\omega})]},\tag{1}$$

где l_c – длина когерентности, λ – длина волны фундаментального излучения, n_{ω} и $n_{2\omega}$ – показатели преломления фундаментальной и SH волн соответственно, $m = 1, 3, \ldots$ Квазисинхронное нелинейное преобразование обладает рядом преимуществ по отношению к режиму фазового синхронизма, прежде всего отсутствием принципиальных ограничений на спектральную область преобразуемого излучения. В кристалле LiNbO₃ для QPM преобразования излучения в SH в практически интересном диапазоне ближнего IR требуется Λ порядка 3 мкм.

Таким образом, сегнетоэлектрические нано- и микродоменные структуры востребованы задачами фотоники. Структуры такого масштаба могут быть изготовлены методами атомно-силовой микроскопии (AFM) и электронно-лучевой (EB) литографии. В связи с прогрессом интегральной оптики актуальной задачей становится создание этих структур в оптических волноводных слоях. Для нелинейного преобразования излучения в оптических схемах на основе LiNbO₃, использующих волноводные моды с максимальной компонентой светового поля, параллельной поверхности подложки, предпочтительными являются неполярные (Х- и У-) поверхности кристалла. Следует отметить, что впервые переполяризация сегнетоэлектрика под действием электрического поля, приложенного к неполярной поверхности кристалла, была продемонстрирована в [10]. Тот же результат достигается при приложении поля зонда AFM к неполярной поверхности [11].

Подавляющее большинство работ по исследованию AFM и EB записи доменов, QPM преобразованию излучения и проводимости доменных стенок выполнено в LiNbO₃, который является одним из базовых материалов нелинейной и интегральной оптики. Доменные структуры, изготовленные в LiNbO₃ различными методами, устойчивы в реальном времени,что привлекательно для практических целей и экспериментальных исследований.

Статья состоит из двух частей, иллюстрированных рис. 1a и b.

В первой части статьи обсуждается запись доменов полем зонда AFM в волноводном сэндвиче



Рис. 1. (Цветной онлайн) Схемы записи доменов полем зонда AFM в волноводе LNOI на полярной (+Z) поверхности LiNbO₃ (a), и электронным лучом в оптическом планарном волноводе на неполярной (X, Y) поверхности (b); (c) – схема домена,записанного зондом AFM, в проекции на неполярную поверхность; $P_{\rm up}$ и $P_{\rm down}$ – исходное и обращенное направление P_s ; вертикальные полосы – доменные стенки

LNOI (LiNbO₃-on-insulator) [12–15]. LNOI, схематически изображенный на рис. 1а, скомпонован из двух монокристаллических пластин LiNbO₃ Z-среза различной толщины, разделенных слоями SiO₂ и металла; волноводный эффект в верхней (тонкой) пластине достигается благодаря соотношению $n_{\rm SO}$ < $n_{\rm LN}$ (где $n_{\rm SO}$ и $n_{\rm LN}$ – показатели преломления SiO₂ и LiNbO₃ соответственно). AFM запись доменов производится приложением напряжения $U_{\rm tip}$ между поверхностью (001) и слоем металла. Домен, зародившийся в точке контакта зонда с поверхностью, аксиально растет вдоль оси Z.

Во второй части обсуждается ЕВ запись доменов в оптических волноводах He:LiNbO₃ и Ti:LiNbO₃, сформированных на неполярных (Х- и У-) поверхностях кристалла LiNbO₃ [16–20]. При электронном облучении неполярной поверхности (рис. 1b) домен, зародившийся в точке облучения, растет планарно в тонком слое вдоль оси Z. Движущей силой является тангенциальная составляющая E_Z поля пространственного заряда E_{sc} , индуцированного EB в точке облучения; толщина слоя определяется ускоряющим напряжением U. При пошаговом перемещении луча вдоль оси Z продольные домены, зародившиеся в соседних точках облучения, коалесцируют, образуя непрерывный протяженный домен. При двумерном пошаговом перемещении луча вдоль осей Z и X(Y)записывается 2D доменная решетка с периодом Λ , заданным расстоянием между точками облучения в направлении, нормальном оси Z.

При AFM и EB записи преобладает фронтальный рост доменов вдоль полярной оси, характерный для переполяризации под действием высоких полей [21]. Об этом свидетельствуют малый угол наклона до-



Рис. 2. (Цветной онлайн) Доменная решетка, записанная в LNOI методом растровой литографии; спонтанная поляризация P_s нормальна плоскости рисунка. (a), (b) – Фазовое и амплитудное PFM изображения решетки; темные и светлые полосы на рис. (a) – 180° домены, нормальные плоскости рисунка; темные линии на рис. (b) – границы доменов; квадратом выделена область измерений тока методом C-AFM; (c) – C-AFM карта записанной решетки; I_{max} соответствуют доменным границам; (d) – профили сечения сигнала тока в области, выделенной квадратом на рис. (b), в интервале $U_{\text{tip}} = (2.5-5)$ В, где цифрам от 1–6 соответствует 5.0; 4.5; 4.0; 3.5; 3.0; 2.5 В соответственно; (e) – зависимость $I_{\text{peak}}(U_{\text{tip}})$, пунктирной линией показана аппроксимация, где I_{peak} – амплитудные значения токов на рис. (d); (f) – изображение решетки, полученное методом SHG на отражение (темные полосы – записанные домены)

менных стенок относительно ос
и ${\cal Z}$ и иглообразная форма доменов.

Заключая это краткое введение, заметим, что обсуждение процессов формирования доменов при AFM и EB записи в рамках классической модели переполяризации [21] невозможно по ряду причин, в первую очередь из-за неоднозначного подхода к оценке величины поля под зондом AFM и поля E_{sc} , индуцированного в области электронного облучения. Поэтому обсуждение происходящих процессов носит преимущественно качественный характер. Тем не менее, в обоих случаях были выявлены определенные закономерности формирования доменов, позволяющие записать структуры с заданными характеристиками.

Образцы и экспериментальные методики. В этом разделе кратко описаны образцы и используемые AFM и EB режимы записи доменных структур; детали приведены в соответствующих разделах.

Запись доменов полем зонда AFM в волноводном сэндвиче LNOI схематически представлена на рис. 1а. В исследуемых образцах толщина волноводного слоя LiNbO₃ 300, 500 и 700 нм; толщина SiO₂ 1.4 мкм; толщина Cr/Au пленки между SiO₂ и LiNbO₃, используемой в качестве электрода, 100 нм; общий размер образцов $X \times Y \times Z = 10 \times 9 \times 0.5$ мм³. Домены и доменные структуры записывались методами векторной литографии и растровой литографии с графическим шаблоном путем приложения напряжения Utip между проводящим зондом, находящимся в контакте с полярной (+Z) поверхностью, и пленкой металла. Записанные структуры исследовались методом микроскопии пьезоотклика (PFM); проводимость доменных стенок измерялась в режиме проводящей AFM (C-AFM) (детали методик можно найти в [22]). Эксперименты выполнены с использованием зондовой лаборатории Ntegra Prima с расширенным диапазоном постоянного напряжения.

ЕВ запись доменов исследовалась в планарных оптических волноводах He:LiNbO₃, изготовленных имплантацией He⁺ на подложках LiNbO₃ X-среза, и волноводах Ti:LiNbO₃, изготовленных методом высокотемпературной диффузии Ti на подложках LiNbO₃ Y-среза. Детали метода EB записи доменов на неполярной поверхности сегнетоэлектриков, впервые реализованного в [23], можно найти в основных публикациях по этой проблеме [24–29]. В He:LiNbO₃ и Ti:LiNbO₃ были записаны доменные решетки с периодами $\Lambda = 4$ и 6.5 мкм соответственно. Запись выполнена в интервале ускоряющих напряжений U = 5-25 кВ при токе е-луча I = 0.1 нА. Эксперименты проводились в растровом электрон-

ном микроскопе JSM-840A со встроенной программой NanoMaker, обеспечивающей двумерное сканирование поверхности кристалла электронным лучом согласно заданному шаблону и контроль дозы облучения. Для исследования записанных структур использовался комплекс методик: химическое травление, метод микроскопии пьезоотклика (PFM), микроскопия SHG на пропускание [30] с использованием Nd-YLF лазера ($\lambda = 1053$ нм, 10 нс), конфокальная микроскопия SHG на отражение [19] с использованием Ti-sapphire лазера ($\lambda = 800$ нм, 100 фс). В режиме на пропускание решетки визуализировались по методике [16]. Для исследования волноводной SHG использовалось возбуждение мод TE₀ и TE_1 на $\lambda_1 = 1053$ нм. Эффект SHG фиксировался по наличию после исследуемой доменной структуры волноводного пучка на $\lambda_2 = 526.5$ нм. Для оценки эффективности волноводной SHG и влияния на нее направления распространения пучка накачки на моде ТЕ₀ световое распределение на выходном торце волновода проецировалось на светочувствительную площадку калиброванного фотоприемного устройства, позволяющего измерять пиковую мощность для излучения накачки и SH. Угол между осью X кристалла и направлением распространения пучка накачки в плоскости волноводного слоя XZ задавался соответствующим поворотом призмы ввода и принимал значения $\beta = 0^{\circ}$ и 7°50′.

AFM запись доменов в LNOI и оценка DWC из характеристик записанных структур. Волноводный сэндвич LNOI, схематически представленный на рис. 1а, перспективен для ряда применений [3–6]. Помимо этого, пленки LiNbO₃, формирующие LNOI (ниже "пленки LN"), являются удобным объектом для исследования переключения, петель гистерезиса и родственных сегнетоэлектрических эффектов. Хотя LiNbO₃ является базовым материалом нелинейной оптики, процессы переполяризации, лежащие в основе QPM преобразования частоты излучения, изучены недостаточно из-за исключительно высоких коэрцитивных полей ($E_c = 220$ и 60 кB/см в LiNbO₃ конгрузнтного и стехиометрического составов соответственно). Измерения пьезоэлектрических петель гистерезиса $H_w - U_{\rm tip}$ (где H_w – сигнал электромеханического отклика, определяемый спонтанной поляризацией P_s) в пленках LN [12] впервые для LiNbO₃ обнаружили характерное для сегнетоэлектриков увеличение Е_c при уменьшении длительности импульса t_p и увеличении скважности импульсов в интервале $t_p = (1-1000)$ мс.

Остановимся подробно на процессах AFM записи доменов в пленках LN [12–15]. Определяющей целью

этих работ было исследование закономерностей формирования доменных структур для реализации QPM преобразования частоты в LNOI. Следует упомянуть исключительную "податливость" пленок LN к AFM записи доменов, позволяющую записать как одиночные наноразмерные домены, так и 2D структуры произвольной конфигурации. Исследования AFM записи доменов в пленках LN легли в основу описанного ниже оригинального метода оценки DWC [15].

Доменные структуры записывались методами растровой (рис. 2а–f) и векторной (рис. 3) литографии. Рисунок 2 иллюстрирует результаты РFМ и C-AFM картирования 2D доменной структуры ("решетки"), записанной в LNOI полем зонда AFM. Решетка с периодом $\Lambda = 3.6$ мкм была записана $U_{\rm tip} = 50$ В. На рисунках 2 а, b представлены ее фазовое и амплитудное PFM изображения; P_s нормальна плоскости рисунка. На фазовом изображении (рис. 2а) светлые и темные полосы – 180⁰ домены; светлые полосы соответствуют исходному направлению P_s ; на амплитудном изображении (рис. 2b) темные линии – доменные границы.

На рисунке 2с показана C-AFM карта решетки, полученная при $U_{\rm tip} = 5$ В. На доменных границах наблюдаются токи $I_{\rm peak}$; вне доменных границ сигнал находится за пределами чувствительности аппаратуры (0.01 пА). В исходной матрице LiNbO₃, в записанных доменах и на доменных границах были измерены петли гистерезиса $H_w - U_{\rm tip}$. Их характеристики практически идентичны, что позволяет пренебречь возможным вкладом токов смещения в $I_{\rm peak}$ и однозначно связать $I_{\rm peak}$ с DWC. Токи $I_{\rm peak} \approx$ const в реальном времени благодаря устойчивости лежащей в их основе доменной структуры (асимметрия и размытие $I_{\rm peak}$ на рис. 2с и d – артефакты, зависящие от направления и скорости перемещения зонда).

В области доменной границы, выделенной квадратом на рис. 2b, были измерены зависимости тока $I_{\text{peak}}(U_{\text{tip}})$ путем сканирования зонда вдоль оси X; на рис. 2d показаны полученные профили сечения I(X)в интервале $U_{\text{tip}} = (2.5-5)$ В. Построенная вольтамперная характеристика $I_{\text{peak}}(U_{\text{tip}})$ (где I_{peak} – максимумы токов на рис. 2d) показана на рис. 2e; она аппроксимируется функцией

$$I_{\text{peak}} \sim U_{\text{tip}}^n \quad (n = 6). \tag{2}$$

Подобные зависимости I_{peak} от U_{tip} на доменных границах отмечались в других сегнетоэлектриках, например, PZT [31].

Итак, токи $I_{\rm peak} \approx 10-100$ пА на доменных границах (рис. 2с–е) обусловлены DWC. Расчет удельной проводимости доменной стенки $\sigma_{\rm DW}$ на осно-

вании степенной зависимости (2) не представляется возможным. Сделаем очень грубую оценку $\sigma_{\rm DW}$ из величины $I_{\rm peak}$ в предположении цилиндрического острия зонда и однородного аксиального распределения $U_{\rm tip}$ по толщине пленки.

Тогда $\sigma_{\rm DW} = \frac{LI_{\rm peak}}{(\pi R^2)U_{\rm tip}}$, где R – радиус зонда; L – толщина пленки. Для $U_{\rm tip} = 5$ В, $I_{\rm peak} \approx 80$ пА (рис. 2c); L = 300 нм, R = 20 нм; отсюда получаем $\sigma_{\rm DW} \approx 10^{-5}$ Ом⁻¹ см⁻¹. Таким образом, даже в таком грубом приближении $\sigma_{\rm DW}$ на много порядков превышает проводимость кристалла LiNbO₃ $\sigma \approx$ $\approx 10^{-15} - 10^{-16}$ Ом⁻¹ см⁻¹.

Далее исследовались характеристики записи доменов методом векторной литографии (рис. 3). При данных $U_{\rm tip} = {\rm const}$, $t_p = {\rm const}$ путем пошагового перемещения зонда AFM вдоль оси X записывались ряды доменов; в каждом ряду расстояние между точками записи $\Lambda = {\rm const}$. На рисунке 3 представлены PFM изображения доменных рядов, записанных $U_{\rm tip} = 50$ B; $\Lambda = 500$, 400, 300, 200 и 100 нм (снизу вверх). Причина различий PFM изображений на рис. За и рис. 3d–f обсуждается ниже.

Рассмотрим результаты, представленные на рис. За. Все записанные структуры стабильны. На вставке показаны полученные линейные зависимости диаметра доменов $d(U_{tip})$ при $t_p = \text{const.}$ Особенностью записанных структур является коалесценция доменов при уменьшении расстояния *l* между доменными границами (верхние ряды на рис. 3a). PFM сканирование образовавшихся сплошных доменов не обнаруживает аномалий сигнала H_w в области "исчезнувших" доменных границ; амплитуда H_w пространственно однородна. Величина H_w в дискретных и сплошных структурах идентична (при равных U_{tip} и t_p). Подчеркнем, что коалесценция доменов определяется только расстоянием *l* и наблюдается при *l* < 20-30 нм независимо от размера домена (т.е. от U_{tip} и t_p).

Эти результаты отличались от результатов сходных экспериментов [32, 33, 35], выполненных в пленках и тонких слоях LiNbO₃. В [32] при AFM записи доменов наблюдалось уменьшение диаметра доменов при уменьшении расстояния между точками записи; в [33] отмечалась нестабильность записанных доменов при сближении доменных границ; в [34] при AFM записи возникали нестабильные хаотические структуры. Коалесценция доменов не наблюдалась.

Доменные стенки представляют собой слои пространственного заряда [3–6]. С этих позиций нерегулярность и нестабильность доменных структур, наблюдаемые в [32–34], можно было объяснить электростатическим отталкиванием близко расположен-



Рис. 3. (Цветной онлайн) PFM изображения доменных рядов, записанных пошаговым смещением зонда AFM; расстояния между точками записи $\Lambda = 500, 400, 300, 200$ и 100 нм (снизу вверх); (а) – после записи с заземленным металлическим слоем; (b)–(d) – результаты записи при отъединении металлического слоя от земли; изображения получены через 6, 12 и 24 мин после записи. $U_{\rm tip} = 50$ В (линейные зависимости $D(U_{\rm tip})$, показанные на вставке рис. За, получены при заземленном контакте

ных доменных границ. Для подтверждения этого объяснения была проведена AFM запись доменных рядов по предыдущей схеме (рис. 3a), но без заземления металлического слоя. Результаты (рис. 3d-f)

радикально отличались от картины рис. За. Величины t_n , необходимые для записи доменов с диаметром, сопоставимыми с d на рис. За, увеличились не менее, чем на порядок; PFM сканирование после записи обнаружило неустойчивые структуры (рис. 3bd), стабилизирующиеся в течение 20-30 мин. Величина d в каждом доменном ряду уменьшалась от "начальной" точки записи до "конечной" точки (справа налево на рис. 3b-d); коалесценция доменов не наблюдалась. При записи доменов методом векторной литографии с незаземленным контактом доменные решетки были полностью нестабильны. Таким образом, было подтверждено качественное предположение о том, что наблюдаемая в [32–34] нерегулярность доменных структур и уменьшение d при сближении доменных границ связаны с нарушением (или отсутствием) заземления доменных стенок. Этот вывод о влиянии условий заземления доменных стенок на формирование доменов лег в основу обсуждаемого ниже подхода к оценке DWC.

Дальнейтее рассуждение иллюстрировано рис. 4. Рассмотрим ряд доменов с диаметром d (рис. 4а), записанных полем зонда AFM. Доменные стенки представляют собой систему "нанопроводов" с общим сопротивлением $R_{\rm DW} \ll R_{\rm crys}$, встроенных в непроводящую матрицу LiNbO₃ (где $R_{\rm crys}$ – сопротивление кристалла). "Нанопровода" замкнуты на металлический слой; между металлом и землей введено сопротивление R_L .

Предельные случаи – заземление R_{DW} и разомкнутый контакт – соответствуют $R_L = 0$ и $R_L = \infty$. В этих условиях наблюдаются регулярные (рис. 3а) и хаотические (рис. 3b-d) структуры соответственно. Введем сопротивление R_L между металлическим слоем и землей. Тогда формирование доменной структуры должно определяться соотношением R_L и $R_{\rm DW}$, т.е. можно ожидать влияния величины R_L на характеристики записи. Следуя этому рассуждению, запись доменов проводилась при введении между металлическим слоем и землей варьируемых резисторов R_L . Формирование доменов при прочих равных условиях оказалось критично зависящим от величины R_L . Вплоть до некоторого $R_L = R_{\rm crit}$ сформировавшийся доменный паттерн практически идентичен паттерну, наблюдаемому при $R_L = 0$ (рис. 3a). При $R_L > R_{\rm crit}$ для записи устойчивой структуры с теми же характеристиками требовалось увеличение t_p не менее, чем на порядок, по сравнению с t_p при $0 \leq R_L \leq R_{\rm crit}$. В рамках проведенного рассуждения это пороговое изменение t_p происходит при $R_L = R_{\rm crit} \approx R_{\rm DW}$. Сравнивая результаты AFM записи доменов при различных R_L ($U_{tip} = const$), нахо-



Рис. 4. (Цветной онлайн) Схематическое представление АFM записи домена в LNOI. (а) – схема LNOI с записанными доменами в проекции на неполярную плоскость; $P_{\rm up}$ и $P_{\rm down}$ – исходная и обращенная P_s , соответственно; вертикальные полосы – доменные стенки; горизонтальные синяя и серая полосы – слои Au и SiO₂, соответственно; R_L – нагрузочное сопротивление. (b) – Эквивалентная схема записи домена с нагрузочным сопротивлением R_L ; $R_{\rm DW}$ – сопротивление доменных стенок. (c) – Амплитудное PFM изображение доменной цепочки на Z поверхности. (d) – Продольный скан фрагмента доменной цепочки, выделенного квадратом на рис. 4с

дим $R_{\rm crit}$ и тем самым $R_{\rm DW}$. Ниже (рис. 4) приведен пример оценки $R_{\rm DW}$, выполненной на основании этого подхода.

Пошаговым перемещением зонда AFM был записан ряд доменов, амплитудное PFM изображение которого в проекции на плоскость (001) представлено на рис. 4с. Толщина пленки LN 500 нм; запись проводилась при $U_{\rm tip} = 27$ В, $t_p = 500$ мс; заданное расстояние между точками записи $\Lambda = 100$ нм; радиус зонда AFM $r \leq 10$ нм. Сначала была выполнена запись доменного паттерна при $R_L = 0$ ("опорная" структура). Затем та же структура записывалась с $R_L \neq 0$; при каждой последующей записи величина R_L повышалась на порядок. При $R_L \leq 10^9$ Ом записанные структуры практически идентичны опорной. При $R_L = 10^{10}$ Ом время t_p , необходимое для записи доменного ряда с теми же характеристиками, увеличилось более, чем на порядок. В контексте проведенного рассуждения этот скачок происходит при $R_L > R_{\rm DW}$. Таким образом, в доменном ряду, показанном на рис. 4, $R_{\rm DW} \approx R_L = 10^9$ Ом (с точностью до порядка). Из величины $R_{\rm DW}$ делается оценка проводимости доменных стенок $\sigma_{\rm DW}$.

При расчетах домен, записанный AFM, рассматривается как цилиндр с диаметром d; $R_{\rm DW} \ll R_{\rm LN}$ (где $R_{\rm LN}$ – сопротивление кристалла LiNbO₃). Сопротивление домена может быть представлено, как сопротивление полой трубки диаметром d с толщиной стенки w; поскольку домен прорастает через толщину пленки, замыкаясь на металлический слой, длина трубки равна толщине пленки L. Тогда сопротивление доменных стенок

$$R_{\rm DW} = \rho_{\rm DW} \left(\frac{L}{\pi \rm Dw}\right) \equiv \frac{1}{\sigma_{\rm DW}} \left(\frac{L}{\pi \rm Dw}\right).$$
(3)

АFM измерения в доменной структуре, показанной на рис. 4с, d, проведенные с использованием зонда с $r \leq 10$ нм, определили толщину DW $w \approx 20$ нм. Эта величина согласуется с литературными данными, суммированными в [7], согласно которым в доменных структурах, записанных AFM в различных материалах, $w \approx 10$ нм. Напомним, что домены коалесцируют при расстоянии между DW l = 20-30 нм $\approx 2w$.

Подставляя в (3) величины $R_{\rm crit} = 10^9$ Ом, L = 500 нм, d = 100 нм, w = 20 нм, получаем $\sigma_{\rm DW} = 8 \cdot 10^{-4} \,({\rm OM} \cdot {\rm cm})^{-1}$. Расчет $\sigma_{\rm DW}$ из величины $R_{\rm DW}$, выполненный на основании альтернативного подхода [7], привел практически к той же $\sigma_{\rm DW} = 7 \cdot 10^{-4} \,({\rm OM} \cdot {\rm cm})^{-1}$.

Итак, в обсуждаемой доменной структуре, записанной полем зонда AFM в пленке LN, величина DWC не менее, чем на 12 порядков превышает объемную проводимость LiNbO₃.

Следуя [7], выполнен расчет угла наклона доменных стенок θ , определяющего полученную величину $\sigma_{\rm DW}$. Проводимость $\sigma = ne\mu$, где n и μ – концентрация и подвижность экранирующих электронов, e – заряд электрона. Подставляя $\sigma_{\rm DW} \approx$ $\approx 8 \cdot 10^{-4} ({\rm OM} \cdot {\rm cm})^{-1}$ в это выражение и принимая $\mu \leq 10^{-2} {\rm cm}^2/{\rm Bc}$, получаем $n \geq 0.6 \cdot 10^{16} {\rm cm}^{-3}$. Угол θ , обеспечивающий этот заряд экранирования, рассчитывается, исходя из условия $new = 2P_s \sin \theta$. Для $n \geq 0.6 \cdot 10^{16} {\rm cm}^{-3}$, w = 20 нм и $P_s = 70 {\rm MKr} \cdot {\rm cm}^{-2}$ получаем $\theta \approx (7 \cdot 10^{-3})^0$. Аргументированность этой оценки косвенно подтверждается результатами работы [7], лежащей в основе расчета, поскольку в этой работе угол $\theta \approx 1^0$ был задан экспериментально.

Подчеркнем, что в обсуждаемом нами случае угол наклона доменных стенок не связан с какимлибо внешним воздействием. Он определяется механизмом фронтального роста домена в поле зонда AFM; именно этим объясняется малость θ . В этом заключается отличие полученного здесь результата от результатов сходных работ, направленных на повышение DWC путем увеличения θ с помощью различных способов.

Электронно-лучевая запись доменов в оптических волноводах. В этом разделе изложены результаты EB записи доменных структур в оптических волноводах He⁺: LiNbO₃ и Ti: LiNbO₃, сформированных на неполярных X- и Y-поверхностях LiNbO₃ соответственно [16–20]. При исследованиях EB записи доменов на неполярной (Y-) поверхности кристаллов LiNbO₃ [23–29] были выявлены следующие закономерности. Глубина нуклеации домена T_d в точке облучения определяется равновесной длиной пробега R_e первичных электронов,зависимость которой от ускоряющего напряжения U для LiNbO₃ конгруэнтного состава с удовлетворительным приближением описывается степенной функцией

$$T_d \cong R_e = \frac{78.9U^{1.7}}{\rho},\tag{4}$$

(где $\rho = 4.65 \,\mathrm{r/cm^3}$ – плотность LiNbO₃). Эта зависимость позволяет задать глубину T_d зарождения доменов в точке облучения путем варьирования U. В таблице 1 представлены величины T_d для используемого интервала ускоряющих напряжений.

Длина L_d домена вдоль оси Z растет линейно с временем облучения $t_{\rm irr}$ как результат фронтального роста по закону типа вязкого трения

$$L_d = v_f t_{\rm irr} \sim \mu E t_{\rm irr},\tag{5}$$

где v_f и μ – скорость фронтального роста и подвижность доменной стенки соответственно.

Таблица 1. Глубина нуклеации доменов T_d , при ЕВ записи в зависимости от ускоряющего напряжения

$U, \kappa B$	5	7	10	15	20	25
T_d , мкм	0.26	0.46	0.85	1.7	2.8	4.0

Спецификой записи 1D и 2D структур является увеличение длины доменов L_d по сравнению с L_d одиночных доменов, записанных при тех же условиях экспозиции. Эффект был объяснен [23] аддитив-

ностью электрических полей, индуцированных облучением в близко расположенных точках. Аддитивность обусловлена высоким сопротивлением LiNbO₃ ($\rho \geq 10^{14} - 10^{16} \, \text{Om} \cdot \text{cm}$) и, соответственно, большим временем диэлектрической релаксации $\tau_{\rm M} = \varepsilon \varepsilon_0 / \rho 10^4 - 10^6 \, \text{c}$, значительно превышающим время записи решетки $\tau_{\rm rec} \ll \tau_{\rm M}$. Благодаря этому за время $\tau_{\rm rec}$ решетка формируется в суммарном поле

$$\mathbf{E} = \sum_{i=1}^{n} E_i,\tag{6}$$

где *n* – число облученных точек в облучаемом массиве.

Ниже результаты ЕВ записи доменов в волноводах He:LiNbO₃ [18] и Ti:LiNbO₃ [16, 17, 19, 20] обсуждаются в контексте изложенного подхода к описанию процессов в объемных кристаллах.

Волновод He: LiNbO₃ изготовлен облучением Xповерхности LiNbO₃ ионами He⁺ с энергией 450 кэВ. Расчет на основе программы SRIM дает эффективную толщину волновода $H \approx 1.06$ мкм. Запись доменов проводилась ускоряющими напряжениями U == 5, 10, 15, и 25 кВ. На рисунке 5 представлены зависимости L_d от времени облучения в доменных ре-



Рис. 5. (Цветной онлайн) Зависимость L_d от времени облучения в доменных решетках, записанных в He:LiNbO₃; 1 и 2 – U = 5 и 10 кВ, соответственно, звездочки – U = 25 кВ; квадратами показана $L_d(t_{\rm irr})$ в неимплантированном кристалле, U = 25 кВ

шетках, записанных в He: LiNbO₃ при различных U. Рисунок 6 иллюстрирует PFM и SHG изображения записанных доменных решеток.

Наиболее регулярная структура наблюдается при записи U = 10 кB. Период решетки с точностью до 10% повторяет период, заданный EB сканированием;





Рис. 6. (Цветной онлайн) РFM и SHG изображения (левый и правый столбцы, соответственно) доменных решеток, записанных EB в He:LiNbO₃. (a), (b), (c) – U = 5, 10 и 25 кВ соответственно ($t_{\rm irr} = 150$ мс)

зависимость $L_d(t_{irr})$ линейна (рис. 5) и следует (5). Согласно таблице 1 для $U = 10 \,\mathrm{kB}$ глубина доменов $T_d = 0.65 \,\text{мкм} < D$. Таким образом, в этом случае процессы зарождения и прорастания доменов происходят в пределах волноводного слоя. При U = 5 кВ величина $L_d \sim t_{\rm irr}$, но записанная структура нерегулярна, что может быть следствием характерной для кристалла LiNbO₃ повышенной проводимости поверхностного слоя. При $U = 25 \,\mathrm{\kappa B} \, (Td > D)$ сценарий развивается в структурно нарушенной области; величина L_d (показанная звездочками на рис. 5) нерегулярна и не зависит от t_{irr}. Для иллюстрации процесса, ожидаемого при U = 25 кВ в регулярной структуре, на рис. 5 показана линейная зависимость $L_d(t_{\rm irr})$ (квадраты), наблюдаемая в неимплантированном кристалле LiNbO₃.

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

Таким образом, оптимальные характеристики нелинейного преобразования в волноводе He: LiNbO_3 достигаются путем подгонки величины T_d , контролируемой ускоряющим напряжением U, к эффективной толщине волновода D, заданной режимом имплантации.

Наиболее подробные исследования EB записи доменов в волноводной геометрии были выполнены в планарных волноводах Ti:LiNbO₃ [16, 17, 19, 20, 24] на подложках *Y*-ориентации. Сразу необходимо упомянуть, что увеличение проводимости LiNbO₃ при легировании Ti препятствует возможности PFM визуализации доменных структур, записанных в Ti:LiNbO₃.

В [20] была изучена зависимость эффективности преобразования в SH от соотношения глубины T_d записанной структуры и толщины волноводного слоя.

Измерения эффективных показателей преломления волноводных мод, расчеты в рамках ВКБприближения [35] и литературные данные [36] показали, что распределения концентрации титана $C_{\rm Ti}(y)$ (рис. 7) и приращения показателя преломления $\Delta n_{\rm LN}(y)$ по глубине волноводного слоя имеют профиль $\exp(-y/h)$ с h = 1.75 мкм.



Рис. 7. Распределение концентрации Ті по глубине волноводного слоя в Ті: LiNbO₃

Максимальная концентрация Ті достигала $C_{m\mathrm{Ti}} = 1.43 \cdot 10^{21} \,\mathrm{cm^{-3}} \approx 7.6 \,\mathrm{atm}\,\%$, а максимумы изменения необыкновенного показателя преломления составляли $\Delta n_{me} = 0.0166$ и 0.0277 для $\lambda = 1053$ и 526.5 нм соответственно. Такие параметры Ti: LiNbO₃ позволяли возбуждать волноводные моды TE₀ и TE₁ на $\lambda = 1053$ нм и TE₀-TE₂ для SH (526.5 нм). Расчеты, проведенные с использованием

аналитического решения волнового уравнения для TE мод в волноводе с асимметричным экспоненциальным профилем [37], показали, что наибольшая эффективность SHG достигается при возбуждении накачки с $\lambda_1 = 1053$ нм на моде TE₀, для которой максимальная интенсивность локализована на глубине около 1.6 мкм. При этом возможно эффективное волноводное QPM преобразование первого порядка для процессов TE₀ \rightarrow TE₀, TE₁ и TE₂. Для их реализации согласно (1), необходимо создание микродоменных структур с пространственными периодами $\Lambda_{00} = 5.88$ мкм, $\Lambda_{01} = 6.60$ мкм и $\Lambda_{02} = 6.74$ мкм.

Решетки с периодом $\Lambda = 6.50$ мкм, близким к оптимальному для процесса $\text{TE}_0 \rightarrow \text{TE}_1$, записывались при U = 7, 10, 15 и 25 кВ, токе пучка I = 100 пА, времени экспозиции $t_e = 150$ мс и площади локальной области облучения S = 0.5 мкм². Решетки визуализировались методом микроскопии SHG в режиме на пропускание (Nd-YLF лазер 1053 нм) по методике [16]. Для исследования волноводной SHG использовалось возбуждение мод TE₀ и TE₁ на $\lambda_1 = 1053$ нм. Эффект SHG фиксировался по наличию после исследуемой доменной структуры волноводного пучка $\lambda_2 = 526.5$ нм.

На рисунке 8а представлены SHG изображения в пропускающей геометрии четырех записанных решеток; на рис. 8b – увеличенный фрагмент изображения решетки 2, сформированной при U = 10 kB. Изображение этого фрагмента свидетельствует о достаточной пространственной однородности и регулярности решетки, а также о соответствии ее периода заданной величине.

Типичная картина волноводной SHG при накачке пучком на моде ТЕ₀ представлена на рис. 8с. Пучок накачки в первом положении распространялся через решетку 4, во втором – через решетку 3 и в третьем – последовательно через решетки 1 и 2 (см. рис. 8а), сформированные при U = 7 и 10 кВ соответственно. Значительная апертура и высокая яркость волноводного пучка SH наблюдается в результате прохождения пучка накачки через структуру 2. Напротив, при прохождении через структуры 3 и 4 пучок SH не наблюдается, что свидетельствует о низкой эффективности волноводной SHG. Наблюдаемые при этом изображения структур 3 и 4 четко ограничены вдоль оси Z, поскольку визуализируются только для тех областей, через которые распространяется пучок накачки (ср. с рис. 8, а, где изображения вытянуты вдоль оси Z). Другими словами, решетки 3 и 4 располагаются ниже волноводного слоя и в волноводной геометрии не визуализируются.







Рис. 8. (Цветной онлайн) (a) – SHG визуализация в пропускающей геометрии доменных решеток,записанных при U = 7, 10, 15, и 25 кВ (1, 2, 3 и 4, соответственно); (b) – фрагмент увеличенного SHG изображения структуры 2; (c) – SHG визуализация в волноводной геометрии доменных структур 1–4 и волноводных пучков $\lambda_2 = 526.5$ нм, генерируемых на структурах 1 и 2, при возбуждении $\lambda_1 = 1053$ нм на моде TE₀; пучки накачки распространяются слева направо точно вдоль оси X (при $\beta = 0^{\circ}$)

Качество волноводной SHG, наблюдаемой на структуре 2, свидетельствует о близости параметров этой доменной решетки к оптимальным величинам для SHG преобразования. Количественные измерения эффективности *η* волноводного SHG преобразования показали, что при распространении пучка накачки точно вдоль оси X (при $\beta = 0^{\circ}$) она принимает значение $\eta_1 = 1.1 \cdot 10^{-10} \, 1/W$, в то время как для $\beta = 7^{\circ}50'$ наблюдалось ее увеличение до $\eta_2 = 6.4 \cdot 10^{-9} \, 1/W$. Таким образом, режим EB записи решетки 2 при $U = 10 \,\mathrm{kB}$ обеспечил наилучшие характеристики волноводного SHG преобразования. Используемый период $\Lambda = 6.5\,\mathrm{mkm}$ позволяет реализовать точное выполнение условия QPM типа *еее* в исследуемом планарном волноводе Ti:LiNbO₃ только при распространении пучка накачки под некоторым углом к оси X.

Заключение. В монокристаллических монодоменных пленках LiNbO₃ толщиной 300-500 нм, формирующих волноводный сэндвич LNOI (LiNbO₃-oninsulator) полярной (Z) ориентации, полем $U_{\rm tip}$ зонда AFM записаны 1D и 2D нанодоменные структуры заданной конфигурации и исследованы их свойства. Все записанные структуры устойчивы. На доменных стенках в структурах с диаметром доменов ≈ 100 нм, записанных $U_{\rm tip} = 50 \,\mathrm{B}$, обнаружены стационарные токи ≈ 100 пА, обусловленные статической проводимостью $\sigma_{\rm DW}$ доменных стенок. Оценка $\sigma_{\rm DW}$ выполнена с помощью оригинального метода, основанного на исследованиях характеристик AFM записи доменов. Найденная величина $\sigma_{\rm DW} \approx 8 \cdot 10^{-4} \, ({\rm Om} \cdot {\rm cm})^{-1}$ не менее, чем на 12 порядков, превышает объемную проводимость LiNbO₃. Выполненный с большими допущениями расчет угла наклона θ доменных стенок, определяющего эту величину $\sigma_{\rm DW}$, дает $\theta \approx (10^{-4})^0$. Этот угол определяется механизмом фронтального роста домена под действием поля зонда.

В оптических планарных волноводах He⁺-LiNbO₃ и Ti-LiNbO₃, сформированных на неполярных (Xи Y) поверхностях кристалла LiNbO₃, электроннолучевым методом созданы устойчивые микродоменные структуры с заданными периодами. Исследовано нелинейное волноводное QPM преобразование излучения $\lambda = 1063$ нм на записанных структурах. Оптимальные характеристики преобразования в SH достигаются при "подгонке" глубины T_d доменной структуры к глубине локализации светового поля взаимодействующих волноводных мод. Величина T_d задается ускоряющим напряжением U (при токе I == const). В волноводе Ti-LiNbO₃ максимальная эффективность $\eta_2 = 6.4 \cdot 10^{-9}$ 1/W волноводного QPM *еее* преобразования получена в доменной решетке с $\Lambda = 6.5$ мкм, записанной U = 10 кВ, при котором глубина локализации структуры $D \approx 1.6$ мкм.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований по проектам 16-29-11777-офи м, 16-29-14046-офи м и 16-02-00439 а, а также при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН в части исследования записанных структур в He⁺-LiNbO₃ выполненных Т. Р. Волк, Р.В.Гайнутдиновым и Я.В.Боднарчук. Расчет данных экспозиционных зависимостей в волноводе He^+ -LiNbO₃ был выполнен Я.В.Боднарчук в рамках гранта Президента #МК-1675.2021.1.2. Анализ эффективности волноводной геометрии SHG в планарном волноводе с экспоненциальным профилем показателя преломления, проведенный С. М. Шандаровым, поддержан в рамках Госзадания Министерства науки и высшего образования на 2020-2022 годы (задание FEWM-2020-0038/3).

- B. M. Vul, G. M. Guro, and I. I. Ivanchik, Ferroelectrics 6, 29 (1973).
- A. Aird and E. K. H. Salje, J. Phys.: Condens. Matter 10, L377 (1998).
- J. Seidel, L.W. Martin, Q. He et al. (Collaboration), Nature Mater. 8, 229 (2009).
- G. Catalan, J. Seidel, R. Ramesh, and J. F. Scott, Rev. Mod. Phys. 84, 119 (2012).
- P.S. Bednyakov, B.I. Sturman, T. Sluka, A.K. Tagantsev, and P.V. Yudin, npj Computational Materials 4, 65 (2018).
- M. Rusing, P.O. Weigel, J. Zhao, and S. Mookhrjea, IEEE Nanotechnology Magazine 13, 18 (2019).
- C. S. Werner, S. J. Herr, K. Buse, B. Sturman, E. Soergel, C. Razzaghi, and I. Breunig, Sci. Rep. 7, 9862 (2017).
- B. Wolba, J. Seidel, C. Cazorla, C. Godau, A. Haußmann, and L. M. Eng, Adv. Electron. Mater. 4, 1700242 (2018).
- 9. Н. Бломберген, *Нелинейная оптика*, Мир (1966), 424 с.
- V. G. Zalessky and S. O. Fregatov, Physica B **371**, 158 (2006).
- Т. Р. Волк, Р.В. Гайнутдинов, Я.В. Боднарчук, Л.И. Ивлева, Письма ЖЭТФ 97, 554 (2013).
- R. V. Gainutdinov, T. R. Volk, and H. Zhang, Appl. Phys. Lett. 107, 162903 (2015).
- T. R. Volk, R. V. Gainutdinov, and H. Zhang, Appl. Phys. Lett. **110**, 132905 (2017).
- T. R. Volk, R. V. Gainutdinov, and H. Zhang, Crystals 7, 137 (2017).
- 15. R. Gainutdinov and T. Volk, Crystals 10, 1160 (2020).

- Л. С. Коханчик, М. В. Бородин, С. М. Шандаров, Н.И. Буримов, В. В. Щербина, Т. Р. Волк, ФТТ 52, 1602 (2010).
- L.S. Kokhanchik, M.V. Borodin, N.I. Burimov, S.M. Shandarov, V.V. Shcherbina, and T.R. Volk, IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics and Waveguide Applications 59, 1076 (2012).
- T.R. Volk, L.S. Kokhanchik, R.V. Gainutdinov, Ya.V. Bodnarchuk, S.M. Shandarov, M.V. Borodin, S.D. Lavrov, H.L. Liu, and F. Chen, IEEE J. Light. Technol. 33, 4761 (2015).
- D. Lavrov, L.S. Kokhanchik, R.V. Gainutdinov, A.S. Elshin, Ya.V. Bodnarchuk, E.D. Mishina, and T.R. Volk, Optical Materials 75, 325 (2018).
- S. M. Shandarov, L. S. Kokhanchik, T. R. Volk, E. N. Savchenkov, and M. V. Borodin, Quantum Electronics 48, 761 (2018).
- A. K. Tagantsev, L. E. Cross, and J. Fousek, Domains in Ferroic Crystals and Thin Films, Springer, N.Y. (2010).
- A. L. Kholkin, S. V. Kalinin, A. Roelofs, and A. Gruverman, Scanning Probe Microscopy. Electrical and Electromechanical Phenomena at the Nanoscale, Springer-Verlag, N.Y., USA (2007).
- L. S. Kokhanchik and D. V. Punegov, Ferroelectrics 373, 69 (2008).
- L. S. Kokhanchik, M. V. Borodin, S. M. Shandarov, N. I. Burimov, V. V. Shcherbina, and T. R. Volk, Phys. Solid State 52, 1722 (2010).
- L.S. Kokhanchik, R.V. Gainutdinov, E.D. Mishina, S.D. Lavrov, and T.R. Volk, Appl. Phys. Lett. 105, 142901 (2014).

- L.S. Kokhanchik, R.V. Gainutdinov, S.D. Lavrov, E.D. Mishina, and T.R. Volk, Ferroelectrics 480, 49 (2015).
- L. S. Kokhanchik, R. V. Gainutdinov, S. D. Lavrov, and T. R. Volk, J. Appl. Phys. **118**, 072001 (2015).
- Л. С. Коханчик, Р. В. Гайнутдинов, Т. Р. Волк, ФТТ 57, 937 (2015).
- T. R. Volk, L. S. Kokhanchik, R. V. Gainutdinov, Y. V. Bodnarchuk, and S. D. Lavrov, J. Adv. Dielect. 8, 2 (2018).
- S. Kurimura and Y. J. Uesu, Appl. Phys. Lett. 81, 369 (1997).
- J. Guyonnet, I. Gaponenko, S. Gariglio, and P. Paruch, Adv. Mater. 23, 5377 (2011).
- A. Ofan, M. Lilienblum, O. Gaathon, A. Sehrbrock, A. Hoffmann, S. Bakhru, H. Bakhru, S. Irsen, R. M. Osgood Jr., and E. Soergel, Nanotechnology 22, 285309 (2011).
- 33. Y. Kan, H.-F. Bo, X.-M. Lu, T.-T. Xu, Y. M. Jin, X. Wu, F. Huang, and J. Zhu, Appl. Phys. Lett. 97, 202903 (2010).
- 34. V. Ievlev, S. Jesse, A.N. Morozovska, E. Strelcov, E.A. Eliseev, Y.V. Pershin, A. Kumar, V. Ya. Shur, and S.V. Kalinin, Nat. Phys. 10, 59 (2014).
- В. А. Сычугов, И. Чтыроки, Квантовая электроника 9, 634 (1982).
- R. V. Schmidt and I. P. Kaminov, Appl. Phys. Lett. 25, 458 (1974).
- Т. Тамир, Волноводная оптоэлектроника, Мир, М. (1991).

Измерение оптических потерь и дисперсии волноводных мод в геометрии критического эванесцентного возбуждения

Д. В. Пермяков¹⁾, В. И. Кондратьев, Д. А. Пидгайко, И. С. Синев, А. К. Самусев¹⁾

Физико-технический факультет, Университет ИТМО, 197101 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 27 апреля 2021 г. После переработки 11 мая 2021 г. Принята к публикации 11 мая 2021 г.

Поверхностные волны, такие как плазмонные, экситонные или фононные поляритоны, а также волноводные моды, поддерживаемые различными планарными структурами, привлекают особое внимание из-за их способности переносить оптические сигналы в двумерных и одномерных системах. Важной характеристикой таких волн является их дисперсия $\omega(k_x, k_y)$, которой можно управлять путем наноструктурирования плоских слоистых систем для получения фотонно-кристаллических волноводов и метаповерхностей. Путем подбора закона дисперсии поверхностных волн можно реализовать такие уникальные оптические явления, как переход от режима положительного преломления к отрицательному или от эллиптической дисперсии к гиперболической, а также самофокусировка и бездифракционное распространение поверхностных волн. Наряду с вещественной частью волнового вектора, отвечающей за фазу распространяющейся поверхностной волны, критически важным параметром с прикладной точки зрения является длина ее распространения, которая связана с собственными потерями моды. Мы предлагаем экспериментальный подход, позволяющий измерить полную комплексную дисперсию оптических поверхностных волн и волноводных мод. Метод основан на спектроскопии нарушенного полного внутреннего отражения с угловым разрешением. В такой конфигурации эксперимента варьирование воздушного зазора между образцом и линзой твердой иммерсии позволяет плавно управлять величиной связи между поверхностными волнами и модами свободного пространства. На примере планарного кремниевого волновода мы идентифицируем в эксперименте режим критической связи света с волноводной модой, определяем собственные потери моды и, соответственно, длину ее распространения в широком спектральном диапазоне. Наш подход представляет собой мощный инструмент для исследования оптических и поляритонных поверхностных волн различных типов и может найти свое применение в разработке оптоэлектронных и нанофотонных устройств на чипе.

DOI: 10.31857/S1234567821120065

1. Введение. Оптические поверхностные волны и волноводные моды, распространяющиеся вдоль планарных фотонных структур и интерфейсов [1], играют важную роль в интегральной оптике, сенсорике и спектроскопии [2]. Подобные волны представляют особый интерес в наноразмерных системах с пространственной дисперсией, в частности – в фотонно-кристаллических волноводах и метаповерхностях. Такие структуры открывают широкие возможности для контроля поляризации, волнового фронта, амплитуды, фазы и структуры электромагнитного поля собственных мод, локализованных в направлении, перпендикулярном интерфейсу [3–10].

Одним из ключевых оптических характеристик планарных структур является спектр их собственных состояний, который обычно состоит из резонансных мод: утекающих (излучающих) и волновод-

ных (неизлучающих). Первые напрямую связаны со свободным пространством, т.е. их волновой вектор меньше, чем у объемной волны в окружающей среде. Следовательно, такие моды могут проявляться как резонансы в пропускании [11], отражении [12], или поглощении [13]. Будучи связанными со свободным пространством, излучающие моды приобретают дополнительные радиационные потери, которые определяются исключительно дизайном структуры. Напротив, неизлучающие моды не взаимодействуют с излучением свободного пространства, что является преимуществом, поскольку их потери (отвечающие за длину распространения) определяются только поглощением света внутри материала и рассеянием на дефектах изготовления в реальных структурах. Недостатком является то, что для возбуждения и детектирования неизлучающих мод требуются специальные средства, такие как призмы с высоким показателем преломления, решеточные устрой-

¹⁾e-mail: d.permyakov@itmo.ru; a.samusev@metalab.ifmo.ru

ства ввода-вывода излучения, резонансные оптические наноантенны, или шероховатость поверхности [14–16].

Одним из наиболее универсальных экспериментальных подходов, который позволяет исследовать произвольные поверхностные волны и волноводные моды, является конфигурация Отто [17]. Идея метода заключается в возбуждении таких мод в геометрии нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) через призму с высоким коэффициентом преломления или линзу твердой иммерсии (solid immersion lens, SIL), прижатую к поверхности образца с небольшим воздушным зазором. Размер зазора определяет эффективность связи неизлучающих мод с объемными волнами внутри призмы. В спектре отражения, измеренном в конфигурации Отто, возбуждение поверхностной моды проявляется в виде провала. При умеренной силе связи центральная частота провала соответствует собственной частоте моды, а угол падения определяет действительную часть ее волнового вектора. Измерение угловой зависимости спектров отражения может быть использовано для определения дисперсии поляритонов, образующихся в результате сильной связи света с квазичастицами в твердом теле, такими как плазмоны, экситоны или фононы [14]. В частности, авторы работ [18, 19] использовали спектроскопию НПВО с угловым разрешением для измерения дисперсии волноводных мод в фотонно-кристаллических волноводах. Подобный подход использовался нашей группой для измерения дисперсии поверхностных волн, поддерживаемых плазмонной метаповерхностью [20]. В таких экспериментах угловое разрешение определяется числовой апертурой фокусирующей системы, а угловая зависимость спектров отражения получается за счет вращения образца. Такая конфигурация делает эксперимент крайне трудоемким из-за необходимости точно позиционировать центр вращения системы на поверхности образца, в центре полусферической или полуцилиндрической SIL. Альтернативный подход, позволяющий избавиться от необходимости вращения, – это комбинация спектроскопии НПВО с микроскопией задней фокальной (Фурье) плоскости (back focal plane, BFP) [21, 22]. Такая конфигурация может использоваться для прямой визуализации изочастотных контуров волноводных мод, поддерживаемых произвольной планарной системой.

В то время как действительная часть волнового вектора определяет пространственную эволюцию фазы поверхностной волны, для практических приложений требуется знание его мнимой части, отвечающей за собственные потери моды, т.е. длину ее распространения. Последняя может быть измерена напрямую с помощью различных специализированных методов, таких как конфигурация с двумя призмами [23], экспериментов по сканирующей ближнепольной оптической микроскопии [24], подход на основе ввода-вывода света в торец волновода и из него [25], измерение коэффициента пропускания в системах с парами решеточных элементов ввода-вывода, расположенных на различных расстояниях друг от друга и др. В качестве альтернативы можно детектировать рассеянное излучение моды на шероховатости поверхности, либо флуоресценцию красителя, нанесенного на образец [15].

В эксперименте по спектроскопии НПВО полная ширина на половине высоты (full width at half maximum, FWHM) провала в спектре определяется вкладом радиационных потерь, зависящих от зазора (из-за утечки излучения в призму), и собственных потерь моды (омических потерь в материале и рассеяния на шероховатости поверхности) [26]. Для больших зазоров сила связи и величина провала в отражении малы, в то время как ширина провала на полувысоте в основном определяется собственными потерями моды (режим докритической связи). С уменьшением зазора увеличиваются радиационные потери, растет модуляция коэффициента отражения, а абсолютное значение отражения достигает своего минимума в режиме так называемой критической связи, когда радиационные потери становятся равными собственным потерям моды [26]. Дальнейшее уменьшение зазора делает величину провала отражения снова малой и даже приводит к спектральному сдвигу провала из-за значительного изменения распределения поля моды и, следовательно, ее дисперсии из-за наличия призмы с высоким показателем преломления в непосредственной близости от образца.

Чтобы оценить длину распространения поверхфонон-поляритона на фиксированной ностного длине волны 8.72 мкм в среднем инфракрасном диапазоне непосредственно из эксперимента по НПВО спектроскопии, Г. Чен (G. Chen) с коллегами учли радиационные потери при известном зазоре образец – SIL с использованием дополнительного численного моделирования [27]. Авторы работы [28] экспериментально наблюдали режим критического возбуждения фонон-поляритона путем измерения спектров отражения с угловым разрешением в геометрии НПВО с фиксированным размером зазора, составившим несколько микрометров, что позволило им извлечь потери и длину распространения волноводной моды на одной частоте.



Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Экспериментальная установка НПВО с переменным воздушным зазором. Подробное описание приведено в тексте. Пространственный фильтр в плоскости изображения (*image plane*, IP) может использоваться для ограничения исследуемой области на поверхности образца. (b) – Схематическое изображение областей $k_{||}$ -пространства, соответствующих волнам: (c) – утекающим как в воздух, так и в подложку; (d) утекающим только в подложку; (e) – полностью неизлучающим, возбуждаемым в геометрии НПВО с помощью ZnSe SIL, отделенной воздушным зазором от поверхности образца. Переменный зазор позволяет управлять эффективностью возбуждения волноводных мод

В данной работе мы предлагаем универсальный экспериментальный метод, который позволяет восстановить полную комплексную дисперсию произвольных эванесцентных волн в видимом и ближнем инфракрасном спектральных диапазонах. Используя спектроскопию отражения с угловым разрешением в геометрии НПВО с изменяемой величиной воздушного зазора, мы достигаем режима критической связи в широком спектральном диапазоне. Это позволяет определить спектральную зависимость как действительной, так и мнимой частей волнового вектора исследуемых мод.



Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Схема областей $k_{||}$ пространства, соответствующих волнам, утекающим в воздух, подложку и волноводным модам, возбуждаемым в геометрии НПВО, см. рис. 1b. (b), (c) – Угловые зависимости спектров отражения планарного кремниевого волновода на стеклянной подложке, измеренные в конфигурации НПВО для (b) – ТЕ- и (c) – ТМ-поляризованного света. Данные эксперимента и моделирования показаны в левой ($k_{||} < 0$) и правой ($k_{||} > 0$) областях соответственно. Спектры НПВО от образца нормированы на спектры от SIL из ZnSe в отсутствие образца. В расчетах размер зазора составлял 133 нм

2. Эксперимент и численное моделирование. Экспериментальная схема, сочетающая микроскопию задней фокальной (Фурье) плоскости (back focal plane, BFP) с линзой твердой иммерсии (solid immersion lens, SIL), позволяющая визуализировать изочастотные контуры волноводных мод, поддерживаемых планарными структурами, была предложена в работах [21, 22]. Усовершенствованная версия установки представлена на рис. 1.

В ходе эксперимента образец прижимается к плоской поверхности полусферической SIL из ZnSe с диаметром основания 3 мм при помощи комбинации микрометрического винта и пьезопозиционера. Воздушный зазор может изменяться с шагом в несколько нанометров вплоть до значений менее 100 нм. Изображение образца формируется с помощью объектива с большим рабочим отрезком и большой числовой апертурой (Mitutoyo, M Plan Apo HR, 100×, NA = 0.9) и системой линз. В этой конфигурации достижимая эффективная числовая апертура системы и соответствующая длина волнового вектора в плоскости составляют, соответственно:

$$\left(\frac{k_{||}}{k_0}\right)_{\max} = \mathrm{NA}_{\mathrm{eff}} = \mathrm{NA} \cdot n_{\mathrm{ZnSe}} \approx 2.25,$$
 (1)

где $k_0 = 2\pi f/c$ – это волновой вектор света в свободном пространстве, f и c – частота и скорость света соответственно, $n_{\rm ZnSe} \approx 2.5$ – показатель преломления ZnSe (при длине волны $\lambda \approx 700$ нм) [29].

Свет от галогенного источника (Ocean Optics HL-2000-HP-FHSA) заводится в оптическую систему с помощью светоделителя, фокусируется объективом через SIL на поверхности образца. В канале детектирования отраженное излучение фокусируется при помощи 4f-схемы, так что задняя фокальная плоскость (BFP) оптической системы отображается на входную щель спектрометра, оснащенного ПЗСкамерой, охлаждаемой жидким азотом (Princeton Instruments SP2500 + PyLoN). Такая конфигурация позволяет напрямую визуализировать интенсивность отраженного света как функцию волнового вектора $k_{||}$ и частоты f, см. рис. 2. Поляризация детектируемого излучения контролируется анализатором. В случае анизотропных образцов ориентацию волнового вектора в плоскости $k_{||}$ (направление зондируемых волноводных мод) можно легко выбрать, вращая либо образец с держателем, либо BFP изображение с помощью призмы Дове, размещенной в канале детектирования.

Чтобы проиллюстрировать возможности нашего экспериментального подхода, мы изучили ТЕи ТМ-моды, поддерживаемые кремниевым планарным волноводом толщиной 225 нм на стеклянной подложке (аналогичный образец использовался в работе [21]) в видимом и ближнем инфракрасном диапазоне. Пленка кремния была осаждена с использованием магнетронного распыления. Шероховатость полученной поверхности была определена методом атомно-силовой микроскопии, и составила



Increase of pushing force

Рис. 3. (Цветной онлайн) (a) – Измеренный коэффициент отражения с провалом, соответствующим волноводной ТЕмоде (при $\lambda \approx 694$ нм) как функция силы прижима и волнового вектора в плоскости. (b) – Соответствующие карты отражения в осях "величина зазора – волновой вектор в плоскости". Вертикальными штриховыми линиями обозначен режим критической связи. (c) – Измеренная и (d) – рассчитанная зависимость минимального отражения от силы прижима и величины зазора соответственно. (e), (f) – Ширина провала в отражении на полувысоте как функция (e) – силы прижима и (f) – величины зазора, извлеченные из (a), (b). При моделировании мнимая часть показателя преломления кремния была увеличена, чтобы учесть дополнительные потери, возникающие из-за поликристалличности материала и шероховатости волновода

2–4 нм (среднеквадратичное отклонение). Спектры НПВО рассчитывались с использованием модального метода, реализованного в Фурье-пространстве (FMM) [30–32]. Показатели преломления для стеклянной подложки и кремниевого волновода взяты из работ [33, 34]. Следует отметить, что дисперсия и потери ($\mathbf{n}(\omega), \mathbf{k}(\omega)$) слоя кремния, полученного магнетронным напылением, могут несколько отличаться от таковых для кристаллической пленки [34], использованных в моделировании. В частности, можно ожидать, что потери будут выше из-за поликристаллической структуры пленки, а так же из-за шероховатости ее поверхности.

3. Результаты и обсуждение. Типичные измеренные и рассчитанные карты НПВО показаны на рис. 2. Характерные провалы соответствуют резонансному возбуждению утекающих и волноводных мод с ТЕ и ТМ поляризацией. На рисунках 1b и 2a показаны три диапазона волновых векторов в плоскости, соответствующих различным углам падения света из ZnSe SIL. Во внутренней области (отмеченной красным на схемах на рис. 1 и 2) объемные распространяющиеся волны с $|\mathbf{k}_{||}| < k_0$ существуют как в воздухе, так и в стеклянной подложке - волновод может поддерживать только моды, утекающие в оба полупространства (рис. 1с). Поскольку эти волны связаны с объемными волнами как со стороны подложки, так и со стороны воздуха в отсутствие каких-либо специальных устройств, таких как SIL, они обладают значительными потерями на излучение. Эти потери приводят к сильному радиационному уширению провалов в спектрах отражения, см. рис. 2b, с. В следующей области $k_0 < |\mathbf{k}_{||}| < k_0 n_{\rm sub} \approx$ $\approx 1.51 k_0$ (отмечено желтым на схеме), моды утекают только в сторону подложки (рис. 1d). Наконец, для $|{\bf k}_{||}| > k_0 n_{
m sub} \approx 1.51 k_0$ (зеленая область на схеме), режим распространения мод полностью волноводный. Что означает, что они полностью изолированы от излучения свободного пространства как в подложке, так и в воздухе. Эти моды могут быть эванесцентно возбуждены через высокоиндексную SIL в геометрии НПВО (рис. 1е). Отметим, что в эксперименте ТМполяризованная мода проявляется как спектральная особенность с асимметрией (рис. 2с), вызванной хроматическими аберрациями объектива. В этом спектральном диапазоне объектив, скорректированный на ближний инфракрасный диапазон, будет работать лучше, однако модели таких объективов обычно обладают более низкой числовой апертурой.

Как отмечалось ранее, вещественная часть дисперсии может быть легко извлечена из карт НПВО, измеренных при одной величине зазора в докрити-

ческом режиме связи, рис. 2b, с. Однако для оценки внутренних потерь моды необходимо отличать их от радиационного затухания, вызванного SIL. Для этого мы провели серию измерений карт НПВО с возрастающей силой прижима образца к SIL, контролируемой с помощью пьезопозиционера и микрометрического винта. Измеренные сечения карт НПВО для ТЕ поляризации в зависимости от величины силы прижима и волнового вектора в плоскости k_{\parallel}/k_0 , полученные при фиксированной частоте f == 432 ТГц, показаны на рис. За. Сравнивая данные эксперимента с результатами численного моделирования (рис. 3b), можно сделать вывод, что минимальный воздушный зазор, достигнутый в эксперименте, составляет около 60 нм. Скорее всего, эта величина обусловлена механическим сопротивлением из-за частиц пыли между поверхностями образца и SIL и ограничена максимальной силой прижима, которую может обеспечивать пьезопозиционер.

Измеренные и рассчитанные карты отражения, продемонстрированные на рис. За, b, демонстрируют минимум, достигающий нуля (рис. 3с, d) при определенной силе прижима и размере зазора соответственно. Этот режим соответствует критической связи, когда радиационное затухание становится равным собственным потерям моды [26]. Действительно, как показано на рис. 3е, f, полная ширина на полувысоте (FWHM) провала, полученная из аппроксимации провала отражения (как функции $k_{||}/k_0$) кривой Лоренца, в этом режиме ровно в два раза больше, чем при больших зазорах, когда радиационные потери малы, а полные потери асимптотически стремятся к величине, отвечающей собственным потерям моды.

Важным преимуществом предлагаемого подхода перед предыдущими является отсутствие необходимости измерять [35] или контролировать [27] величину воздушного зазора. Для экспериментальной идентификации критического режима связи необходимо достичь минимума коэффициента отражения (рис. 3с, d), после чего рассчитать собственные потери (мнимую часть волнового вектора $\Delta k_{||}$) и длину распространения $L_{\rm prop}$ волноводной моды из ширины провала отражения на полувысоте (FWHM):

$$\frac{\Delta k_{||}}{k_0} = \text{FWHM},\tag{2}$$

$$L_{\rm prop} = \frac{1}{2\Delta k_{||}} = \frac{\lambda_0}{4\pi \rm FWHM},\tag{3}$$

где λ_0 – длина волны в вакууме.

На рисунке 4а показаны извлеченные дисперсии ТЕ- и ТМ-мод, наблюдаемые на картах коэффициента отражения с угловым разрешением (рис. 2). В зависимости от типа моды и частоты света, режим критической связи достигается при разных силах прижима и соответствующих воздушных зазорах. Тем не менее, даже без точного знания величины зазора, для каждой частоты этот режим реализуется при достижении минимума коэффициентом отражения. Спектральная зависимость длин распространения мод показана на рис. 4b. Для сравнения, на рис. 4 также приведены рассчитанные данные дисперсии и потерь в волноводе из кристаллического кремния толщиной 225 нм. Как и следовало ожидать, данные расчетов отличаются от результатов экспериментов, полученных для кремниевого волновода с шероховатой поверхностью 2-4 нм, изготовленного при помощи магнетронного напыления.



Рис. 4. (Цветной онлайн) (a) – Измеренная и рассчитанная дисперсия двух мод с ТЕ и ТМ поляризацией, распространяющихся в кремниевом планарном волноводе толщиной 225 нм, расположенном на стеклянной подложке. (b) – Спектральные зависимости измеренных и рассчитанных длин распространения этих мод. Данные моделирования приведены для кристаллического кремния [34]

4. Заключение. Таким образом, мы предлагаем неинвазивный экспериментальный подход, который позволяет извлекать полную комплексную дисперсию оптических волноводных мод или поверхностных волн, поддерживаемых произвольными планарными фотонными структурами. Изменяя воздушный зазор в геометрии нарушенного полного внутреннего отражения с угловым и спектральным разрешением, мы идентифицируем режим критической связи мод свободного пространства и интересующей нас моды и извлекаем ее длину распространения как функцию частоты. Предлагаемая методика является универсальным инструментом для экспериментального исследования оптических свойств метаповерхностей, фотонно-кристаллических волноводов и волноводов, поддерживающих неизлучающиеся плазмонные, экситонные или фононные поляритоны.

Авторы выражают благодарность Изабель Штауде за постановку вопроса, Ивану Мухину за помощь в изготовлении образцов и Андрею Богданову за плодотворные обсуждения.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант # 19-72-00176).

- J. Polo, T. Mackay, and A. Lakhtakia, *Electromagnetic surface waves: a modern perspective*, Elsevier, Waltham, MA, USA (2013).
- M. L. Calvo and V. Lakshminarayanan, Optical waveguides: from theory to applied technologies, CRC Press, London, UK (2018).
- 3. H. A. Haus, Waves and fields in optoelectronics, Prentice-Hall, Englewood cliffs, NJ (1984).
- F. Bonaccorso, Z. Sun, T. Hasan, and A. Ferrari, Nature Photon. 4, 611 (2010).
- T. Tamir, G. Griffel, and H.L. Bertoni, *Guided-Wave Optoelectronics: Device Characterization, Analysis, and Design*, Springer, Boston, MA, USA (2013).
- E. A. Bezus, L. L. Doskolovich, D. A. Bykov, and V. A. Soifer, JETP Lett. 99, 63 (2014).
- Y. Liu and X. Zhang, Appl. Phys. Lett. 103, 141101 (2013).
- O. Takayama, A. Bogdanov, and A.V. Lavrinenko, J. Phys. Condens. Matter 29, 463001 (2017).
- Z. Guo, H. Jiang, and H. Chen, J. Appl. Phys. 127, 071101 (2020).
- O.V. Kotov and Y.E. Lozovik, Phys. Rev. B 100, 165424 (2019).
- V. Lousse, W. Suh, O. Kilic, S. Kim, O. Solgaard, and S. Fan, Opt. Express **12**, 1575 (2004).
- Z. Liu, S. Tibuleac, D. Shin, P. Young, and R. Magnusson, Opt. Lett. 23, 1556 (1998).
- A. Christ, S. Tikhodeev, N. Gippius, J. Kuhl, and H. Giessen, Phys. Rev. Lett. **91**, 183901 (2003).
- H. Raether, Surface plasmons on smooth and rough surfaces and on gratings, Springer, Berlin, Heidelberg (1988).
- S. A. Maier, *Plasmonics: fundamentals and applications*, Springer, NY, USA (2007).
- D. A. Bykov, L. L. Doskolovich, and V. A. Soifer, JETP Lett. 95, 6 (2012).

- A. Otto, Zeitschrift f
 ür Physik A Hadrons and Nuclei 216, 398 (1968).
- M. Galli, M. Belotti, D. Bajoni, M. Patrini, G. Guizzetti, D. Gerace, M. Agio, L. Andreani, and Y. Chen, Phys. Rev. B 70, 081307 (2004).
- M. Galli, D. Bajoni, M. Patrini, G. Guizzetti, D. Gerace, L. Andreani, M. Belotti, and Y. Chen, Phys. Rev. B 72, 125322 (2005).
- A. Samusev, I. Mukhin, R. Malureanu, O. Takayama, D. V. Permyakov, I. Sinev, D. Baranov, O. Yermakov, I. Iorsh, A. Bogdanov, and A. Lavrinenko, Opt. Express 25, 32631 (2017).
- D. Permyakov, I. S. Sinev, S. Sychev, A. S. Gudovskikh, A. Bogdanov, A. Lavrinenko, and A. Samusev, JETP Lett. **107**, 10 (2018).
- D. Pidgayko, I. Sinev, D. Permyakov, S. Sychev, F. Heyroth, V. Rutckaia, J. Schilling, A. Lavrinenko, A. Bogdanov, and A. Samusev, ACS Photonics 6, 510 (2018).
- J. Schoenwald, E. Burstein, and J. Elson, Solid State Commun. 12, 185 (1973).
- P. Dawson, B. Puygranier, and J. Goudonnet, Phys. Rev. B 63, 205410 (2001).
- M. Haruna, Y. Segawa, and H. Nishihara, Electron. Lett. 28, 1612 (1992).

- L. Novotny and B. Hecht, *Principles of nano-optics*, Cambridge University Press, Cambridge, England, UK (2012).
- 27. D.-Z. A. Chen and G. Chen, Appl. Phys. Lett. 91, 121906 (2007).
- B. Neuner III, D. Korobkin, C. Fietz, D. Carole, G. Ferro, and G. Shvets, Opt. Lett. 34, 2667 (2009).
- 29. M. R. Querry, Optical constants of minerals and other materials from the millimeter to the ultraviolet, Chemical Research, Development & Engineering Center, US Army Armament (1987).
- 30. L. Li, JOSA A 14, 2758 (1997).
- L. Li, Journal of Optics A: Pure and Applied Optics 5, 345 (2003).
- L. Li, in Mathematical modeling in optical science, SIAM, Philadelphia, PA (2001), p. 111.
- N-BK7 SCHOTT[®], Schott Optics Glass Catalogue data sheet # 517642.251 (2017).
- C. Schinke, P. Christian Peest, J. Schmidt, R. Brendel, K. Bothe, M. Vogt, I. Kröger, S. Winter, A. Schirmacher, S. Lim, H. Nguyen, and D. MacDonald, AIP Adv. 5, 067168 (2015).
- K. Pufahl, N.C. Passler, N.B. Grosse, M. Wolf, U. Woggon, and A. Paarmann, Appl. Phys. Lett. 113, 161103 (2018).

Параметры световой пули

Е. Д. Залозная^{+*1)}, А. Е. Дормидонов⁺, В. О. Компанец⁺, С. В. Чекалин⁺, В. П. Кандидов^{+*}

+Институт спектроскопии РАН, 108840 Троицк, Москва, Россия

* Физический факультет, МГУ им. М.В. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 6 мая 2021 г. После переработки 13 мая 2021 г. Принята к публикации 14 мая 2021 г.

Введены абсолютные параметры световой пули, формирующейся при филаментации фемтосекундного излучения среднего ИК-диапазона в условиях аномальной дисперсии групповой скорости. На основе анализа области локализации светового поля, полученной решением уравнений однонаправленного распространения импульсного излучения, впервые определены длительность и радиус световой пули. Исследована эволюция длительности и радиуса области сильного светового поля, пиковая мощность и локализация энергии в процессе компрессии волнового пакета и образования световой пули при филаментации фемтосекундного лазерного излучения в LiF. Развит единый метод определения параметров волновых пакетов, не зависящий от их формы и ширины спектра.

DOI: 10.31857/S1234567821120077

Явление фемтосекундной филаментации представляет собой локализацию энергии лазерного излучения, распространяющегося в объеме прозрачной диспергирующей среды, при которой высокая концентрация светового поля поддерживается на расстоянии, значительно превышающем рэлеевскую длину. Это явление возникает в результате динамического баланса самофокусировки излучения в среде с керровской нелинейностью и его дефокусировки на свободных электронах, образованных в результате ионизации среды [1, 2]. Формирование протяженных плазменных каналов, генерация широкополосного суперконтинуума и конической эмиссии, неотъемлемо сопровождающие формирование филаментов, находят практическое применение в спектроскопии, в создании элементов микрооптики и других областях современной нелинейной оптики, в связи с чем вызывают большой интерес [3].

На эволюцию излучения в процессе филаментации существенное влияние оказывает дисперсия групповой скорости (ДГС)[4–8]. Импульс распадается во времени с образованием субимпульсов при филаментации в условиях нормальной ДГС и испытывает компрессию при аномальной ДГС. В объеме прозрачной среды филамент представляет собой создаваемый излучением виртуальный волновод, в котором ДГС определяется материальной дисперсией среды. В оптических волокнах, фотонных кристаллах, капиллярах пространственная локализация из-

Пространственно-временная компрессия ИМпульсного излучения и образование световых пуль при распространении в объеме среды с кубической нелинейностью при аномальной ДГС предсказана аналитически в [13] в параболическом приближении метода медленно меняющихся амплитуд [14] и численно в [6, 15] в приближении медленно меняющейся волны [16]. Вследствие совместной и согласованной компрессии излучения как в пространстве при самофокусировке, так и во времени в условиях аномальной ДГС вследствие фазовой самомодуляции в кубичной среде формируется экстремально сжатый волновой пакет с высокой локализацией светового поля, получивший название световая пуля (СП) [13].

Экспериментально СП зарегистрированы в конденсированных средах при филаментации фемтосекундного излучения по сокращению его длительности [17, 18], по эволюции пространственновременного распределения интенсивности [19, 20]. В [21, 22] аналитически, численно и экспериментально определена область параметров волнового пакета, при которых возможно его пространственновременное коллапсирование и возникновение СП. Длина ее пробега составляет около 0.5 мм в однород-

лучения задается направляющей структурой, а ДГС определяется ее модовой дисперсией. Влияние ДГС на компрессию фемтосекундного импульса в планарном волноводе с керровской нелинейностью исследовано в [9, 10], возможность формирования при аномальной ДГС трехмерных солитонов в оптических волокнах – в [11, 12].

¹⁾e-mail: ed.zaloznaya@physics.msu.ru

ном нелинейном твердотельном диэлектрике [23, 24], несколько метров в воздухе при атмосферных условиях [25] и не зависит от количества СП в последовательности [26, 27].

СП представляет собой локализованное высокоинтенсивное ядро, окруженное энергетическим резервуаром [19], что обеспечивает ее робастность и способность к самовосстановлению [28, 29].

Стремительное сжатие волнового пакета и в пространстве, и во времени при образовании СП, которое сопровождается значительными искажениями исходного профиля излучения, вызывают сложности при попытках введения унифицированного понятия размеров СП. Длительность сформировавшейся СП оценивается в один-два периода оптических осцилляций, и в ее определении нередко используются термины одноцикловая и близкая к одноцикловой СП [17, 18, 20]. Вместе с тем, в определении параметров СП существует неопределенность, связанная с ее малыми размерами, короткой длительностью и сложной формой. Так, длительность СП, измеренная автокорреляционным методом при филаментации в плавленом кварце импульса на длине волны 1800 нм, составила 11.8-13.5 фс при апертуре регистрации 50 мкм и 15-20 фс - в апертуре 100 мкм [17, 30]. Использование в экспериментах диафрагмы, апертура которой включает не только высокоинтенсивное ядро СП, но и периферию волнового пакета, не испытавшую временной компрессии, приводит к завышенным оценкам длительности. При этом в расчетах длительности импульса по ширине его автокорреляционной функции используется коэффициент, величина которого, согласно [17], при существенно асимметричной форме СП значительно меньше, чем для гауссова импульса. В измерениях методом построения трехмерных изображений по пространственно-разрешенной функции кросс-корреляции длительность СП на длине волны 1800 нм составила 46 фс в плавленом кварце и 43 фс в сапфире при диаметре высокоинтенсивного ядра 15 мкм [20, 31]. В численных исследованиях длительность СП в плавленом кварце оценена по распределению интенсивности в интервале 5-10 фс на длине волны 1550 нм [15, 21] и 10-11 фс – на 1800 нм при диаметре диафрагмы 50 мкм [26, 30].

Неоднозначность оценок длительности и радиуса СП, получаемых различными экспериментальными методами и в численных исследованиях, использование качественного понятия одноцикловости по отношению к световой пуле, спектр которой обогацен высшими гармониками, свидетельствуют об отсутствии единого подхода в анализе пространственных и временных параметров СП, формирующейся при экстремальной компрессии и сильных искажениях волнового пакета.

В настоящей работе определены параметры СП на основе анализа результатов численного исследования эволюции волнового пакета, описываемой уравнениями однонаправленного распространения фемтосекундного излучения в нелинейной среде при аномальной ДГС. Длительность, радиус и энергия СП вычислены по пространственно-временному распределению напряженности электрического поля в области локализации сильного светового поля. Общий метод определения параметров излучения продемонстрирован на трансформации квазимонохроматического волнового пакета в световую пулю.

Трансформация фемтосекундного волнового пакета при филаментации во фториде лития в условиях аномальной ДГС численно исследована компьютерным кодом [32], разработанным для решения однонаправленного уравнения распространения импульсного излучения (UPPE) [33]. Уравнение, записанное для спектральной компоненты напряженности электрического поля $\check{E}(\omega, k_r, z)$ в нелинейной диспергирующей среде, имеет следующий вид в бегущей системе координат при аксиальной симметрии:

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} - ik_z(\omega)\right) \check{E}(\omega, k_r, z) =$$

$$= \frac{in_0\omega^2}{2k_z(\omega)c_0^2} [n_2I + 2\Delta n_{pl}]\check{E}(\omega, k_r, z) -$$

$$- \frac{n_0\omega}{4k_z(\omega)c_0} [\alpha + \sigma N_e]\check{E}(\omega, k_r, z), \qquad (1)$$

где $k_z^2(\omega) = \omega^2 n^2(\omega)/c_0^2 - k_r^2$; $n(\omega)$ – дисперсия LiF, описываемая формулой Селмейера, $n_0 = n(\omega_0)$ – показатель преломления среды на несущей частоте; c_0 – скорость света в вакууме, n_2 – коэффициент кубичной нелинейности.

Изменение концентрации свободных электронов N_e в процессе полевой ионизации среды со скоростью $W_F(|E|^2)$ и лавинной ионизации со скоростью W_A при филаментации импульса описывается уравнением:

$$\frac{\partial N_e}{\partial t} = W_F(|E|^2) \left(1 - \frac{N_e}{N_0}\right) + W_A N_e, \qquad (2)$$

где N_0 – концентрация нейтральных атомов. Скорость полевой ионизации $W_F(|E|^2)$ рассчитывается по теории Келдыша [34], скорость лавинной ионизации определяется частотой неупругих столкновений электронов с нейтральными атомами $W_A = \nu_i = e^2 \nu_c |E|^2 / m_e U_i (\nu_c^2 + \omega^2)$, где e, m_e – заряд и масса



Рис. 1. (Цветной онлайн) Пространственно-временная картина осцилляций напряженности электрического поля E(r,t) излучения на длине волны 3100 нм при распространении в LiF на расстояние: (a) – z = 1.5 мм; (b) – z = 1.9 мм; (c) – z = 2.0 мм; (d) – z = 2.3 мм. Длительность импульса $2\tau_0 = 120$ фс, радиус пучка $r_0 = 30$ мкм, энергия W = 15.5 мкДж ($P = 1.4P_{cr}, P_{cr} = 0.1$ ГВт). Излучение распространяется справа налево. Положительная напряженность в осцилляциях представлена красным, отрицательная – синим цветом, форма импульса на оси волнового пакета – салатовой линией

электрона; ν_c – частота упругих столкновений электронов с нейтралами, U_i – ширина запрещенной зоны диэлектрика. Для LiF – $\nu_i \sim 10^{15}$ Гп, $\nu_c \sim 10^{14}$ Гп, $U_i = 13.6$ эВ. В уравнении (2) отсутствует слагаемое, учитывающее рекомбинацию свободных электронов, характерные времена которой на несколько порядков превышают длительность фемтосекундного импульса. Приращение показателя преломления, вызванное появлением лазерной плазмы, равно $\Delta n_{pl} = -e^2 N_e/2n_0 m_e \epsilon_0 \omega^2$, сечение тормозного поглощения – $\sigma = (2e^2/m_e \epsilon_0 n_0 c_0)[\nu_c/(\nu_c^2 + \omega^2)]$, коэффициент ослабления за счет полевой ионизации среды – $\alpha = K\hbar w_0 W_F (|E|^2)(1 - N_e/N_0)$, где $\epsilon_0 = 8.85$ п Φ/m – электрическая постоянная.

Формирование СП рассмотрено при филаментации коллимированного спектрально ограниченного волнового пакета с гауссовым распределением напряженности электрического поля в пространстве и во времени:

$$E(r,t,z=0) = E_0 \exp(-\frac{r^2}{2r_0^2} - \frac{t^2}{2\tau_0^2})\cos(\omega_0 t), \quad (3)$$

$$I(r,t,z=0) = I_0 \exp(-\frac{r^2}{r_0^2} - \frac{t^2}{\tau_0^2}),$$
(4)

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

где $2\tau_0, r_0$ – длительность и радиус волнового пакета, определяемые по уровню e^{-1} распределения интенсивности. Излучение на длине волны, перестраиваемой в диапазоне $\lambda_0 = 1900 \div 3500 \,\mathrm{hm}$, распространялось во фториде лития. Длительность исходного многоциклового волнового пакета составляла $2\tau_0 = 120\,{\rm фc},$ радиус – $r_0 = 30\,{\rm мкм},$ пиковая мощность $P = 1.4P_{cr}$, где $P_{cr} = 0.1\,\Gamma\text{Bt}$ – критическая мощность стационарной самофокусировки. Характеристики излучения при численном моделировании выбирались согласно возможностям экспериментальной установки "Многоцелевой лазерный комплекс" Института спектроскопии РАН и соответствовали параметрам проводимых на ней исследований [35]. Пространственно-временные распределения напряженности электрического поля E(r, t, z), полученные в результате решения системы уравнений (1)-(2) с условиями (3), иллюстрируют трансформацию волнового пакета при филаментации и образовании СП (рис. 1).

Видно, что начальный этап распространения излучения (z = 1.5 мм) не сказывается на форме многоциклового волнового пакета, распределение E(r,t) остается подобно первоначальному – гауссовому по

819



Рис. 2. Квадрат модуля напряженности поля $|E(t)|^2$ на оси волнового пакета на расстоянии: (a) – z = 1.5 мм; (b) – z = 1.9 мм. Длина волны $\lambda_0 = 3100$ нм, длительность импульса $2\tau_0 = 120$ фс, радиус пучка $r_0 = 30$ мкм, энергия W = 15.5 мкДж ($P = 1.4P_{cr}, P_{cr} = 0.1$ ГВт). E_0 – пиковое значение напряженности поля на оси при z = 0 мм. Излучение распространяется справа налево



Рис. 3. Трансформация границы $L|_{z}(r,t) = 0$ области локализации высокой напряженности электрического поля при пространственно-временной компрессии волнового пакета в LiF в условиях аномальной ДГС. Излучение распространяется справа налево

пространству и по времени (рис. 1а). Тем не менее, пиковая амплитуда поля на расстоянии z = 1.5 мм вдвое превышает начальное значение, что свидетельствует о пространственно-временной компрессии излучения. С увеличением расстояния z возникают значительные искажения волнового пакета, обусловленные накоплением эффектов самовоздействия, в условиях керровской и плазменной нелинейностей

(рис. 1b-d). Керровская нелинейность приводит к локальному увеличению оптической плотности среды, вследствие чего максимум напряженности электрического поля сдвигается к хвосту импульса. Помимо этого, максимум напряженности поля смещается и от оси волнового пакета, что свидетельствует о формировании кольцевой структуры на его хвосте из-за расходимости излучения, вызванной сильной аберрационной дефокусировкой в наведенной лазерной плазме. Самофокусировка на переднем фронте волнового пакета и дефокусировка в плазме на его хвосте приводят к формированию крутого заднего фронта с резким падением напряженности электрического поля (рис. 1с, d). Такие искажения волнового пакета сопровождаются генерацией суперконтинуума, что заметно по появлению высокочастотных осцилляций поля (рис. 1с). При распространении высокочастотные осцилляции охватывают все большую часть расходящегося излучения (рис. 1d). Совокупность нескольких осцилляций высокой амплитуды напряженности электрического поля в волновом пакете является световой пулей (рис. 1c, d).

Если при анализе квазигармонического волнового пакета с малыми искажениями осцилляций E(r,t) (рис. 1а) можно воспользоваться существующими определениями радиуса и длительности волнового пакета по распределению интенсивности, то при изучении СП (рис. 1d) возникает вопрос – что именно считать ее радиусом и длительностью? Эта проблема связана со сложной формой и малыми размерами СП, состоящей всего из нескольких осцилляций на несущей частоте и осцилляций высоких частот электрического поля E(r, t), область локализации которого качественно меняется при ее образовании (рис. 1).

При компрессии волнового пакета световое поле стягивается к его оси, и при образовании СП формируется узкий максимум электрической напряженности с крутым задним фронтом (рис. 1). Квадрат напряженности электрического поля $|E(r,t)|^2$ пропорционален интенсивности, и на основе анализа его распределения можно определить область локализации сильного светового поля, пространственный и временной масштабы которой характеризуют длительность и радиус искаженного волнового пакета и образующейся СП.

Определим границу области сильного светового поля кривой $L|_{z}(r,t) = 0$, на которой квадрат напряженности электрического поля $|E(r,t,z)|_{r,t\in L}^2$ в е раз меньше пиковой величины $\max_t |E(r=0,t,z)|^2$ на рассматриваемом расстоянии. В случае гауссова волнового пакета значение r, удовлетворяющее уравнению кривой $L|_{z}(r,t) = 0$ для t, определяющего временной слой с максимумом поля, совпадает с радиусом r_0 , а интервал времени между границами области на оси $L|_{z}(r=0,t) = 0$, совпадает с длительностью $2\tau_0$ в аналитическом представлении (4).

В качестве примера на рис. 2 точками пересечения огибающей квадрата напряженности поля $|E(t)|^2$ и горизонтальной прямой, проведенной на уровне e^{-1} от максимального значения квадрата напряженности $\max_t |E(r=0,t,z)|^2$, отмечены границы во времени области сильного светового поля на оси волнового пакета. В начале распространения волновой пакет остается многоцикловым и форма огибающей $|E(t)|^2$ близка к первоначальной гауссовой как на оси, так и на периферии пучка. Незначительные искажения формы волнового пакета на расстоянии $z = 1.5 \,\mathrm{MM}$ вызваны его самокомпрессией до образования плазмы, что привело к росту напряженности электрического поля, наиболее значительному на оси, но практически не нарушило симметричную форму волнового пакета (рис. 2a). На расстоянии z = 1.9 мм волновой пакет сильно искажен из-за дефокусировки хвостовой части наведенной лазерной плазмой (рис. 2b). При этом искажения охватывают и периферию пучка (рис. 1с, d).

Граница области локализации сильного светового поля, определяемая по уровню e^{-1} от максимального значения квадрата модуля электрической напряженности max_t $|E(r = 0, t, z)|^2$, симметрична на плоскости (r, t). Для многоциклового волнового пакета (4) границей области $L|_z(r, t)$ на плоскости (r, t) является эллиптическая кривая, характерная для гауссова волнового пакета (рис. 3). С увеличением длины рас-

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

пространения область сильного поля сжимается и в пространстве, и во времени. Область остается подобна сама себе в начале филаментации при согласованной компрессии волнового пакета в пространстве и времени ($z \lesssim 1.6$), что свидетельствует о малых искажениях волнового пакета на этом расстоянии.

Смещение центра эллиптической границы к хвосту волнового пакета является следствием проявления кубической нелинейности среды. При образовании СП (z = 1.9-2 мм) область сильного поля качественно видоизменяется, принимая коническую форму (рис. 3). Для искаженного волнового пакета и образовавшейся СП на расстоянии $z \ge 1.9$ мм граница области далека от эллиптической.

В качестве единых параметров для волнового пакета и СП введем локальный радиус r_e , равный его максимальной величине для области сильного поля на расстоянии z, и локальную длительность $2\tau_e$, равную временному интервалу между границами области на оси (рис. 3). Для рассматриваемого излучения локальная длительность СП (z = 2 мм) составляет $2\tau_e = 10.6$ фс, локальный радиус – $r_e = 8.8$ мкм.

Локальные параметры не отражают перераспределение светового поля в рассматриваемой области и не соответствуют возможным экспериментальным измерениям, которые осуществляются в апертуре конечного диаметра. Рассмотрим эффективные параметры, где длительность $2\tau_{\text{eff}}$ и радиус r_{eff} определяются с весовым множителем пропорциональным квадрату модуля поля:

$$\tau_{\text{eff}}^2(z) = \frac{\int_0^{r_e} r dr \int_{t_1}^{t_2} t^2 dt |E(r, t, z)|^2}{W_{\text{HF}}(z)},$$
(5)

$$\mathbf{f}_{\text{eff}}^{2}(z) = \frac{\int_{0}^{r_{e}} r dr \int_{t_{1}}^{t_{2}} r^{2} dt |E(r,t,z)|^{2}}{W_{\text{HF}}(z)},$$
(6)

$$W_{\rm HF}(z) = \int_0^{r_e} r dr \int_{t_1}^{t_2} dt |E(r, t, z)|^2, \qquad (7)$$

где $W_{\rm HF}(z)$ – энергия, заключенная в области сильного светового поля (High Field), $t_1(r)$ и $t_2(r)$ – границы области $L|_z(r,t) = 0$ в локальной системе координат с началом отсчета в максимуме напряженности поля на рассматриваемом радиусе r.

1

Следует заметить, что для многоциклового гауссова волнового пакета эффективные длительность $2\tau_{\text{eff}}$ и радиус r_{eff} совпадают с соответствующими локальными параметрами, а также с длительностью и радиусом волнового пакета, определяемыми по уровню e^{-1} (4).

В начале распространения локальные и эффективные параметры монотонно убывают с увеличением расстояния z, что свидетельствует о согласованной пространственно-временной компрессии волнового пакета (рис. 4). Количественное совпадение эффективного и локального размеров на расстоянии $z \leq 1.7$ мм непосредственно связано с отсутствием значительных изменений формы волнового пакета и сохранением распределения напряженности поля, близкого к гауссову. При этом уменьшение радиуса, вызванное самофокусировкой, на начальном этапе оказывается значительнее сокращения длительности, которое обусловлено одномерной компрессией волнового пакета во времени. Более стремительное уменьшение длительности на расстоянии z > 1.7 мм вызвано укорочением хвоста импульса при дефокусировке на плазме, которая генерируется при резком увеличении напряженности в образующейся СП. При этом в СП, которая содержит несколько оптических осцилляций, длительность и радиус меняются немонотонно с расстоянием вследствие эффекта "дыхания", связанного со сдвигом абсолютной фазы светового поля [35]. С уменьшением длительности и радиуса СП при ее формировании (z > 1.9 мм) амплитуда осцилляций параметров возрастает. Диапазоны изменения локальных и эффективных значений радиуса и длительности осциллирующей СП на рис. 4 проиллюстрированы тоновыми областями.



Рис. 4. (Цветной онлайн) Изменение с расстоянием относительной величины локальных и эффективных параметров длительности τ_e/τ_0 , $\tau_{\rm eff}/\tau_0$ и радиуса r_e/r_0 , $r_{\rm eff}/r_0$ при компрессии волнового пакета и образовании СП при филаментации фемтосекундного излучения в LiF, $\lambda_0 = 3100$ нм, $\tau_0 = 60$ фс, $r_0 = 30$ мкм

Значительная трансформация волнового пакета и распределения напряженности светового поля в нем

при z > 1.8 мм (рис. 1) приводит к появлению различий между параметрами СП, определенными локально и эффективно (рис. 4).

Для исследования влияния длины волны излучения на параметры формирующейся в филаменте СП рассмотрено излучение на длинах волн $\lambda_0 = 1900$, 2600, 3100, 3350 и 3500 нм при одинаковой длительности, радиусе и превышении пиковой мощности над критической. На рассмотренных длинах волн значения локальных и эффективных радиуса и длительности СП, отнесенные к несущей длине волны излучения и начальному периоду осцилляций светового поля $T_0 = \lambda_0/c_0$ соответственно, представлены на рис. 5. Доверительные интервалы приведенных значений соответствуют изменениям длительности и радиуса СП, связанным с ее "дыханием".



Рис. 5. Усредненные по осцилляциям относительные величины локального r_e/λ_0 и эффективного $r_{\rm eff}/\lambda_0$ радиуса, локальной $2\tau_e/T_0$ и эффективной $2\tau_{\rm eff}/T_0$ длительности СП на длине волны 1900, 2600, 3100, 3350 и 3500 нм

Абсолютные значения и радиуса, и длительности СП увеличиваются с длиной волны импульса. При увеличении центральной длины волны от 1900 до 3500 нм эффективная длительность возрастает от 14 до 21 фс, локальная – от 10 до 16 фс. Длительность СП составляет меньше двух периодов оптических осцилляций T_0 (рис. 5). При этом отношение длительности СП к периоду оптических осцилляций T_0 не зависит от длины волны λ_0 и равно в случае локальной $\tau_e/T_0 \approx 1.3$ и эффективной $\tau_{\rm eff}/T_0 \approx 1.8$. Эффективный и локальный радиусы совпадают и с увеличением длины волны возрастают от 2.5 до 12 мкм, что является следствием ослабления доминирующего влияния самофокусировки при образовании СП (рис. 5).

Пиковая мощность волнового пакета в начале его компрессии практически не меняется, оставаясь близкой к первоначальному значению $P_{\text{peak}}/P_{cr} =$ = 1.4, и увеличивается при образовании СП, осциллируя вследствие ее "дыхания" [35] (рис. 6).



Рис. 6. Изменение с расстоянием пиковой мощности $P_{\rm peak}/P_{cr}$ и величины энергии $W_{\rm LB}/W_{\rm LB}(0)$ в пространственно-временном масштабе СП при компрессии волнового пакета на длине волны 3100 нм. $W_{\rm LB}(0)$ – энергия первоначального светового поля в области СП

Локализацию энергии светового поля при пространственно-временной компрессии волнового пакета характеризует изменение с расстоянием ее величины $W_{\rm LB}$ в пространственно-временном масштабе СП (рис. 6). Энергия СП возрастает с увеличением длины волны и составляет $W_{\rm LB} = 1.0$ мкДж при $\lambda_0 = 3100$ нм и 1.5 мкДж при $\lambda_0 = 3500$ нм. Независимо от несущей длины волны, энергия СП составляет ~7% общей энергии волнового пакета.

Параметры СП, вычисляемые по распределению напряженности электрического поля, являются характеристиками, не зависящими от пространственно-временных искажений волнового пакета, и трансформаций его спектра. Для рассмотренного спектрального диапазона локальный и эффективный радиус СП совпадают и монотонно увеличиваются с несущей длиной волны, составляя $1.2 \div 3.3\lambda_0$. Локальная длительность, определяемая на оси, меньше эффективной, составляющей 1.8 периода оптических осцилляций. Эффективную длительность, учитывающую рас-

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

пределение светового поля в апертуре СП, можно рассматривать как нижний предел в экспериментальных измерениях. Развитый подход определения параметров оптического излучения на основе анализа пространственно-временного распределения напряженности электрического поля обобщает характеристики квазимонохроматических волновых пакетов на СП, длительность и радиус которых близки к периоду и длине волны светового поля соответственно.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда #18-12-00422, Е.Д. Залозная благодарит фонд развития теоретической физики и математики "БАЗИС" и международное оптическое сообщество SPIE за финансовую поддержку исследований.

- A. Couairon and A. Myzyrowicz, Phys. Rep. 441, 47 (2007).
- В. П. Кандидов, С. А. Шленов, О. Г. Косарева, Квантовая электроника **39**, 205 (2009).
- 3. С. В. Чекалин, В. П. Кандидов, УФН **183**, 133 (2013).
- 4. K. D. Moll and A. L. Gaeta, Opt. Lett. 29, 995 (2004).
- 5. S. Skupin and L. Berge, Physica D 220, 14 (2006).
- E. O. Smetanina, A. E. Dormidonov, and V. P. Kandidov, Laser Phys. 22, 1189 (2012).
- M. Hemmer, M. Baudisch, A. Thai, A. Couairon, and J. Biegert, Opt. Express 21, 28095 (2013).
- 8. J. Liu, R. Li, and Z. Xu, Phys. Rev. A 74, 043801 (2006).
- H.S. Eisenberg, R. Morandotti, Y. Silberberg, S. Bar-Ad, D. Ross, and J.S. Aitchison, Phys. Rev. Lett. 87, 043902 (2001).
- S. Sazonov, A. Kalinovich, I. Zakharova, M. Komissarova, and P. Shestakov, EPJ. Web of Conf. 161, 02009 (2017).
- A.B. Fedotov, Yu.N. Kondrat'ev, V.S. Shevandin, K.V. Dukel'skii, A.V. Khokhlov, and A.M. Zheltikov, Laser Phys. 16, 957 (2006).
- D. Mihalache, D. Mazilu, F. Lederer, Y. V. Kartashov, L. C. Crasovan, and L. Torner, Phys. Rev. E 70, 055603 (2004).
- 13. Y. Silberberg, Opt. Lett. 15, 1282 (1990).
- S. A. Akhmanov, A. P. Sukhorukov, and R. V. Khokhlov, Sov. Phys.-Uspekhi 10, 609 (1968).
- L. Bergé and S. Skupin, Phys. Rev. Lett. 100, 113902 (2008).
- T. Brabec and F. Krausz, Phys. Rev. Lett. 78, 3282 (1997).
- E. O. Smetanina, V. O. Kompanets, A. E. Dormidonov, S. V. Chekalin, and V. P. Kandidov, Laser Phys. Lett. 10, 105401 (2013).

- M. Durand, A. Jarnac, A. Houard, Y. Liu, S. Grabielle, N. Forget, A. Durécu, A. Couairon, and A. Mysyrowicz, Phys. Rev. Lett. **110**, 115003 (2013).
- D. Majus, G. Tamošauskas, I. Gražulevičiūtė, N. Garejev, A. Lotti, A. Couairon, D. Faccio, and A. Dubietis, Phys. Rev. Lett. **112**, 193901 (2014).
- I. Gražulevičiūtė, R. Šuminas, G. Tamošauskas, A. Couairon, and A. Dubietis, Opt. Lett. 40, 3719 (2015).
- 21. L. Bergé and S. Skupin, Phys. Rev. E 71, 065601 (2005).
- Е. Д. Залозная, В. О. Компанец, А. Е. Дормидонов, С. В. Чекалин, В. П. Кандидов, Квантовая электроника 48, 366 (2018).
- С.В. Чекалин, В.О. Компанец, Е.Д. Залозная, В.П. Кандидов, Квантовая электроника 49, 344 (2019).
- С.В. Чекалин, В.О. Компанец, А.Е. Дормидонов, В.П. Кандидов, Квантовая электроника 48, 372 (2018).
- P. Panagiotopoulos, P. Whalen, M. Kolesik, and J. V. Moloney, Nature Photon. 9, 543 (2015).
- S. V. Chekalin, A. E. Dokukina, and A. E. Dormidonov, J. Phys. B 48, 094008 (2015).

- 27. Е.Д. Залозная, А.Е. Дормидонов, В.П. Кандидов, Оптика атмосферы и океана **29**, 184 (2016).
- I. Gražulevičiūtė, G. Tamošauskas, V. Jukna, A. Couairon, D. Faccio, and A. Dubietis, Opt. Express 22, 30613 (2014).
- S. V. Chekalin, A. E. Dormidonov, V. P. Kandidov, and V. O. Kompanets, Opt. Lett. 45, 1511 (2020).
- С. В. Чекалин, В. О. Компанец, Е. О. Сметанина, В. П. Кандидов, Квантовая электроника 43, 326 (2013).
- I. Gražulevičiūtė, N. Garejev, D. Majus, V. Jukna, G. Tamošauskas, and A. Dubietis, J. Opt 18, 025502 (2016).
- V. Yu. Fedorov, M. Chanal, D. Grojo, and S. Tzortzakis, Phys. Rev. Lett. **117**, 043902 (2016).
- M. Kolesik and J. V. Moloney, Phys. Rev. E 70, 036604 (2004).
- 34. L.V. Keldysh, Sov. Phys. JETP 20, 1307 (1965).
- 35. А.В. Кузнецов, В.О. Компанец, А.Е. Дормидонов, С.В. Чекалин, С.А. Шленов, В.П. Кандидов, Квантовая электроника 46, 379 (2016).

Спиновая релаксация в моно-ионных магнитах, замедленная полем рассеяния ферромагнитных микрочастиц

О. В. Коплак^{+*1)}, Е. В. Дворецкая^{+*}, Е. И. Куницына⁺, Д. В. Королев[×], А. В. Палий⁺, Р. Б. Моргунов^{+*×}

+Институт проблем химической физики РАН, 142432 Черноголовка, Россия

*Первый Московский государственный медицинский университет им. И. М. Сеченова, 119991 Москва, Россия

[×] Всероссийский институт авиационных материалов, 105005 Москва, Россия

Поступила в редакцию 14 апреля 2021 г. После переработки 30 апреля 2021 г. Принята к публикации 4 мая 2021 г.

Квантовое туннелирование намагниченности (QTM) ускоряет магнитную релаксацию в комплексах переходных и редкоземельных ионов, что часто ухудшает свойства мономолекулярных или моно-ионных магнитов (SMM и SIM). Постоянное внешнее магнитное поле, напротив, затормаживает QTM в пользу других каналов спиновой релаксации. В нашей работе предложено заменить внешнее поле магнитным полем рассеяния ферромагнитных микрочастиц в композите SIM с микрочастицами PrDyFeCoB. Регулируемая остаточная намагниченность микрочастиц позволяет подобрать нужное поле рассеяния, с помощью которого можно регулировать скорость релаксации спинов в комплексах, покрывающих микрочастицы. При этом наблюдается медленная спиновая релаксация в отсутствие внешнего поля.

DOI: 10.31857/S1234567821120089

Введение. Мономолекулярные магниты 1. (Single Molecular Magnets – SMM) представляют собой координационные или металло-органические комплексы обменно-связанных парамагнитных ионов, проявляющие медленную релаксацию электронных спинов [1–3]. Отдельные комплексы удалены друг от друга на значительные расстояния в кристаллической решетке ($\sim 20-30$ Å), что гарантирует почти полное отсутствие магнитных дипольных, а тем более обменных межкомплексных взаимодействий. SMM являются перспективными объектами для разработки новых типов устройств магнитной памяти и спиновых кубитов [3]. Хотя большинство работ в этой области выполняется на макроскопических ансамблях комплексов, результаты измерений вполне можно отнести к одному спину в комплексе (отсюда и название SMM) ввиду указанной выше слабости магнитных межкомплексных взаимодействий. В SMM медленная релаксация, как правило, обусловлена наличием сильной магнитной анизотропии типа "легкая ось", которая приводит к появлению эффективного барьера, разделяющего состояния с разной ориентацией спина. Величина этого барьера зависит от значений параметров спин-гамильтониана, определяющих энергетический спектр комплекса (кристалличе-

Одним из факторов, часто ухудшающих свойства SMM, является квантовое туннелирование намагниченности (Quantum Tunneling of Magnetization – QTM), которое возникает при отклонении симметрии системы от аксиальной, приводящей к появлению низкосимметричных компонент кристаллического поля. В этом случае скорость туннелирования может значительно превысить скорости термоактивационных процессов с участием фононов, что в значительной степени уменьшает роль барьера как фактора, мешающего переориентации спинов. В некоторых случаях QTM удается полностью подавить с помощью молекулярного дизайна [4], но чаще в качестве фактора, подавляющего QTM, используется постоянное внешнее магнитное поле, направленное вдоль оси анизотропии монокристаллического образца. Поскольку в порошковом образце с различными ориентациями осей анизотропии по отношению к направлению внешнего поля QTM в каждом комплексе подавляется компонентой поля, направленной вдоль оси анизотропии, для полного подавления QTM в таком образце необходимо более сильное поле, чем

ского поля и спин-орбитального взаимодействия). Скорость спин-решеточной релаксации, в свою очередь, определяется как величиной барьера, так и силой спин-фононного взаимодействия, индуцирующего переходы между спиновыми уровнями, формирующими барьер.

 $^{^{1)}\}mathrm{e\text{-}mail:}$ o.koplak@gmail.com

в случае монокристалла. Известно большое количество систем, которые ведут себя как SMM только в присутствии постоянного внешнего магнитного поля. Их часто называют индуцируемыми полем SMM (field induced SMM). В этих соединениях в отсутствие поля релаксация посредством QTM оказывается настолько быстрой, что она полностью выводит из игры более медленную релаксацию, происходящую с участием фононов. Приложенное поле выводит спиновые уровни системы из резонанса, блокируя туннелирование, что при температурах, меньших высоты барьера (обычно 2–5 К), приводит к уменьшению релаксационных частот спинов до значений 1–1000 Гц. позволяя использовать для исследования релаксации низкочастотные измерения магнитной восприимчивости в СКВИД магнетометре [1–3]. В экспериментах это проявляется в виде пиков на частотной (или температурной) зависимости мнимой части магнитной восприимчивости χ'' , которые наблюдаются при совпадении частоты внешнего переменного магнитного поля с частотами термоактивированных попыток переориентации магнитного момента комплекса.

Наряду с SMM, в последнее время широко исследуются также комплексы, содержащие единственный парамагнитный ион, которые также демонстрируют медленную спиновую релаксацию. Их называют моно-ионные магниты (Single Ion Magnets – SIM). В отличие от SMM, в которых определяющий вклад в спин-решеточную релаксацию вносит процесс Орбаха, в SIM определяющими являются прямые однофононные и рамановские процессы. Большинство таких комплексов проявляют медленную парамагнитную релаксацию только в присутствии внешнего магнитного поля [5-6]. Отметим, что необходимость использовать внешнее поле напряженностью ~ 1–10 кЭ несовместима с их использованием в качестве элементов локальной памяти с низким энергопотреблением. Поэтому может сложиться впечатление, что такие системы имеют меньший технологический потенциал по сравнению с комплексами, проявляющими свойства SMM или SIM в нулевом поле.

Возможным способом решения этой проблемы могла бы стать замена внешнего магнитного поля внутренним полем подходящей напряженности, создаваемым ферромагнитными нано- или микрочастицами, комбинируемыми с SMM или SIM комплексами в единый композитный материал. Для подтверждения реализуемости этой идеи мы создали экспериментальные условия, при которых локальные магнитные поля рассеяния ферромагнитных частиц приводят к замедлению релаксации намагниченности в хорошо аттестованном и заранее исследованном комплексе SIM двухвалентного кобальта [7]. Целью работы является экспериментальное обнаружение медленной спиновой релаксации SIM комплексов кобальта, индуцированной локальным полем рассеяния ансамбля намагниченных ферромагнитных микрочастиц в отсутствие внешнего поля.

2. Экспериментальная методика и приготовление образцов. В наших экспериментах индуцируемые полем SIM-комплексы использовались в качестве индикаторов локального поля внутри ансамбля микрочастиц (рис. 1). В качестве комплексов SIM были выбраны комплексы высокоспиновых ионов Co(II). Поскольку ионы кобальта являются крамерсовыми, QTM в электронной подсистеме запрешено, но этот запрет частично снимается из-за сверхтонкого взаимодействия электронных спинов S = 3/2 с полуцелыми ядерными спинами I = 7/2[7]. Используемый в наших экспериментах гексакоординированный комплекс Co(II) демонстрирует медленную релаксацию намагниченности в приложенных полях $H = 1 \,\mathrm{k}\Im$ и $3.2 \,\mathrm{k}\Im$ [7]. Ближайшее лигандное окружение (первая координационная сфера) иона Co(II) включает четыре атома N и два атома Cl, как показано на рис. 1а. Аксиальная компонента кристаллического поля, создаваемого этими шестью атомами, расщепляет кубический ⁴T_{1g}(3d⁷) – терм иона Co(II) на основной орбитальный дублет ${}^{4}E_{g}$ (состояние с не полностью погашенным орбитальным угловым моментом) и возбужденный орбитальный синглет ${}^{4}A_{2g}$, причем ромбическая компонента кристаллического поля слегка расщепляет ⁴Е_g-терм на два орбитальных синглета. Спин-орбитальное взаимодействие расщепляет ⁴Е_g-терм и смешивает его с ⁴А_{2σ}, в результате чего энергетический спектр оказывается состоящим из шести крамерсовых дублетов. Комбинация указанных взаимодействий приводит к возникновению магнитной анизотропии типа легкая ось со слабым ромбическим вкладом [7].

В нашем исследовании шарики редкоземельного сплава PrDyFeCoB [8] используются в качестве источников внутреннего поля, действующего на молекулы SIM (рис. 1b). Примерно 12 мг образца порошка SIM были перемешаны с микрошариками в объемных долях 30 на 70% и плотно упакованы в диамагнитную капсулу. Образцы помещали в СКВИД-магнитометр MPMS XL (Quantum Design), работающий в высокочувствительном режиме RSO (*Reciprocating Sample Option*). Динамические магнитные свойства образцов анализировались путем измерения частотных зависимостей действительной (χ') и мнимой (χ'') компонент магнитной восприимчивости при 2 K в осциллирующем магнитном поле с ам-



Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Молекулярная структура комплекса SIM, согласно [7]. (b) – Схема распределения ферромагнитных микрочастиц (зеленые кружки) и гексакоординированных комплексов Co(II) (фиолетовые кружки) в нулевом поле (магнитные моменты показаны стрелками). (c) – Изображение микрочастиц в оптическом микроскопе

плитудой 4 Э и частотой, варьируемой в диапазоне 0.1–1400 Гц.

3. Экспериментальные результаты и обсуждение.

3.1. Магнитные свойства исходных компонент композиционного материала. Для понимания магнитных свойств композиционного материала нами сначала были исследованы частотные зависимости магнитных восприимчивостей исходных материалов, составляющих композит, а именно, ансамбля микрочастиц в отсутствие SIM (рис. 2) и порошка SIM в отсутствие микрочастиц (рис. 3). Поскольку микрочастицы в свободном состоянии способны менять направление намагниченности вследствие их механического вращения во внешнем поле, такие микрочастицы демонстрируют узкий гистерезис с коэрцитивной силой ~1кЭ (кривая 1 на рис. 2а). Закрепление частиц в эйкозане приводит к резкому уширению гистерезиса до коэрцитивной силы 20 кЭ (кривая 2 на рис. 2а), причем остаточная намагниченность ансамбля микрочастиц в нулевом поле оказывается достаточно высокой и составляет 75 % от намагниченности насыщения. Данные сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) показывают, что микрочастицы имеют форму шара с широким распределением диаметров (рис. 2b). Средний диаметр частиц ~ 10 мкм был выбран таким, чтобы он

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

превышал размер однодоменности этого материала ~ 0.3 мкм, и намагниченность микрошариков можно было задавать предварительно приложенным внешним полем. Измерения зависимостей $\chi'(f)$ и $\chi''(f)$ в ансамбле зафиксированных микрочастиц выявили отсутствие пиков и плавно изменяющийся фон во всем диапазоне частот при 2 K, как в нулевом внешнем поле (рис. 2с), так и после намагничивания частиц или в приложенном внешнем поле (не показано).

Измерения частотных зависимостей $\chi'(f)$ и $\chi''(f)$ для порошка SIM без микрочастиц не выявили пиков в нулевом магнитном поле (рис. 3а), однако в приложенном поле $H = 3.2 \,\mathrm{k}$ Э на зависимости $\chi''(f)$ появляются пики при 0.5 и 200 Гц, которым соответствуют ступеньки на зависимости $\chi'(f)$ (рис. 3b). Таким образом, в приложенном поле используемый комплекс кобальта проявляет медленную релаксацию намагниченности, как это ранее наблюдалось в [7], т.е., действительно, является индуцируемым полем SIM.

Таким образом, обе исходные компоненты композита по отдельности не дают пиков на зависимостях $\chi''(f)$, что свидетельствует об отсутствии магнитных релаксационных процессов в исследуемом диапазоне частот при 2 K в отсутствие внешнего магнитного поля.



Рис. 2. (Цветной онлайн) (а) – Магнитный гистерезис свободных (1) и зафиксированных в эйкозане (2) микрочастиц, измеренный при 2 К. (b) – Распределение микрочастиц по диаметрам (на вставке показано СЭМизображение микрочастиц). (с) – Частотные зависимости действительной χ' и мнимой χ'' частей магнитной восприимчивости ансамбля микрочастиц (без SIM), измеряемые в нулевом поле, но после предварительного намагничивания частиц во внешнем постоянном поле 50 кЭ при 2 К

3.2. Медленная релаксация комплексов кобальта в присутствие слабо закрепленных микрочастиц. Измерения зависимостей $\chi'(f)$ и $\chi''(f)$ в смеси порошкового комплекса кобальта с незакрепленными намагниченными микрочастицами выявили наличие двух пиков в нулевом внешнем поле при 2 К (рис. 4а). Использование плотно упакованных компонентов смеси, прижатых друг к другу в желатино-



Рис. 3. (Цветной онлайн) Частотные зависимости действительной χ' и мнимой χ'' частей магнитной восприимчивости комплекса SIM при T = 2 K в отсутствие микрочастиц: (a) – в нулевом внешнем поле; (b) – в постоянном внешнем поле $H = 3200 \, \Im$

вой капсуле, позволяет рассматривать микрочастицы как частично закрепленные. Оба пика на зависимостях $\chi''(f)$ хорошо воспроизводятся для многократно приготовленных независимых образцов (кривые 1 и 2 на рис. 4а). Хотя зависимости $\chi'(f)$ и $\chi''(f)$, измеренные для композита в нулевом внешнем поле, аналогичны зависимостям, зарегистрированным для чистого комплекса SIM в приложенном поле (рис. 3b), положения пиков несколько отличаются. Причиной указанного смещения пиков является локальное усреднение магнитных полей многих микрочастиц. Эффективное магнитное поле в ансамбле микрочастиц H_{eff} зависит не только от остаточной намагниченности, но и от взаимной ориентации микрочастиц, их дипольного магнитного взаимодействия, от группировки и распределения комплексов SIM. Задача о распределении полей в стохастических ансамблях магнитных частиц является актуальной, активно обсуждается в литературе и представляет самостоятельный интерес (см., например, [9, 10]). Поиск решения этой задачи был осложнен тем об-


Рис. 4. (Цветной онлайн) (а) – Частотные зависимости мнимой части магнитной восприимчивости χ'' в смеси SIM и незакрепленных микрочастиц, записанные при 2K в нулевом внешнем поле, после предварительного намагничивания смеси во внешнем постоянном поле 50 кЭ при 2K в течение 5 мин. Независимые повторения 1, 2 приведены для демонстрации воспроизводимости на разных образцах. (b) – Частотная зависимость мнимой части магнитной восприимчивости смеси SIM и закрепленных микрочастиц χ'' , записанная при 2K в нулевом внешнем поле, после предварительного намагничивания смеси во внешнем постоянном поле 50 кЭ при 2K в течение 5 мин

стоятельством, что теоретические оценки внутреннего поля ансамбля до сих пор не было возможности сравнить с экспериментальными значениями. В напих опытах, очевидно, происходит измерение этого усредненного поля, индикатором и мерой которого является частота пика на зависимости $\chi''(f)$. В [7] был получен набор частотных зависимостей $\chi''(f)$ в чистом соединении комплекса SIM без микрочастиц при разных магнитных полях в диапазоне 0–5 кЭ. Из сравнения следует, что поле микрочастиц в напих опытах близко к 3.2 кЭ, что превышает оценку остаточного поля вблизи поверхности отдельного микрошарика $2\pi M_s/3 = 1$ кЭ, указывая на то, что эффективное поле в ансамбле частиц складывалось из вкладов многих источников поля. Многократное намагничивание свободной смеси с нефиксированными микрочастицами перед записью зависимостей $\chi'(H)$ и $\chi''(H)$, вообще говоря, приводит к смещению пиков в высокочастотную область (рис. 4b). Это происходит потому, что намагниченные частицы в смеси притягиваются друг к другу и образуют кластеры, которые не удается разбить повторными перемагничиваниями. Поскольку "тренировка" образца под действием предварительных импульсов внешнего поля смещает максимумы в сторону высоких частот, нами были приготовлены образцы, свойства которых не зависят от магнитной предыстории.

3.3. Медленная релаксация комплексов кобальта в присутствие полностью закрепленных микрочастиц. Самым простым способом стабилизации среднего локального поля в смеси является фиксация комплексов SIM и микрочастиц в эйкозане. Увеличение ширины гистерезиса (рис. 2) свидетельствует об успешной фиксации и подавлении механического вращения микрочастиц. К сожалению, эта фиксация смещает пики в высокочастотную область, ограниченную частотой 1400 Гц в магнитометре (рис. 4b). Это смещение соответствует росту внутреннего эффективного поля ансамбля микрочастиц, приводящего к ускорению прямых однофононных релаксационных процессов (последние вносят основной вклад в релаксацию при низких температурах [7] при условии, что QTM уже подавлено полем).

Хотя изменение внутреннего эффективного поля приводит скорее к смещению пиков, а не к изменению их амплитуды, в условиях ограничений по частоте в качестве характеристики, чувствительной к полю микрочастиц, мы выбрали величину χ' при частоте 1400 Гц. Эта характеристика была удобна для изучения зависимости обнаруженного нами эффекта от намагниченности закрепленных микрочастиц, хотя и характеризовала скорее сдвиг пика по частоте, а не его амплитуду. Считая, что величина сдвига значительно меньше частоты максимума, можно с достаточной точностью считать, что выбранная характеристика прямо пропорциональна частотному сдвигу.

Действительная часть магнитной восприимчивости на частоте 1400 Гц росла при увеличении магнитного поля, приложенного перед сканированием частоты (рис. 5а). Во время записи самой зависимости $\chi'(f)$ магнитное поле отсутствовало – оно включалось на 5 мин и выключалось перед измерениями. Зависимость прибавки пика $\Delta \chi'(H)$ от внешнего магнитного поля представлена на рис. 5b (кривая 1). Насыщение кривой $\Delta \chi'(H)$ при ~ 10 кЭ (кривая 1



Рис. 5. (Цветной онлайн) (a) – Частотные зависимости действительной части магнитной восприимчивости χ' в смеси SIM и закрепленных эйкозаном микрочастиц, записанные в нулевом внешнем поле. Внешнее поле различной напряженности 0.5–50 кЭ прикладывалось на 5 мин и отключалось перед регистрацией этих зависимостей. (b) – Зависимость действительной восприимчивости $\Delta \chi'$ при 1400 Гц от магнитного поля, предварительно приложенного к смеси SIM с закрепленными микрочастицами и выключенного перед измерением (кривая 1) и зависимость магнитного момента смеси от приложенного поля (кривая 2). (c) – Зависимость прибавки действительной части магнитной восприимчивости $\Delta \chi'$ на частоте переменного поля 1400 Гц в нулевом поле от остаточного магнитного момента предварительно намагниченных микрочастиц

рис. 5b) совпадает с изменением наклона кривой намагничивания M(H) (кривая 2 рис. 5b).

Мы также измерили остаточную намагниченность микрочастиц $M_{\rm rem}$ после приложения магниченного поля. В комплексах SIM остаточная намагниченность отсутствовала. Это давало возможность определить $M_{\rm rem}$, не вынимая образец из прибора, в композитной смеси комплекса с частицами. На рисунке 5с показан график зависимости $\Delta \chi'$ от остаточного магнитного момента смеси. Зависимость $\Delta \chi'(M_{\rm rem})$ возрастает по мере увеличения остаточной намагниченности ферромагнитных частиц $M_{\rm rem}$. Поскольку размагничивающее поле

микрочастиц прямо пропорционально $M_{\rm rem}$, эта зависимость является свойством SIM, характеризующим сдвиг пика спиновой релаксации комплекса, как функцию внешнего поля.

В заключение заметим, что ферромагнитные композиты значительно меняют свойства материалов, инкорпорированных между ферромагнитными частицами. В частности, сообщалось о существенном увеличении аномального эффекта Холла [11–13], туннельной электрической проводимости [14], а также о получении композита, в котором инжекция электронных спинов с существенной поляризацией [15], и о многих других экспериментальных ситуациях, в которых наблюдается неаддитивное изменение свойств композита по сравнению с его исходными составляющими. В нашей работе достигнута модификация свойств одноионных магнитов, управляемых полем ферромагнитных частиц композита. Хотя в качестве отклика материала мы используем магнитную восприимчивость, описанная ситуация наиболее близка к явлениям, обнаруженным в [16] и рассмотренным в недавнем обзоре [17], посвященном особенностям электрического сопротивления, магнитосопротивления и аномального эффекта Холла в магнитных нанокомпозитах, а также мемристивных конденсаторных структурах на базе данных нанокомпозитов. Наличие диспергированных атомов в межгранульных зазорах делает композит удобной платформой для модификации свойств самых раз-

ных материалов. 4. Выводы.

1. Остаточное поле, создаваемое ансамблем закрепленных и незакрепленных микрочастиц высококоэрцитивного редкоземельного сплава ~ 1–4 кЭ достаточно для замедления спиновой релаксации в одноионных комплексах до частот ~ 0.1-1400 Гц, позволяющих обнаружить эту релаксацию в СКВИД магнетометре. В отсутствие внешнего магнитного поля в композитном материале на основе микрочастиц и порошка SIM при относительных объемных долях, обеспечивающих равномерность распределения порошка по поверхности микрочастиц, обнаруживаются характерные пики магнитной спиновой релаксации, которые в отсутствие микрочастиц обнаруживаются только во внешнем поле 3.2 кЭ.

2. Магнитная восприимчивость SIM, измеренная на фиксированной частоте и характеризующая долю комплексов с замедленной спиновой релаксацией, зависит от поля ферромагнитных микрочастиц и насыщается вместе с намагничиванием ферромагнитной среды.

3. Создан композитный материал, обеспечивающий проявление SIM свойств в отсутствии внешнего поля. Возможность регулировки остаточной намагниченности микрочастиц внешним полем универсальна и может быть использована для управления спиновой релаксацией в нанокомплексах различного происхождения. При этом комплексы SIM играют роль нанокомпаса, обнаруживающего локальные остаточные поля в стохастическом ансамбле микрочастиц.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 20-33-90256) и программы грантов Президента РФ для поддержки ведущих научных школ (грант 2644.2020.2),

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

в рамках тематической карты Института проблем химической физики АААА-А19-119092390079-8.

Авторы благодарят С. М. Алдошина, Д. В. Корчагина за плодотворные обсуждения и И. Н. Щербакова, Ю. П. Туполову за предоставленный образец комплекса Со.

- R. Mitsuhashi, K.S. Pedersen, T. Ueda, T. Suzuki, J. Bendix, and M. Mikuriya, Chem. Commun. 54, 8869 (2018); https://doi.org/10.1039/C8CC04756A.
- M. Mannini, F. Pineider, P. Sainctavit, C. Danieli, E. Otero, C. Sciancalepore, A.M. Talarico, M. Arrio, A. Cornia, D. Gatteschi, and R. Sessoli, Nat. Mater. 8, 194 (2009); https://doi.org/10.1038/nmat2374.
- M. Leuenberger and D. Loss, Nature 410, 789 (2001); https://doi.org/10.1038/35071024.
- 4. R. Sessoli, D. Gatteschi, A. Caneschi, and M. A. Novak, Nature **365**, 141 (1993); https://doi.org/10.1038/365141a0.
- Y.S. Meng, S.D. Jiang, B.W. Wang, and S. Gao, Acc. Chem. Res. 49, 2381 (2016); https://doi.org/10.1021/acs.accounts.6b00222.
- G. A. Craig and M. Murrie, Chem. Soc. Rev. 44, 2135 (2015); https://doi.org/10.1039/C4CS00439F.
- Y. P. Tupolova, I. N. Shcherbakov, L. D. Popov, V. E. Lebedev, V. V. Tkachev, K. V. Zakharov, A. N. Vasiliev, D. V. Korchagin, A. V. Palii, and S. M. Aldoshin, Dalton Trans. 48, 6960 (2019); https://doi.org/10.1039/C9DT00770A.
- E. N. Kablov, O. G. Ospennikova, V. P. Piskorskii, E. I. Kunitsyna, A. D. Talantsev, and R. B. Morgunov, IEEE Transactions on Magnetics 52, 2102012 (2016); https://doi.org/10.1134/S1063783416060184.
- 9. P. Mendoza Zélis, V. Vega, V.M. Prida, L.C. Costa-Arzuza, F. Beron, K.R. Pirota, R. López-Ruiz, and F.H. Sánchez, Phys. Rev. B 96, 174427 (2017); https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.174427
- F. H. Sánchez, P. Mendoza Zelis, M. L. Arciniegas, G. A. Pasquevich, and M. B. Fernández van Raap, Phys. Rev. B 95, 134421 (2017); https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.134421.
- Б. А. Аронзон, Д. Ю. Ковалев, А. Н. Лагарьков, Е. З. Мейлихов, В. В. Рыльков, М. В. Седова, N. Negre, M. Goiran, and J. Leotin, Письма в ЖЭТФ 70, 87 (1999).
- Ю. О. Михайловский, Д. Е. Меттус, А. П. Казаков, В. Н. Прудников, Ю. Е. Калинин, А. С. Ситников, А. Гербер, Д. Бартов, А.Б. Грановский, Письма в ЖЭТФ 97, 544 (2013).
- Б. А. Аронзон, А.Б. Грановский, Д.Ю. Ковалев,
 Е. З. Мейлихов, В. В. Рыльков, М. А. Седова, Письма в ЖЭТФ 71, 687 (2000).

- М. А. Кожушнер, Л.И. Трахтенберг, ЖЭТФ 138, 1144 (2010).
- А.С. Борухович, Н.И. Игнатьева, А.И. Галяс, С.С. Дорофейчик, К.И. Янушкевич, Письма в ЖЭТФ 84, 592 (2006).
- 16. К.Э. Никируй, А.В. Емельянов, В.В. Рыльков,

А.В. Ситников, В.А. Демин, Письма в ЖТФ **45**, 19 (2019).

 В. В. Рыльков, А.В. Емельянов, С.Н. Николаев, К.Э. Никируй, А.В. Ситников, Е.А. Фадеев, В.А. Демин, А.Б. Грановский, ЖЭТФ 158, 164 (2020).

Устойчивость и времена жизни магнитных состояний нано- и микроструктур (Миниобзор)

И. С. Лобанов^{+*}, М. Н. Поткина^{+*}, В. М. Уздин ^{+*1)}

⁺ Санкт-Петербургский государственный университет, физический факультет, 199034 С.-Петербург, Россия

*Университет ИТМО, физический факультет, 197101 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 8 мая 2021 г. После переработки 18 мая 2021 г. Принята к публикации 20 мая 2021 г.

Представлен статистический подход для оценки устойчивости магнитных состояний нано- и микроструктур относительно тепловых флуктуаций и случайных внешних воздействий. Он предполагает построение многомерной энергетической поверхности системы, поиск на ней путей с минимальным перепадом энергии между локально устойчивыми состояниями, расчет частот магнитных переходов между соответствующими магнитными конфигурациями при произвольных температурах в гармоническом приближении теории переходного состояния. Приведены результаты исследования времен жизни квазидвумерных магнитных структур с топологической защитой. Показано влияние магнитных характеристик среды, ограниченной геометрии образца, немагнитных дефектов и внешнего магнитного поля на времена жизни топологических магнитных состояний.

DOI: 10.31857/S1234567821120090

1. Введение. Внутренняя структура, динамика и устойчивость магнитных состояний являются важнейшими вопросами фундаментального наномагнетизма и новых технологий в спинтронике. Принципиальными проблемами здесь являются уменьшение характерных размеров магнитных элементов, увеличение скорости магнитной записи и передачи информации, энергоэффективность разрабатываемых систем. В любом устройстве на основе магнитных материалов во время работы происходят процессы перемагничивания и изменение магнитных состояний системы в целом или ее частей. Эти процессы зависят от пространственного размера элементов. С одной стороны, их уменьшение позволяет менять магнитное состояние, прикладывая меньшее воздействие, с другой - магнитные состояния становятся менее устойчивыми. Взаимодействие с тепловым резервуаром может привести к их самопроизвольному изменению и потере информации, содержащейся в магнитной конфигурации. Таким образом, теоретический расчет устойчивости магнитных состояний относительно тепловых флуктуаций и случайных возмущений, количественной оценкой которого могут служить времена жизни магнитных состояний, выходит на первый план. Для магнитной памяти, например, желательно, чтобы время жизни соответствующих магнитных состояний составляло десятки лет при комнатной температуре. При этом пространственный размер отдельного бита должен быть как можно меньше, составляя от одного до нескольких десятков нанометров. Создание магнитных носителей, в которых могут существовать такие локализованные структуры, – сложная задача, имеющая большой теоретический и практический интерес.

Один из подходов к решению этой задачи заключается в использовании "топологических" магнитных текстур, имеющих отличный от нуля "топологический заряд" q [1, 2]. Для квазидвумерных систем с непрерывным распределением намагниченности

$$q = \frac{1}{4\pi} \iint \mathbf{S}(\mathbf{r}) \cdot \left[\frac{\partial \mathbf{S}(\mathbf{r})}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{S}(\mathbf{r})}{\partial y} \right] dx \, dy,$$

где $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ – единичный трехмерный вектор, направленный вдоль намагниченности в точке **r**. Топологический заряд – целое число, показывающее, сколько раз вектор $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ покрывает единичную сферу. Он сохраняется при непрерывном изменении намагниченности и, таким образом, переход из состояния с $q \neq 0$ в состояние q = 0, например, ферромагнитное (Φ M), при непрерывном изменении намагниченности невозможен. Это должно обеспечить "топологическую защиту" магнитных структур относительно тепловых

¹⁾e-mail: v uzdin@mail.ru

флуктуаций [3], и делает их перспективными кандидатами для создания сверхплотной и быстрой магнитной памяти нового поколения, элементов искусственных нейронных сетей и других спинтронных устройств [4, 5].

Однако в реальных магнитных системах, где магнитные моменты локализованы на узлах дискретной кристаллической решетки, о топологической защите можно говорить лишь в рамках приближенного описания, и возникает проблема численного расчета времен жизни таких магнитных состояний.

Иерархия масштабов, характерная для магнитных систем, делает задачу оценки времен жизни чрезвычайно трудной для стохастического моделирования. Частоты осцилляций отдельных магнитных моментов, образующих магнитные состояния, даже на наномасштабе на 10-20 порядков могут превосходить частоты переходов между самими состояниями [6]. Поэтому численное решение уравнений динамики для магнитных моментов и стандартные методы Монте-Карло не позволяют адекватно рассчитывать времена жизни и частоты магнитных переходов при температурах, представляющих практический интерес. Здесь, однако, может быть использована теория переходного состояния (ТПС) для магнитных степеней свободы [7, 8]. Этот статистический подход предполагает рассмотрение многомерной энергетической поверхности системы, как функции параметров, задающих направление всех магнитных моментов, составляющих систему, поиск на ней локальных минимумов, соответствующих основному и метастабильным состояниям системы, и путей с минимальным перепадом энергии (ПМПЭ), задающих наиболее вероятные механизмы магнитных переходов. Максимум вдоль ПМПЭ соответствует седловой точке первого порядка на энергетической поверхности, которая определяет энергетический барьер между состояниями. В гармоническом приближении, когда форма энергетической поверхности аппроксимируется в минимумах и седловой точке квадратичной функцией по всем переменным, для частот магнитных переходов удается получить выражение, соответствующее закону Аррениуса. Такой подход был первоначально использован для расчета скоростей химических реакций [9], диффузии атомов на поверхности при эпитаксиальном росте [10], а сейчас является одним из наиболее признанных методов оценки частот магнитных переходов в наноструктурах [11, 12, 13, 14]. Хотя эта теория успешно используется для анализа устойчивости топологических магнитных структур, целый ряд принципиальных вопросов остается открытым, как с точки зрения разработки самого теоретического метода, так и его применения к конкретным магнитным структурам. Некоторые из этих вопросов обсуждаются в настоящей работе.

В разделе 2 рассмотрен вопрос о построении многомерной энергетической поверхности системы и поиске на ней ПМПЭ между локально устойчивыми состояниями. Наряду с "методом подталкивания упругой лентой" и методом струн, представлен метод усеченного ПМПЭ, позволяющий искать седловые точки первого порядка на поверхностях с миллионами степеней свободы и, таким образом, рассчитывать структуры микронного масштаба с атомным разрешением [15], и метод следования минимальной моде для магнитных систем [16], дающий возможность искать седловые точки первого порядка, если задано только начальное состояние, но конечное состояние неизвестно. С помощью этого метода иногда удается найти механизмы перехода в неожиданные конечные состояния, хотя он и более сложен, чем алгоритмы, используемые в случаях, где конечное состояние предопределено.

Раздел 3 посвящен методам расчета предэкспоненциального фактора в законе Аррениуса для времен жизни магнитных структур. Хотя в гармоническом приближении ТПС для предэкспоненциального фактора может быть получен аналитический ответ, он содержит детерминант матрицы Гессе в седловой точке и локальных минимумах на энергетической поверхности. Его расчет для размерности энергетической поверхности миллион и больше - сложная задача, которая, однако, может быть решена, если взаимодействия короткодействующие и матрица Гессе разреженная [17]. В разделах 4, 5 и 6 представлены результаты расчетов энергетических барьеров и времен жизни различных топологических систем: скирмионов разного размера в ферро- и антиферромагнитных средах, скирмионов на магнитных дорожках, в присутствии немагнитных примесей и внешнего магнитного поля, антискирмионов. В заключении подводятся итоги и представлены некоторые направления развития теоретического подхода для описания более широкого класса систем.

2. Энергетическая поверхность для магнитных систем. Минимумы и седловые точки. Для описания квазидвумерных топологических магнитных структур будем использовать обобщенную модель Гейзенберга, в рамках которой энергетическая поверхность задается следующим выражением:

$$E = -\sum_{\langle i,j \rangle} (J\mathbf{S}_{\mathbf{i}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{j}} + \mathbf{D}_{\mathbf{ij}} \cdot [\mathbf{S}_{\mathbf{i}} \times \mathbf{S}_{\mathbf{j}}]) - \sum_{i} (\mu \mathbf{S}_{\mathbf{i}} \cdot \mathbf{B} + KS_{i,z}^{2}).$$
(1)

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

Здесь \mathbf{S}_{i} – трехмерный вектор единичной длины, направленный вдоль магнитного момента на узле *i*. Параметры гейзенберговского обмена *J* и вектора Дзялошинского–Мория (ДМ) \mathbf{D}_{ij} будем считать отличными от нуля только для моментов на соседних узлах. Ось анизотропии $\mathbf{e}_{\mathbf{z}}$ и магнитное поле **B** перпендикулярны плоскости системы. Константы анизотропии K > 0 и величины магнитных моментов μ одинаковы на всех узлах решетки.

Магнитная конфигурация задается набором всех векторов S_i . Энергетическая поверхность представляет собой функционал энергии от всех переменных, которые задают направления S_i . Такими переменными могут служить полярные θ_i и азимутальные ϕ_i углы, задающие направление каждого вектора. Если число узлов составляет 10⁶ (что соответствует, например, системе 1000 на 1000 узлов на квадратной решетке), то размерность энергетической поверхности составит 2·10⁶. При этом вблизи полюсов $\theta_i = 0, \pi$ угол ϕ_i плохо определен, что усложняет проведение расчетов. Чтобы обойти эту трудность, можно использовать стереографическую проекцию [18] или выбрать в качестве координат ортогональные матрицы [19]. Ниже будут приведены результаты расчетов в декартовых координатах в касательном пространстве к многообразию $\|\mathbf{S}_{\mathbf{i}}\| = 1$. При этом для корректного задания матрицы Гессе необходимо ввести множители Лагранжа [17].

В выражение (1) не включена энергия магнитного диполь-дипольного взаимодействия, которое может играть существенную роль для стабилизации топологических структур микронного масштаба [20]. Для наноразмерных структур этот вклад, как показывают расчеты [21], может быть учтен перенормировкой параметра анизотропии при сохранении вида ПМПЭ. Все методы, обсуждаемые далее, применимы и для систем с явным учетом дипольного вклада, хотя численные расчеты больших систем более трудоемки изза дальнодействующего характера взаимодействия.

Поиск локальных минимумов на энергетической поверхности, соответствующих основному и метастабильным состояниям, может быть проведен стандартными методами, например, с использованием метода сопряженных градиентов [19] или метода Ньютона и его производных. Более сложна задача поиска седловых точек первого порядка, отвечающих минимуму по всем направлениям, кроме одного, и максимуму вдоль оставшегося направления, но именно эти точки определяют энергетические барьеры между локально устойчивыми состояниями. Седловые точки можно найти, как максимум вдоль ПМ-ПЭ, который соединяет локально устойчивые магнитные состояния. Если эти состояния заранее известны, можно использовать следующие вычислительные методы:

2.1. Геодезический метод подталкивания упругой лентой (ГМПУЛ) [22]. Путь аппроксимируется дискретным набором образов состояний системы, $p_0, \ldots p_N$, которым сопоставляются точки на энергетической поверхности, где p_0 и p_N соответствуют начальному и конечному локально устойчивым состояниям. Расстояние вдоль пути называют координатой реакции. За начальное приближение пути часто берется геодезическая между p_0 и p_N . В каждой точке пути p_n определяется касательный вектор τ^n с помощью следующей процедуры [23]. На участках возрастания и убывания энергии вдоль пути задается вектор $\hat{\tau}^n$:

$$\hat{\tau}^n = \begin{cases} \tau_+^n, & E(p_{n+1}) > E(p_n) > E(p_{n-1}), \\ \tau_-^n, & E(p_{n+1}) < E(p_n) < E(p_{n-1}), \end{cases}$$

где $\tau_{+}^{n} = p_{n+1} - p_{n}$ и $\tau_{-}^{n} = p_{n} - p_{n-1}$. Если $E(p_{n}) -$ локальный максимум или минимум вдоль пути, то $\hat{\tau}^{n}$ определяется взвешенной суммой τ_{+}^{n} и τ_{-}^{n} , которая непрерывно переходит к приведенным выше соотношениям, когда зависимость энергии вдоль пути становится монотонной. За касательный вектор τ^{n} выбирается единичный вектор вдоль $\hat{\tau}^{n}$.

Образы соединяются искусственными "пружинами", которые не позволяют им скатиться в минимумы по энергетической поверхности. Жесткость пружин в большинстве реализаций ГМПУЛ выбирается одинаковой для всех образов. Однако увеличение жесткости пружин для образов, находящихся вблизи максимума энергии вдоль пути, увеличивает стабильность алгоритмов, особенно квазиньютоновского типа. В этом случае образ с наибольшей энергией "подтягивает" к себе остальные образы системы, обеспечивая лучшее разрешение вблизи седловой точки, которая представляет основной интерес для оценки устойчивости относительно тепловых флуктуаций [24, 25]. Силы упругости должны быть сопоставимы по величине с градиентом энергии, чтобы обеспечить сходимость к ПМПЭ.

Далее проводится релаксация системы образов под действием проекции сил упругости f_n на направление касательной к пути и проекции антиградиента энергии на направление, ортогональное к пути:

$$F_n = -\nabla E(p_n) + (\nabla E(p_n) \cdot \tau^n)\tau^n + f_s \cdot \tau^n,$$

где $f_n = k[|p_{n+1} - p_n| - |p_n - p_{n-1}|]$ и через $|p_{n+1} - p_n|$ обозначено расстояние между n + 1 и n образами вдоль пути.

Наличие пружин обеспечивает почти равномерное распределение образов вдоль пути в равновесном состоянии. В подпространстве, ортогональном касательной к пути, образы расположены в минимуме и поэтому имеют максимальный статистический вес среди близких состояний. Введение искусственных подталкивающих пружинок дало название методу "подталкивания упругой лентой". Алгоритм ГМПУЛ также учитывает постоянство длины векторов $\mathbf{S}_{\mathbf{i}}$, так что касательные вектора к пути проецируются на касательное подпространство к магнитным моментам. Он может быть использован и в рамках моделей коллективизированного магнетизма, когда величины магнитных моментов определяются в результате самосогласованных расчетов при фиксированных направлениях на каждом узле решетки [26, 27].

Когда ПМПЭ найден, образ с максимальной энергией дает оценку для энергии седловой точки. Для более точного определения этой энергии можно использовать метод "взбирающегося образа" (climbing image) [24], позволяющий точно определить седловую точку. В этом случае выбирается образ $p_{\rm max}$ с наибольшей энергией вдоль пути, убираются силы упругости искусственных пружин, действующие на него, и включается дополнительная сила, равная градиенту энергии вдоль пути, которая заставляет образ двигаться в направлении увеличения энергии:

$$F_{\max} = -\nabla E(p_{\max}) + 2(\nabla E(p_{\max}) \cdot \tau^{\max})\tau^{\max}$$

Правило оптимизации других образов вдоль пути не изменяется, а сами образы служат для определения одной степени свободы, для которой выполняется максимизация энергии. Поскольку цепочка образов сходится к ПМПЭ, она дает хорошее приближение энергетической поверхности вдоль координаты реакции вблизи седловой точки. После того, как максимальная энергия вдоль пути найдена, плотность образов по разные стороны от седловой точки может быть различна. Можно выбрать два или более образов, которые "взбираются" к седловой точке, если требуется исследовать ее окрестность более подробно.

ГМПУЛ был впервые использован для расчета активационного барьера для коллапса скирмиона в работе [22]. С тех пор ГМПУЛ использовался для более детального анализа механизмов исчезновения [21], а также исследования взаимодействия скирмионов с магнитным полем, границами образца и дефектами [28, 29]. ГМПУЛ сейчас стал стандартным методом исследования устойчивости двумерных систем с магнитными скирмионами [30–32] и трехмерных топологических систем [18, 33] (хотя не всегда правильно реализован, см. [34]).

2.2. Метод струн [35, 36] основан на эволюции гладких кривых с внутренней параметризацией (струн), динамика которых приводит к ПМПЭ между локально устойчивыми начальным и конечным состояниями. Он аналогичен ГМПУЛ, но вместо упругих пружин, равномерно распределяющих образы вдоль пути, здесь используется другой алгоритм. Сначала образы смещаются под действием поперечной составляющей реальной силы. Затем путь аппроксимируется, например, при помощи интерполяции сплайнами, находится его длина и положение образов корректируется так, чтобы они были расположены на одинаковом расстоянии друг от друга вдоль пути. Алгоритм "взбирающегося образа" здесь также может быть реализован для точного определения положения седловой точки.

2.3. Метод следования минимальной моде [16, 37] может быть использован, когда известно только начальное состояние системы, соответствующее локальному минимуму на энергетической поверхности. Он позволяет найти ближайшие седловые точки первого порядка, определяющие сценарии перехода в различные конечные состояния, которые априори неизвестны. Начиная с точки, близкой к минимуму, на каждом шаге итерации система перемещается в направлении собственного вектора гессиана энергии, соответствующего минимальному собственному числу. При этом в подпространстве, ортогональном этому вектору, проводят релаксацию к состоянию с минимальной энергией. Поиск минимального собственного значения не требует больших вычислительных затрат и может быть проведен, например, с помощью алгоритма Ланцоша [38]. Вычисления минимальной моды можно избежать, если релаксировать одновременно два состояния, сохраняя расстояние между ними, как это делается в методе димера. Тогда эти состояния упорядочиваются вдоль соответствующего минимальной моде собственного вектора [39]. Когда минимальное собственное число становится отрицательным, метод следования минимальной моде реализует процедуру, аналогичную алгоритму "взбирающегося образа", обеспечивая сходимость к седловой точке первого порядка. Выбирая разные начальные состояния вблизи минимума, можно получить несколько седловых точек, каждая из которых соответствует определенному механизму ухода из начального состояния. Этот метод, реализованный для магнитных систем [16], позволил получить магнитный переход, соответствующий образованию двух скирмионов из одного, сопровождающийся удвоением топологического заряда системы. Энергия активации такого процесса оказалась сравнима с энергией активации для коллапса скирмиона.

2.4. Метод усеченного ПМПЭ [15] позволяет найти часть полного пути, включающую седловую точку. Именно седловая точка и ее окрестность важны для определения частот перехода между магнитными конфигурациями в рамках теории переходного состояния. Для коллапса скирмиона конфигурация состояния в седловой точке представляет собой на атомном масштабе относительно небольшую неколлинеарную структуру даже для скирмионов микронного масштаба. Это позволяет получать активационные барьеры и времена жизни таких состояний без расчета полного ПМПЭ, который оказывается трудно найти из-за того, что вдали от седловой точки размер структуры становится большим и требуется слишком большой объем компьютерной памяти.

В рамках этого метода выделяется один из образов, называемый якорем, например с максимальной энергией, и рассматривается часть пути фиксированной длины, включающая этот образ. Необходимо, чтобы часть образов выделенного участка находилась с одной стороны, а часть – с другой от гребня, разделяющего начальное и конечное состояния на энергетической поверхности. На концах рассматриваемого отрезка пути ставится условие обращения в нуль только поперечной составляющей градиента энергии. После этого проводится оптимизация пути, например, как в методе струн, и перераспределение образов на участке. В отличии от метода струн в методе усеченного ПМПЭ образы перераспределяются по части пути фиксированной длины вокруг седловой точки. Якорь не участвует в перераспределении, а на следующей итерации в качестве якоря выбирается ближайший к нему образ.

В качестве якоря может быть выбрано одно из локально устойчивых состояний, например, начальное или конечное. Тогда его положение не меняется в процессе работы алгоритма, но необходимо, чтобы второй конец участка пути находился за областью переходного состояния. Это требует качественного понимания формы энергетической поверхности и общей структуры переходного состояния.

В общем случае энергетическая поверхность, задаваемая обобщенной моделью гейзенберговского типа, представляет собой многообразие большой размерности, которая для реальных топологических систем, рассматриваемых на атомном масштабе, может составлять миллион и более. Для наглядного представления энергетической поверхности и понимания возможных сценариев магнитных переходов полез-

поверхности в предположении, что направления всех магнитных моментов можно задать, используя всего два параметра. Такой подход применялся в работе [40], где процесс перемагничивания спиновой пружины моделировался движением доменной стенки в магнитомягком магнетике, а параметрами, задающими магнитную конфигурацию, служили положение и ширина доменной стенки. Для топологических магнитных структур, таких как скирмионы, существуют аналитические выражения, приближенно описывающие профиль скирмиона и его магнитную конфигурацию, полученные на основе сравнения с данными эксперимента [41, 42, 20]. Эти соотношения, содержащие всего несколько параметров, достаточно хорошо воспроизводят локально устойчивые скирмионные состояния. Будем считать, что и в неравновесном состоянии, при магнитных трансформациях магнитная конфигурация по-прежнему задается тем же набором параметров и только их значения меняются в процессе перехода. Тогда размерность энергетической поверхности будет равна числу таких параметров. Рассмотрим магнитные конфигурации, использованные в работе [20] в рамках модели с непрерывно распределенной намагниченностью, включающей наряду с вкладами (1) магнитное диполь-дипольное взаимодействие. Расчеты структуры, состоящей из слоев магнитного материала и тяжелого металла, проводились в приближении эффективной среды с перенормированными параметрами. Локализованное топологическое состояние задавалось тремя переменными: радиусом скирмиона R, шириной его доменной стенки Δ и углом ψ , который составляют магнитные моменты на границе скирмиона с радиальным направлением. Вклады в энергию, включая дипольное взаимодействие, могут быть оценены аналитически [20]. Это позволяет построить энергетическую поверхность системы в зависимости от R и Δ ,

ным является построение двумерной энергетической

Значения параметров выбраны следующими: обменная жесткость магнитного материала $\mathcal{A} = 2.5 \,\mathrm{n} \mathrm{Д} \mathrm{ж} / \mathrm{m}$; параметр $\mathrm{Д} \mathrm{M} \mathcal{D} = 6.5 \cdot 10^{-4} \,\mathrm{J} \mathrm{ж} / \mathrm{m}^2$; константа анизотропии $\mathcal{K} = 0.2 \,\mathrm{n} \mathrm{J} \mathrm{ж} / \mathrm{m}$; магнитное поле $B = 0.27 \,\mathrm{T}$ л; намагниченность насыщения $M_s = 0.35 \,\mathrm{MA} / \mathrm{m}$; полная толщина образца $d = 126.4 \,\mathrm{m}$. Угол ψ фиксирован и равен 0.

представленную на рис. 1.

ПМПЭ между скирмионами разного размера представлен на рис. 1 белой линией с образами, показанными белыми кружками. Видно, что в процессе перехода от большого скирмиона к малому сначала уменьшается радиус скирмиона, а потом, уже после седловой точки, уменьшается и ширина



Рис. 1. (Цветной онлайн) Энергетическая поверхность для системы, определяемой радиусом скирмиона и шириной доменной стенки. Показан ПМПЭ между скирмионными состояниями, стабилизированными взаимодействием ДМ (А) и дипольным взаимодействием (В)

его доменной стенки. Отметим, что масштаб по осям на рис. 1 различен, и поэтому расстояние между образами выглядит не одинаковым.

3. Частоты магнитных переходов и времена жизни магнитных состояний. Теория переходного состояния для магнитных степеней свободы предполагает, что магнитные моменты - классические объекты с заданной энергией взаимодействия, определяемой, например, уравнением (1), и что магнитные переходы являются медленными процессами по сравнению с колебаниями отдельных моментов, так что распределение Больцмана устанавливается и поддерживается во всей доступной области на энергетической поверхности до переходного состояния включительно. Более того, траектории на энергетической поверхности предполагаются реактивными, т.е. переходят из начального в конечное состояние, пересекая разделяющую поверхность только один раз [8, 43].

В рамках ТПС для времен жизни магнитных состояний можно получить закон Аррениуса:

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{\Delta E}{k_B T}\right),\tag{2}$$

где $\Delta E = E_{sp} - E_{min}$ определяется энергией в седловой точке E_{sp} по отношению к энергии в начальном состоянии E_{min} . Если в седловой точке и минимуме, соответствующем начальному состоянию, используется гармоническое приближение для формы энергетической поверхности, то предэкспоненциальный фактор τ_0 зависит от гессианов энергии в этих точках. Матрицу Гессе $H[S^0]$ в стационарном магнитном состоянии $S^0 \equiv {\bf S}^0_{\bf i}$ можно привести к особенно

простому виду [17] в декартовых координатах в касательном пространстве к многообразию \mathcal{M} , определяемому условием $\|\mathbf{S_i}\| = 1$. Для этого выражение для энергии (1) представим в виде $E[S] = S \cdot (AS/2 - \mu \mathbf{B})$, где оператор A включает парные взаимодействия и анизотропию. Обозначим через \tilde{A} сужение оператора A на касательное пространство к \mathcal{M} в S^0 . Тогда внедиагональные элементы гессиана H совпадают с матрицей \tilde{A} . Диагональные элементы H получаются вычитанием из матрицы \tilde{A} множителей Лагранжа $\lambda_i = \mathbf{S_i^0} \cdot \nabla_i E[S^0]$, учитывающих кривизну многообразия \mathcal{M} [17]. Здесь ∇_i обозначает градиент по координатам вектора $\mathbf{S_i}$. Отметим, что матрица оператора A разреженная, и такую же структуру имеет матрица Гессе H.

Введем собственный ортонормированный базис для гессиана *H*:

$$He^n = \zeta^n e^n, \quad e^n \cdot e^m = \delta_{n,m}$$

Раскладывая малые приращения около стационарной точки S^0 в касательном пространстве \mathcal{M} по этому базису

$$\Delta = \sum_{n=1}^{2N} \Delta^n e^n, \tag{3}$$

получим энергию в окрестности этой точки в виде

$$E = E^{0} + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{2N} \zeta^{n} (\Delta^{n})^{2} + o(\Delta^{2}).$$
 (4)

Если в начальный момент система находилась в состоянии вблизи минимума S^{\min} энергии, то вероятность обнаружить ее в элементе конфигурационного пространства dS можно представить в виде

$$dP = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E^{\min}}{k_B T}} dS,$$

где нормировочная константа $Z = \int e^{-\frac{E^{\min}}{k_B T}} dS$. В приближении (4) имеем:

$$Z = e^{-\frac{E^{\min}}{k_B T}} \frac{(2\pi k_B T)^N}{\sqrt{\det H[S^{\min}]}}$$

Число переходов из начального в конечное состояние в единицу времени $k = 1/\tau$ можно оценить как произведение вероятности попасть в окрестность седловой точки (переходного состояния) на скорость ухода из нее в направлении конечного состояния.

$$k = \frac{1}{Z} \int_{v^{\perp} > 0} v^{\perp}(\Delta) e^{-\frac{E^{sp}}{k_B T}} d\Delta$$

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

где v^{\perp} – компонента скорости dS/dt, ортогональная поверхности, проходящей через седловую точку и разделяющей начальное и конечное состояние. Разделяющая поверхность строится ортогонально собственному вектору e^1 , соответствующему отрицательному собственному значению ζ^1 . Интеграл берется по части разделяющей поверхности, где скорость направлена в сторону конечного состояния.

Эта скорость может быть найдена из уравнения Ландау–Лифшица в гармоническом приближении. Вблизи седловой точки это уравнение можно записать в виде [17]

$$\frac{d\Delta_{sp}}{dt} = \frac{\gamma}{\mu} S^{sp} \times H(S^{sp}) \Delta_{sp},\tag{5}$$

где γ – гиромагнитное отношение, μ – величина магнитного момента. Компоненту скорости, ортогональную разделяющей поверхности можно найти следующим образом:

$$v^{\perp} = e_{sp}^{1} \cdot \frac{d\Delta_{sp}}{dt} = \frac{\gamma}{\mu} e_{sp}^{1} \cdot (S^{sp} \times H[S^{sp}]\Delta_{sp}).$$

Подставляя разложение (3) для Δ , получаем:

$$v^{\perp} = \sum_{i} a^{i}_{sp} \Delta^{i}_{sp}, \quad a^{i}_{sp} = \frac{\gamma}{\mu} \zeta^{i}_{sp} e^{1}_{sp} \cdot (S^{sp} \times e^{i}_{sp})$$

где a_{sp}^i представляет собой скорость роста перпендикулярной составляющей скорости v^{\perp} в направлении собственного вектора гессиана энергии e_{sp}^i . Очевидно, что $a_{sp}^1 = 0$.

Теперь для частоты переходов k имеем:

$$k = \frac{e^{-\frac{\mathcal{L}_{sp}}{k_B T}}}{Z} \int_{\mathcal{Z}} \exp\left(-\frac{\sum_j \zeta_{sp}^j (\Delta_{sp}^j)^2}{2k_B T}\right) \sum_i a_{sp}^i \Delta_{sp}^i d\Delta,$$

где суммирование идет по части \mathcal{Z} разделяющей поверхности (т.е. $a_{sp}^1 = 0$), на которой $\sum_i a_{sp}^i \Delta_{sp}^i > 0$. Если сделать замену $\Delta_{sp}^j \sqrt{\zeta_{sp}^j/k_BT} \mapsto \hat{\Delta}^j$, выражение под знаком ехр приводится к виду минус квадрат длины вектора $\hat{\Delta}$, что приводит нас к интегралу Гаусса с дополнительным линейным по $\hat{\Delta}$ множителем. Введем теперь произвольный новый ортогональный базис, так чтобы этот линейный множитель совпадал с одной из новых координат y_1 , что соответствует выбору базисного вектора вдоль v^{\perp} . Тогда условие $v^{\perp} > 0$ принимает вид $y_1 > 0$, а ответ с точностью до постоянного множителя сводится к произведению гауссовых интегралов и интеграла $\int_0^\infty y_1 e^{-y_1^2} dy_1$.

В результате получаем для частот перехода:

$$k = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\sum_{i=2}^{2N} \frac{(a_{sp}^i)^2}{\zeta_{sp}^i}} \sqrt{\frac{\det H[S^{\min}]}{\prod_{j=2}^{2N} \zeta_{sp}^j}} e^{-\frac{E^{sp} - E^{\min}}{k_B T}}.$$
 (6)

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

Это выражение, соответствующее закону (2), совпадает с полученным в работе [8], если det $H[S^{\min}]$ в минимуме записать через произведение собственных чисел $\prod_i \zeta_{\min}^j$.

Выражение для частоты магнитных переходов может быть записано в несколько другом виде, более удобном для численных расчетов, особенно в случае систем с большим числом степеней свободы. Для этого запишем уравнение движения (5) для состояния на ПМПЭ вблизи седловой точки $S = S^{sp} + \epsilon \mathbf{e}_{sp}^1$ ($\epsilon \to 0$) и рассмотрим величину

$$\frac{1}{\epsilon}\frac{dS}{dt} = \frac{\gamma\zeta_{sp}^1}{M}S^{sp} \times e_{sp}^1 \equiv \frac{de_{sp}^1}{dt}$$

которая представляет собой поперечную компоненту скорости состояний на ПМПЭ вблизи седловой точки. Определим

$$b^i = e^i_{sp} \cdot \frac{de^1_{sp}}{dt}.$$

Величины b^i и a^i_{sp} связаны соотношением:

$$a_{sp}^i = -\frac{\zeta_{sp}^i}{\zeta_{sp}^1} b^i = \frac{\zeta_{sp}^i}{|\zeta_{sp}^1|} b^i.$$

Теперь (6) можно записать в виде:

$$k = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\sum_{i=2}^{2N} \frac{\zeta_{sp}^{i}}{|\zeta_{sp}^{1}|} (b_{i})^{2}} \sqrt{\frac{\det H[S^{\min}]}{|\det H[S^{sp}]|}} e^{-\frac{E^{sp} - E^{\min}}{k_{B}T}}.$$
 (7)

Сумма по собственным значениям в (7) представляет собой значение квадратичной формы матрицы $H[S^{sp}]$ на векторе b:

$$\sum_{i} \zeta_{sp}^{i}(b^{i})^{2} = b \cdot H[S^{sp}]b.$$

Оно может быть вычислено в произвольном базисе, включая исходный базис, в котором задавалась магнитная конфигурация и, таким образом, не требуется поиск всех собственных значений гессиана.

Уравнение для частот перехода (7) содержит отношение детерминантов гессианов энергии в соответствующих точках энергетической поверхности. Обычно оно рассчитывается как отношение произведения собственных значений гессиана [11–14]. Однако для систем, содержащих миллионы степеней свободы, найти все собственные числа гессиана не представляется возможным стандартными методами. Поэтому расчеты микронных систем с атомным разрешением вплоть до последнего времени не проводились. Прогресс в этом направлении был достигнут недавно, пользуясь разреженностью матриц Гессе [17]. Взаимодействие между магнитными моментами носит короткодействующий характер, следовательно матрица Гессе может быть представлена в блочно-трехдиагональном виде. Блочное разложение Холецкого [38] позволяет записать рекуррентное соотношение на элементы блочной диагонали, соответствующие подсистемам первоначальной системы с фиксированной одной из пространственных координат, значительно понижая размерность задачи. Предложенный метод позволяет вычислять определители гессианов для систем микронного масштаба с атомным разрешением.

4. Скирмион на треке. Одно из наиболее активно развивающихся направлений разработки устройств на основе топологических систем связано с возможностью их движения под действием спинполяризованного тока по магнитным дорожкам заданной архитектуры [44–47]. Когда скирмион или другой локализованный объект находится на магнитной дорожке, близость границы дорожки, ее кривизна и структурные дефекты могут существенно влиять на устойчивость системы относительно тепловых флуктуаций [48, 49]. Для очень узких дорожек, когда их ширина становится существенно меньше равновесного размера уединенного скирмиона, возможна его трансформация в пару доменных стенок [50]. Скирмион может разрушиться при проходе сужения на треке, двигаясь под действием спинполяризованного тока [51]. Поэтому проблема оценки времен жизни топологических структур в условиях ограниченной геометрии здесь особенно важна.

Расчеты равновесных состояний скирмионов на магнитной дорожке показывают, что их размер начинает уменьшаться, когда ширина дорожки становится порядка удвоенного диаметра скирмиона [29, 52]. Аналогичный эффект отмечался по результатам расчета скирмионов в нанодиске в рамках микромагнитной модели [53]. При этом меняется и активационный барьер для коллапса скирмиона, прежде всего, за счет увеличения его энергии в метастабильном равновесном состоянии. Было найдено два сценария исчезновения скирмиона: один соответствует уменьшению размера неколлинеарной структуры и ее исчезновению внутри образца, другой – уходу за границу дорожки. ПМПЭ для каждого сценария вместе с магнитными конфигурациями в седловой точке представлены на рис. 2 для разных ширин дорожки. Параметры соответствуют скирмионам, наблюдаемым экспериментально в системе PdFe/Ir(111) методами туннельной микроскопии ($\mu B = 0.093 J, K =$ $= 0.07J, D_{ij} = 0.32J, J = 7$ мэВ) [54, 29].

Возможность исчезновения скирмиона за счет ухода за границу трека исследовалась для широкой по сравнению с размером скирмиона дорожки в работах [32, 30]. Как видно из рис. 2, ПМПЭ содержит в этом случае горизонтальный участок, соответствующий свободному перемещению скирмиона вдали от границы. При приближении скирмиона к границе, его энергия начинает расти, но седловая точка при переходе соответствует состоянию, когда почти весь он все еще находится на треке. При этом магнитная конфигурация в седловой точке не сильно отличается по размеру и внешнему виду от скирмиона в равновесном состоянии.

Для коллапса внутри трека размер структуры в окрестности седловой точки значительно меньше, чем в начальном равновесном состоянии, и он не так сильно взаимодействует с границами. Поэтому энергия системы в переходном состоянии слабее зависит от ширины дорожки, чем в начальном, равновесном. При уходе скирмиона через границу его энергия практически не меняется, пока он не подойдет к границе достаточно близко. И здесь зависимость энергии в переходном состоянии от ширины трека меньше, чем в начальном равновесном состоянии, где на узких треках обе границы действуют на скирмион одновременно. Поэтому барьер, который нужно преодолеть для уничтожения скирмиона уменьшается, а для его зарождения из ФМ состояния – увеличивается, с уменьшением ширины дорожки. Исчезновение скирмиона на границе требует более низкой энергии активации, чем внутри образца. Барьер для зарождения скирмиона увеличивается, когда ширина трека уменьшается, но он всегда ниже вблизи границы, чем внутри трека.

Оценка предэкспоненциального множителя в законе скорости Аррениуса в рамках гармонического приближения теории переходного состояния дает значение порядка $10^{12} c^{-1}$ для коллапса и $10^9 c^{-1}$ для выхода через границу на самом широком треке шириной 70 атомов. Это вместе с оценкой энергии активации позволяет оценить время жизни скирмиона. Оказалось, что для первого случая оно составляет более 3 лет, а для второго – около полумесяца при температуре 10 К. При комнатной температуре такие скирмионы нестабильны.

Поведение барьеров меняется при увеличении магнитного поля, направленного противоположно намагниченности в центре скирмиона. Такое поле, как и границы трека, приводит к уменьшению размера скирмиона. Энергия метастабильных скирмионов в сильных полях увеличивается, а их равновесное число и устойчивость относительно тепловых



Рис. 2. (Цветной онлайн) ПМПЭ для переходов из состояния уединенного скирмиона на треке в ферромагнитное состояние при разной ширине трека W. (a) – Коллапс внутри трека. (b) – Уход за границу трека. На вставках показана магнитная конфигурация в седловых точках для W = 25 атомных слоев

флуктуаций уменьшается. Это должно проявляться в особенностях топологического эффекта Холла, связанного с рассеянием электронов проводимости на скирмионах [55], а также в предсказанной теоретически возможности наблюдения квантового туннелирования скирмионного состояния в ФМ при сверхнизких температурах [56]. На рисунке 3 приведена зависимость энергии активации уничтожения скирмионов в зависимости от ширины трека при трех разных значениях внешнего поля. Видно, что при поле B = 3.75 Тл барьер для радиального коллапса скирмиона выше барьера для его ухода через границу для всех значений W, что согласуется с результатами расчетов [32] для широкой дорожки. При B = 4.6Тл барьеры близки, но для узкого трека (W < 27) энергия активации ниже для ухода через границу, а для широкого – для исчезновения внутри трека. При $B\,=\,6.3\,{\rm Tr}$ барьер для коллапса более чем в 2 раза ниже, чем для ухода. При этом величина барьеров уменьшается с увеличением поля.

ПМПЭ для скирмиона на дорожке шириной W = 30 слоев в различных магнитных полях показаны на рис. 4. Рисунок 4а соответствует коллапсу внутри трека, 4b – уходу скирмиона через границу. Видно, что энергия в седловой точке при уходе через границу сильно увеличивается с ростом магнитного поля, в то время, как для коллапса внутри образца это увеличение гораздо меньше. Из-за этого с увеличением поля барьер для ухода через границу трека становится больше, чем для коллапса. Барьер для зарождения скирмиона из ФМ состояния в больших полях становится меньше внутри трека, чем на его границе.

5. Скирмионы в антиферромагнетике, антискирмионы. Наряду с квазидвумерными скирмионами в тонких ферромагнитных слоях и многослойных системах существует множество других топологических структур, представляющих интерес для фундаментального магнетизма и приложений [57]. Одним из перспективных направлений является использование ферримагнитных и антиферромагнитных (АФ) хиральных материалов в качестве носителей локализованных топологических состояний. В этих системах удалось получить устойчивые при комнатных температурах скирмионы размером от десяти нм, перемещающиеся под действием тока со скоростями выше 1 км/с [58, 59]. Если скирмионы в ФМ материалах движутся по отношению к току под некоторым углом, называемым углом Холла [60], то в ферримагнетиках этот угол существенно уменьшается, а в АФ материалах – обращается в нуль [61, 62]. В синтетических антиферромагнетиках, состоящих из ФМ слоев с антиферромагнитным межслойным взаимодействием [63], при комнатной температуре были экспериментально получены скирмионы размером 10 нм, антиферромагнитно связанные в соседних слоях [64]. Анализ устойчивости и оценка времен жизни топологических состояний, в частности, скирмионов, в антиферромагнетиках могут быть выполнены в рамках ТПС, как и для ФМ материалов [65].



Рис. 3. (Цветной онлайн) Зависимость барьера для коллапса скирмиона от ширины трека W при различных значениях внешнего поля B. (a) – B = 3.75 Тл, (b) – B = 4.6 Тл, (c) – B = 6.3 Тл. Красные кружки соответствуют радиальному коллапсу скирмиона, синие ромбы – уходу через границу трека

Особый интерес представляет сравнение свойств таких структур в ФМ и АФ материалах [66]. В результате аналитических и численных расчетов было показано, что магнитное поле оказывает противоположное влияние на скирмионы в двух типах материалов: увеличивает радиус скирмиона в антиферромагнетиках, в то время как в ферромагнетиках радиус уменьшается, когда поле направлено против намагниченности в центре скирмиона. Частоты процессов коллапса скирмионов и самопроизвольного ухода через границу магнитной дорожки уменьшаются при увеличении магнитного поля в случае АФ материала. Напротив, эти процессы значительно усиливаются с увеличением поля в ФМ. Расчеты на основе обобщенной модели Гейзенберга (1) показали, что в отсутствие магнитного поля энергетические поверхности ФМ и АФ систем полностью эквивалентны. В присутствии магнитного поля энергетические поверхности оказываются близкими, если определенным образом (квадратично по полю) изменить параметр анизотропии. В этом случае активационные барьеры должны совпадать. Однако, как показывают расчеты, времена жизни скирмионов в ФМ и АФ материалах различны [66]. Причина заключается в разной динамике скирмионов в этих системах, приводящей к разным вкладам в предэкспоненциальный фактор при расчете частот магнитных переходов. То, что включение магнитного поля для АФ сред соответствует перенормировке константы анизотропии в ФМ материале, означает, что энергию активации для коллапса скирмиона в АФ материале можно получить без дополнительных расчетов из имеющихся данных для ФМ скирмионов.

Другой топологической магнитной структурой, активно изучаемой в последнее время, является антискирмион, несущий противоположный скирмиону топологический заряд [3]. Один из сценариев формирования скирмионов заключается в рождении пары скирмион-антискирмион с последующим коллапсом нестабильного антискирмиона [67]. Устойчивая при комнатной температуре антискирмионная решетка была получена в тетрагональных сплавах Гейслера Mn–Pt–Sn с анизотропным взаимодействием ДМ [68]. В отличие от скирмиона, антискирмион не является радиально симметричным и движется в определенных направлениях вдоль электрического тока, т.е. с углом Холла, равным нулю [69]. Несмотря на то, что скирмион и антискирмион выглядят по-разному, существует преобразование R, переводящее одно состояние в другое, обеспечивающее анизотропный обмен ДМ, но сохраняющее неизменной энергетическую поверхность системы. Для векторов $\mathbf{S}_{\mathbf{i}}$ оно имеет вид:

$$R(S_x, S_y, S_z) = (S_x, -S_y, -S_z).$$

R должно быть применено не только к $\mathbf{S}_{\mathbf{i}}$, но и ко всем другим векторам, входящим в формулу для



Рис. 4. (Цветной онлайн) ПМПЭ для переходов из состояния уединенного скирмиона в ФМ состояние в разных внешних полях на треке шириной W = 30 слоев. (a) – Коллапс внутри трека. (b) – Уход за границу трека. На вставках показана магнитная конфигурация в седловых точках для поля B = 4.6 Тл

энергии (1). Инвариантность энергетической поверхности и уравнений Ландау–Лифшица в отсутствие токов относительно преобразования R означает, что времена жизни скирмионов и антискирмионов в системах, связанных с этим преобразованием, совпадают. Анализ уравнений движения в присутствии токов позволяет без проведения вычислений определить направление вектора плотности тока, вдоль которого антискирмион будет двигаться с нулевым углом Холла. Преобразование R не сохраняет энергию дипольного магнитного взаимодействия, так что для систем, где это взаимодействие играет существенную роль, необходим дополнительный анализ [70].

Времена жизни антискирмиона в сплаве Гейслера Mn-Pt-Sn исследовались на основе гармонического приближения ТПС в работе [71]. Расчеты были выполнены для серии состояний, описываемых дискретной моделью с разной постоянной решетки и числом магнитных моментов. Параметры модели выбирались таким образом, чтобы все системы соответствовали одной и той же непрерывной модели. Если постоянная решетки уменьшается в N раз, то для двумерной системы обменная константа J не меняется, параметр ДМ уменьшается в N раз, а магнитный момент и параметр анизотропии – в N^2 раз. Экспериментальному значению постоянной решетки и магнитных параметров соответствовало значение N = 20. Система содержала $45N \times 45N$ магнитных моментов с периодическими граничными условиями. На рисунке 5 представлены зависимости энергии антискирмиона в равновесном состоянии E_m и в седловой точке при его коллапсе E_{sp} от параметра N. На вставке приведена зависимость от N предэкспоненциального фактора в законе Аррениуса. Расчеты показали, что за устойчивость антискирмиона при комнатной температуре отвечает большая энергия активации для коллапса, в то время как предэкспоненциальный множитель имеет характерную величину $10^{12} c^{-1}$, несмотря на большое количество спинов. Таким образом, энергетические, а не энтропийные эффекты определяют большое время жизни антискирмиона, наблюдаемое в эксперименте. Расчеты системы микромагнитного масштаба с атомным разрешением с более чем миллионом степеней свободы удалось провести благодаря использованию метода усеченного ПМПЭ и рекуррентного расчета детерминантов гессиана энергии вместо его диагонализации.

6. Дефекты и немагнитные примеси. Для практического использования магнитных скирмионов важным вопросом является влияние структурных дефектов атомного масштаба на устойчивость и динамику топологических магнитных состояний. Локальные дефекты могут выступать притягивающими или отталкивающими центрами, приводя к формированию связанных состояний и деформации магнитного профиля скирмиона [72, 73], изменению траектории движения под действием тока [74]. Протяженные дефекты могут образовывать "рельсы", позволяющие перемещать скирмионы вдоль заданных траекторий [75, 76]. При этом проблему устойчивости маг-



Рис. 5. (Цветной онлайн) Энергия равновесного антискирмиона в локальном минимуме E_m (синяя линия с ромбами) и в седловой точке E_{sp} при коллапсе (красная линия с кружками) как функция масштабного параметра N. На вставке – предэкспоненциальный множитель в законе Аррениуса в зависимости от N. Параметр J = 110 мэВ

нитных состояний при совместном воздействии ограниченной геометрии образца и точечных или протяженных дефектов необходимо решать при проектировании любых устройств, использующих скирмионы или другие топологические структуры.

Эффекты влияния немагнитных примесей на устойчивость и локализацию скирмионов в ФМ и АФ материалах исследовались в работах [29, 66]. Одновременное влияние границ трека и кластеров разного размера из немагнитных атомов на стабильность скирмионных состояний анализировалось в работе [52].

На рисунке 6 показан ПМПЭ для присоединения скирмиона к немагнитному кластеру, и для его последующего коллапса. Кластер состоит из 7 немагнитных атомов, компактно расположенных в узлах треугольной двумерной решетки. На вставках представлены магнитные конфигурации в равновесных локально устойчивых состояниях и в седловых точках. Немагнитный дефект повышает вероятность исчезновения скирмиона, поскольку барьер для коллапса в этом случае оказался существенно меньше, чем в отсутствие дефекта. Энергия активации для зарождения скирмиона также существенно понижается. Это объясняет тот факт, что под действием тока с иглы туннельного микроскопа скирмионы обычно появляются вблизи структурных дефектов [77]. Исследовалось влияние внешнего магнитного поля на связанное состояние скирмиона на немагнитном дефекте в ФМ и АФ материалах. Расчеты позволяют утверждать, что АФ скирмион отрывается от приме-



Рис. 6. (Цветной онлайн) ПМПЭ для скирмиона в присутствии немагнитного дефекта. Участок 1-2-3 соответствует пути от состояния скирмиона вдали от немагнитного кластера из 7 атомов до скирмиона, локализованного на кластере. Участок 3-4-5 представляет собой ПМПЭ от скирмиона, локализованного на кластере до немагнитного кластера в ФМ образце. На вставках показаны магнитные конфигурации вдоль ПМПЭ. Состояния 2 и 4 соответствуют седловым точкам. Скирмион локализован внутри трека шириной W = 61 атом

си легче, чем ФМ, и этот эффект тем больше, чем больше напряженность поля [66]. Анализ одновременного влияния границ образца и дефектов различного размера показал, что для достаточно узких треков и больших дефектов скирмион, образующий связанное состояние, скорее разрушится под действием тока, чем диссоциирует, и будет двигаться как свободная частица. Это важно учитывать при разработке устройств, в которых скирмионные состояния перемещаются по магнитным дорожкам.

7. Заключение. ТПС для магнитных степеней свободы позволяет получить количественные оценки устойчивости магнитных состояний относительно тепловых флуктуаций при произвольных температурах. Анализ ПМПЭ и энергетических поверхностей систем дает возможность найти наиболее вероятные сценарии магнитных переходов, в том числе переходов с изменением топологического заряда уединенных скирмионов и упорядоченных систем взаимодействующих скирмионов, интенсивно изучаемых в последнее время теоретически [78] и экспериментально [79]. Исследование многомерных энергетических поверхностей открывает новые возможности для предсказания механизмов возможных трансформаций состояний не только для квазидвумерных магнитных структур, но и трехмерных магнитных [18, 80-82] и жидкокристаллических конфигураций [83–85]. Однако исследование трехмерных систем требует увеличения размерности энергетической поверхности, особенно если необходимо атомное разрешение. Теория может быть использована и для структур, которые описываются моделями коллективизированного магнетизма, например, моделью Александера–Андерсона [26, 27] или в методе функционала плотности, но в этих случаях объем расчетов существенно увеличивается и приходится ограничиться относительно небольшим числом атомов. Для системы, описываемой обобщенной моделью Гейзенберга со взаимодействиями конечного радиуса (1), удается провести количественные оценки времен жизни магнитных состояний для систем, включающих миллионы степеней свободы, используя разреженность гессиана энергии. При наличии дальнодействующего магнитного диполь-дипольного взаимодействия гессиан не является разреженной матрицей. Однако, если записать вклад дипольного взаимодействия в энергию в терминах полей размагничивания, формально можно сделать это взаимодействие локальным, увеличив число степеней свободы и размерность энергетической поверхности. Это позволяет обобщить описанные выше методы [17] на системы микронного масштаба с дипольным взаимодействием.

Часть описанных выше результатов была получена при поддержке грантов Российского фонда фундаментальных исследований 18-02-00267-А, 19-32-90048-Аспиранты и Фонда развития теоретической физики и математики БАЗИС (проект 19-1-1-12-1,2). Методы расчета времен жизни магнитных состояний для систем с миллионами степеней свободы были развиты при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках совместного проекта РНФ-Гельмгольц 19-42-06302.

- А. А. Белавин, А. М. Поляков, Письма в ЖЭТФ 22, 503 (1975).
- А.Н. Богданов, Д.А. Яблонский, ЖЭТФ 95, 178 (1989).
- N. Nagaosa and Y. Tokura, Nat. Nanotechnol. 8, 899 (2013).
- G. Finocchio, F. Büttner, R. Tomasello, M. Carpentieri, and M. Kläui, J. Phys. D: Appl. Phys. 49, 423001 (2016).
- A. Fert, N. Reyren, and V. Cros, Nat. Rev. Mater. 2, 1 (2017).

- S. Krause, G. Herzog, T. Stapelfeldt, L. Berbil-Bautista, M. Bode, E. Y. Vedmedenko, and R. Wiesendanger, Phys. Rev. Lett. **103**, 127202 (2009).
- W. T. Coffey, D. A. Garanin, and D. J. McCarthy, Adv. Chem. Phys. **117**, 483 (2001).
- P. F. Bessarab, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, Phys. Rev. B 85, 184409 (2012).
- P. Hänggi, P. Talkner, and M. Borkovec, Rev. Mod. Phys. 62, 251 (1990).
- 10. A. F. Voter and J. D. Doll, J. Chem. Phys. 82, 80 (1985).
- G. Fiedler, J. Fidler, J. Lee, T. Schrefl, R. L. Stamps, H. B. Braun, and D. Suess, J. Appl. Phys. **111**, 093917 (2012).
- P. F. Bessarab, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, Phys. Rev. Lett. **110**, 020604 (2013).
- L. Desplat, D. Suess, J. V. Kim, and R. L. Stamps, Phys. Rev. B 98, 134407 (2018).
- A.S. Varentcova, S. von Malottki, M.N. Potkina, G. Kwiatkowski, S. Heinze, and P.F. Bessarab, npj Comp. Mater. 6, 193 (2020).
- I.S. Lobanov, M.N. Potkina, V.M. Uzdin, and H. Jónsson, Nanosystems: Phys., Chem., Math. 8, 586 (2017).
- G.P. Müller, P.F. Bessarab, S.M. Vlasov, F. Lux, N.S. Kiselev, S. Blügel, V.M. Uzdin, and H. Jónsson, Phys. Rev. Lett. **121**, 197202 (2018).
- I.S. Lobanov and V.M. Uzdin, arXiv:2008.06754v1 [cond-mat.mtrl-sci].
- F. N. Rybakov, A. B. Borisov, S. Blügel, and N. S. Kiselev, Phys. Rev. Lett. **115**, 117201 (2015).
- A. V. Ivanov, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, Comput. Phys. Commun. 260, 107749 (2020).
- F. Büttner, I. Lemesh, and G.S. Beach, Sci. Rep. 8, 4464 (2018).
- I. S. Lobanov, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, Phys. Rev. B 94, 174418 (2016).
- P.F. Bessarab, V.M. Uzdin, and H. Jónsson, Comput. Phys. Commun. 196, 335 (2015).
- G. Henkelman and H. Jónsson, J. Chem. Phys. 113, 9978 (2000).
- 24. G. Henkelman, B. P. Uberuaga, and H. Jónsson, J. Chem. Phys. **113**, 9901 (2000).
- A. V. Ivanov, D. Dagbartsson, J. Tranchida, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, J. Phys. Condens. Matter **32**, 345901 (2020).
- 26. P. F. Bessarab, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, Phys. Rev. B 89, 214424 (2014).
- A. Ivanov, P. F. Bessarab, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, Nanoscale 9, 13320 (2017).
- V. M. Uzdin, M. N. Potkina, I. S. Lobanov, P. F. Bessarab, and H. Jónsson, J. Magn. Magn. Mat. 459, 236 (2018).
- V. M. Uzdin, M. N. Potkina, I. S. Lobanov, P. F. Bessarab, and H. Jónsson, Physica B 549, 6 (2018).

- D. Cortés-Ortuno, W. Wang, M. Beg, R.A. Pepper, M.A. Bisotti, R. Carey, M. Vousden, T. Kluyver, O. Hovorka, and H. Fangohr, Sci. Rep. 7, 4060 (2017).
- S. von Malottki, B. Dupé, P. F. Bessarab, A. Delin, and S. Heinze, Sci. Rep. 7, 12299 (2017).
- P.F. Bessarab, G.P. Müller, I.S. Lobanov, F.N. Rybakov, N.S. Kiselev, H. Jónsson, V.M. Uzdin, S. Blügel, L. Bergqvist, and A. Delin, Sci. Rep. 8, 3433 (2018).
- M. Hoffmann, G. P. Müller, and S. Blügel, Phys. Rev. Lett. **124**, 247201 (2020).
- S. Rohart, J. Miltat, and A. Thiaville, Phys. Rev. B 93, 214412 (2016).
- E. Weinan, W. Ren, and E. Vanden-Eijnden, Phys. Rev. B 66, 052301 (2002).
- P. Heistracher, C. Abert, F. Bruckner, C. Vogler, and D. Suess, IEEE Trans. Magn. 54, 7206105 (2018).
- R. A. Olsen, G. J. Kroes, G. Henkelman, A. Arnaldsson, and H. Jónsson, J. Chem. Phys. **121**, 9776 (2004).
- G. H. Golub and C. F. van Loan, *Matrix computations*, JHU press, Baltimore (2013), v. 3.
- G. Henkelman and H. Jónsson, J. Chem. Phys. 111, 7010 (1999).
- M. Moskalenko, P.F. Bessarab, V.M. Uzdin, and H. Jónsson, AIP Advan. 6, 025213 (2016).
- N. Romming, A. Kubetzka, C. Hanneken, K. von Bergmann, and R. Wiesendanger, Phys. Rev. Lett. 114, 177203 (2015)
- O. Boulle, J. Vogel, H. Yang et al. (Collaboration), Nat. Nanotech. 11, 449 (2016).
- P.F. Bessarab, V.M. Uzdin, and H. Jónsson, Z. Phys. Chem. 227, 1543 (2013).
- S.S.P. Parkin, M. Hayashi, and L. Thomas, Science 320, 190 (2008).
- A. Fert, V. Cros, and J. Sampaio, Nat. Nanotechnol. 8, 152 (2013).
- 46. Z. R. Yan, Y. Z Liu, Y. Guang, J. F. Feng, R. K. Lake, G. O. Yu, and X. F. Han, Phys. Rev. Appl. 14, 044008 (2020).
- H. Zhang, D. Zhu, W. Kang, Y. Zhang, and W. Zhao, Phys. Rev. Appl. 13, 054049 (2020).
- J. Iwasaki, M. Mochizuki, and N. Nagaosa, Nat. Nanotechnol. 8, 742 (2013).
- V.L. Carvalho-Santos, M.A. Castro, D. Salazar-Aravena, D. Laroze, R.M. Corona, S. Allende, and D. Altbir, Appl. Phys. Lett. **118**, 172407 (2021).
- 50. Y. Zhou and M. Ezawa, Nat. Commun. 5, 4652 (2014).
- D. Suess, C. Vogler, F. Bruckner, P. Heistracher, and F. Slanovc, Sci. Rep. 9, 4827 (2019).
- M. N. Potkina, I. S. Lobanov, and V. M. Uzdin, Nanosystems: Phys., Chem., Math. 11, 628 (2020).
- J. Sampaio, V. Cros, S. Rohart, A. Thiaville, and F. Fert, Nat. Nanotechnol. 8, 839 (2013).

- 54. J. Hagemeister, N. Romming, K. von Bergmann, E. V. Vedmedenko, and R. Wiesendanger, Nat. Commun. 6, 8455 (2015).
- K. S. Denisov, I. V. Rozhansky, M. N. Potkina, I. S. Lobanov, E. Lähderanta, and V. M. Uzdin, Phys. Rev. B 98, 214407 (2018).
- S. M. Vlasov, P. F. Bessarab, I. S. Lobanov, M. N. Potkina, V. M. Uzdin, and H. Jónsson, New J. Phys. 22, 083013 (2020).
- V. M. Kuchkin, B. Barton-Singer, F. N. Rybakov, S. Blügel, B. J. Schroers, and N. S. Kiselev, Phys. Rev. B 102, 144422 (2020).
- L. Caretta, M. Mann, F. Büttner, K. Ueda, B. Pfau, C. M. Günther, P. Hessing, A. Churikova, C. Klose, M. Schneider, and D. Engel, Nat. Nanotechnol. 13, 1154 (2018).
- S. Woo, K. M. Song, X. Zhang et al. (Collaboration), Nat. Commun. 9, 959 (2018).
- K. Litzius, I. Lemesh, B. Krüger et al. (Collaboration), Nature Phys. 13, 170 (2017).
- J. Barker and O.A. Tretiakov, Phys. Rev. Lett. 116, 147203 (2016).
- X. Zhang, Y. Zhou, and M. Ezawa, Sci. Rep. 6, 24795 (2016).
- R. A. Duine, K. J. Lee, S. S. P. Parkin, and V. D. Stiles, Nature Phys. 14, 217 (2018).
- W. Legrand, D. Maccariello, F. Ajejas, S. Collin, A. Vecchiola, K. Bouzehouane, N. Reyren, V. Cros, and A. Fert, Nat. Mater. 19, 34 (2020).
- P.F. Bessarab, D. Yudin, D.R. Gulevich, P. Wadley, M. Titov, and O.A. Tretiakov, Phys. Rev. B 99, 140411 (2019).
- M. N. Potkina, I. S. Lobanov, H. Jónsson, and V. M. Uzdin, J. Appl. Phys. **127**, 213906 (2020).
- W. Koshibae and N. Nagaosa, Nat. Commun. 7, 10542 (2016)
- A. K. Nayak, V. Kumar, T. Ma, P. Werner, E. Pippel,
 R. Sahoo, F. Damay, U.K. Röβler, C. Felser, and
 S. P. Parkin, Nature 548, 561 (2017).
- S. Huang, C. Zhou, G. Chen, H. Shen, A.K. Schmid, K. Liu, and Y. Wu, Phys. Rev. B 96, 144412 (2017).
- L. Camosi, N. Rougemaille, O. Fruchart, J. Vogel, and S. Rohart, Phys. Rev. B 97, 134404 (2018).
- M. N. Potkina, I. S. Lobanov, O. A. Tretiakov, H. Jónsson, and V. M. Uzdin, Phys. Rev. B 102, 134430 (2020).
- C. Hanneken, A. Kubetzka, K. von Bergmann, and R. Wiesendanger, New J. Phys. 18, 055009 (2016).
- I. L. Fernandes, J. Bouaziz, S. Blügel, and S. Lounis, Nat. Commun. 9, 4395 (2018).
- 74. J. Müller and A. Rosch, Phys. Rev. B **91**, 054410 (2015).
- J. Castell-Queralt, L. González-Gómez, N. Del-Valle, A. Sanchez, and C. Navau, Nanoscale 11, 12589 (2019).
- D. Stosic, T.B. Ludermir, and M.V. Milošević, Phys. Rev. B 96, 214403 (2017).

- N. Romming, C. Hanneken, M. Menzel, J.E. Bickel,
 B. Wolter, K. von Bergmann, A. Kubetzka, and
 R. Wiesendanger, Science **341**, 636 (2013).
- В.Е. Тимофеев, А.О. Сорокин, Д.Н. Аристов, Письма в ЖЭТФ 109, 200 (2019).
- М. В. Сапожников, О. В. Ермолаева, Е. В. Скороходов, Н. С. Гусев, М. Н. Дроздов, Письма в ЖЭТФ 107, 378 (2018).
- H. R. O. Sohn, S. M. Vlasov, V. M. Uzdin, A. O. Leonov, and I. I. Smalyukh, Phys. Rev. B 100, 104401 (2019).
- S. M. Vlasov, V. M. Uzdin, and A. O. Leonov, J. Phys. Condens. Matter **32**, 185801 (2020).
- A. O. Leonov, I. M. Tambovtcev, I. S. Lobanov, and V. M. Uzdin, Phys. Rev. B 102, 174415 (2020).
- A. V. Ivanov, P. F. Bessarab, E. V. Aksenova, V. P. Romanov, and V. M. Uzdin, Phys. Rev. E 93, 042708 (2016).
- 84. S.S. Tenishchev, A.D. Kiselev, A.V. Ivanov, and V.M. Uzdin, Phys. Rev. E 100, 062704 (2019).
- S. S. Tenishchev, I. M. Tambovtcev, A. D. Kiselev, and V. M. Uzdin, J. Mol. Liq. **325**, 115242 (2021).

Капиллярная плавучесть в системе двух несмешивающихся Бозе-конденсатов

В. П. Рубан¹⁾

Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 142432 Черноголовка, Россия Поступила в редакцию 20 мая 2021 г. После переработки 21 мая 2021 г. Принята к публикации 22 мая 2021 г.

Численно моделируется пространственно неоднородный, захваченный ловушкой двух-компонентный Бозе-конденсат холодных атомов в режиме разделения фаз. Впервые показано, что поверхностное натяжение между компонентами приводит к возможности существования капель более плотной фазы, плавающих на поверхности менее плотной фазы. В зависимости от анизотропии гармонической ловушки и других параметров системы, устойчивое равновесие капли достигается либо на "полюсах", либо на "экваторе". Плавучесть капли может иногда сохраняться даже при наличии присоединенного к ней квантованного вихря.

DOI: 10.31857/S1234567821120107

Введение. Многокомпонентные смеси ультрахолодных бозе-конденсированных атомных газов исследуются уже на протяжении четверти столетия [1– 5]. Такие системы состоят либо из различных химических (щелочных) элементов, либо из различных изотопов одного и того же элемента, либо из одинаковых изотопов в двух различных внутренних (сверхтонких) квантовых состояниях. Взаимодействия между компонентами приводят к большому разнообразию явлений, которые отсутствуют в простых бозе-конденсатах. При этом весьма существенно, что параметры нелинейных взаимодействий между волнами материи, будучи пропорциональными соответствующим длинам рассеяния, могут во многих случаях изменяться по желанию исследователя в широких пределах с помощью резонансов Фешбаха [6-10]. В частности, достаточно сильное перекрестное отталкивание между двумя видами атомов приводит к пространственному разделению конденсатов [11, 12] и наличию эффективного поверхностного натяжения на доменных стенках между фазами [4, 13]. Подобная сегрегация лежит в основе многих интересных конфигураций и явлений, таких как нетривиальная геометрия основного состояния бинарных несмешивающихся Бозе-конденсатов в ловушках [14-16] (включая оптические решетки [17–19]), динамика пузырей [20], квантовые аналоги классических гидродинамических неустойчивостей (Кельвина-Гельмгольца [21, 22], Рэлея-Тейлора [23-25], Плато-Рэлея [26]), параметрическая неустойчивость капиллярных волн на границе раздела фаз [27, 28], сложные текстуры во вращающихся бинарных конденсатах [29–31], вихри с заполненной сердцевиной [3,32–37], трехмерные топологические структуры [38–43], и т.д.

Крупномасштабная динамика поверхности раздела в сегрегированном бинарном конденсате во многом подобна динамике пузырей/капель в классической механике несмешивающихся идеальных жидкостей [20, 23–25]. При отсутствии квантованных вихрей течение потенциально внутри каждой из компонент, а вся завихренность поля скорости сосредоточена на разделяющей поверхности. В этом смысле граница пузыря представляет собой вихревой лист, в некоторых случаях напоминающий вихревые листы в ³He-A [44]. Важную роль подобные структуры играют также в турбулентности (см. недавние работы [45–47] и ссылки в них).

Надо сказать, что аналогия с классической гидродинамикой проведена пока что далеко не по всем направлениям. Например, при наличии достаточно сильного поверхностного натяжения не слишком большая капля более плотной жидкости может плавать на поверхности менее плотной жидкости. Насколько известно автору, подобная капиллярная плавучесть в случае бинарных конденсатов до сих пор не исследовалась. Целью данной работы является численная демонстрация возможности плавания тяжелой капли в рамках системы связанных уравнений Гросса–Питаевского (1)–(2), которые описывают разреженные Бозе-конденсаты при нуле температуры. В отличие от привычных, практически несжимае-

¹⁾e-mail: ruban@itp.ac.ru

мых жидкостей в однородном гравитационном поле, здесь будут рассмотрены бозе-конденсаты в ловушке с квадратичным анизотропным потенциалом, так что равновесный профиль менее плотной "жидкости" $\rho_{eq}(\mathbf{r})$ [см. формулу (6) ниже] будет сильно неоднородным в пространстве. При этом поверхностное натяжение пропорционально $\rho_{\rm eq}^{3/2}$ [13], т.е. оно отсутствует на поверхности Томаса-Ферми и увеличивается вглубь конденсата. Более того, поскольку поверхность Томаса-Ферми имеет вид сплюснутого либо вытянутого эллипсоида вращения, эффективная потенциальная энергия капли окажется зависящей не только от локально вертикального отклонения ее центра масс, но и от двух локально горизонтальных координат на эллипсоиде. В результате капля может при своем плавании совершать осцилляции по "широтной" координате эллипсоида. В зависимости от параметров системы, минимум горизонтальной потенциальной энергии может достигаться как на полюсах, так и на экваторе эллипсоида.

Модель и численный метод. Чтобы продемонстрировать суть явления, достаточно рассмотреть наиболее простую ситуацию с равными массами обоих типов атомов, $m_1 = m_2 = m$. Сюда же приближенно относится и случай малой разницы в массах изотопов, как, например, ⁸⁵Rb и ⁸⁷Rb. Пусть осесимметричная гармоническая ловушка характеризуется поперечной частотой ω_{\perp} и анизотропией $\lambda = \omega_{\parallel}/\omega_{\perp}$. Выбирая масштаб $\tau = 1/\omega_{\perp}$ для времени, $l_{\rm tr} = \sqrt{\hbar/\omega_{\perp}m}$ для длины, и $\varepsilon = \hbar\omega_{\perp}$ для энергии, запишем обезразмеренные уравнения движения для комплексных волновых функций $A(\mathbf{r},t)$ и $B(\mathbf{r},t)$ в виде

$$i\dot{A} = -\frac{1}{2}\nabla^2 A + \left[V(x, y, z) + g_{11}|A|^2 + g_{12}|B|^2\right]A,$$
 (1)

$$i\dot{B} = -\frac{1}{2}\nabla^2 B + \left[V(x, y, z) + g_{21}|A|^2 + g_{22}|B|^2\right]B, (2)$$

где $V = (x^2 + y^2 + \lambda^2 z^2)/2$ – потенциал ловушки, $g_{\alpha\beta}$ – симметричная матрица нелинейных взаимодействий (с положительными элементами в интересующем нас случае). Физически взаимодействия определяются длинами рассеяния $a_{\alpha\beta}$ [2]:

$$g_{\alpha\beta}^{\rm phys} = 2\pi\hbar^2 a_{\alpha\beta} (m_{\alpha}^{-1} + m_{\beta}^{-1}). \tag{3}$$

Без ограничения общности первый коэффициент самоотталкивания можно нормировать на единицу, $g_{11} = 1$, поскольку в данной работе $g_{\alpha\beta}$ предполагаются фиксированными (в каждом отдельно взятом численном эксперименте) параметрами.

Сохраняющиеся числа захваченных ловушкой атомов даются формулами

$$N_1 = \frac{l_{\rm tr}}{4\pi a_{11}} \int |A|^2 d^3 \mathbf{r} = (l_{\rm tr}/a_{11})n_1, \qquad (4)$$

$$N_2 = \frac{l_{\rm tr}}{4\pi a_{11}} \int |B|^2 d^3 \mathbf{r} = (l_{\rm tr}/a_{11})n_2.$$
 (5)

В реальных экспериментах отношение $l_{\rm tr}/a_{11}$ оказывается в диапазоне от нескольких сотен до нескольких тысяч.

Надо отметить, что данная простая модель (1)– (2) является консервативной. Она применима только в пределе нулевой температуры и совершенно непригодна для исследования любых эффектов, обусловленных конечностью температуры (в том числе диссипативных). Для сравнения, термодинамика играет первостепенную роль, а сами уравнения движения намного более сложны, например, в ³Не [48].

Система (1)-(2) является по сути двухжидкостной идеальной гидродинамикой (при условии потенциальности обоих полей скорости), с тем отличием, что полное давление каждой компоненты состоит из обычного гидродинамического давления и так называемого квантового давления. Квантовое давление "срабатывает" только там, где плотность резко меняется в пространстве. В нашем случае это будет переходный слой. Гидродинамические давления обеих жидкостей есть $g_{11}|A|^4/2$ и $g_{22}|B|^4/2$, так что при равных давлениях более плотной оказывается та компонента, у которой коэффициент самооталкивания меньше. Для определенности, мы будем полагать $g_{22} < g_{11} = 1$, т.е. относительно небольшая капля более плотной второй фазы будет за счет поверхностного натяжения плавать по свободной поверхности первой фазы.

Фоновый профиль плотности первой компоненты характеризуется химическим потенциалом μ . При условии $\mu \gg 1$ приближение Томаса–Ферми дает зависимость

$$|A_0|^2 \approx [\mu - V(x, y, z)] \equiv \mu \rho_{\rm eq}(\mathbf{r}). \tag{6}$$

Таким образом, эффективный поперечный радиус конденсата есть $R = \sqrt{2\mu}$, а продольный полуразмер $Z = \lambda R$.

Условие разделения фаз представляет собой неравенство $g = (g_{12}^2 - g_{11}g_{22}) > 0$ [11, 12]. Имеется узкий переходный слой между сегрегированными конденсатами, где плотности обеих фаз спадают практически до нуля в одном либо в другом направлении. При этом соответствующий избыток энергии (коэффициент поверхностного натяжения) определяется формулой вида $\sigma = F(g_{22}/g_{11}, g_{12}/g_{11})|A_0|^3$ [11, 13]. В отличие от привычных несжимаемых жидкостей, зависимость поверхностного натяжения от фоновой плотности здесь весьма существенна. Проведенное в данной работе численное моделирование было ориентировано на экспериментально реализуемые смеси ⁸⁵Rb-⁸⁷Rb [8], где $a_{12}/a_{22} \approx 2$, тогда как a_{11} можно изменять в широких пределах с помощью резонанса Фешбаха. Поэтому во всех наших численных экспериментах $g_{12} = 2g_{22}$. Для g_{22} брались различные значения, включая $g_{22} =$ = 0.6, 0.7, 0.8.

Используемый нами численный метод был достаточно стандартным и включал в себя две процедуры. Первая процедура – приготовление начального состояния путем применения (к достаточно произвольно взятому "входному" состоянию) градиентного спуска, что в данном случае эквивалентно распространению в мнимом времени (imaginary time propagation) на конечном интервале вспомогательной квази-временной переменной. Эта диссипативная процедура отфильтровывала быстрые возбуждения и оставляла только интересующие нас мягкие моды, которые не успевали достичь минимума своей энергии. При этом также формировался квазиравновесный переходный слой между фазами. Вторая процедура – собственно моделирование системы (1)– (2) с помощью Фурье-метода расщепленного шага по времени (Split-Step Fourier Method) второго порядка аппроксимации с периодическими граничными условиями по пространственным координатам. В целом численный метод подобен тому, что использовался ранее в работе [49].

Результаты. Прежде всего скажем, что наблюдалась естественная тенденция к увеличению максимально возможной массы плавучей капли при уменьшении относительной разницы между *g*₁₁ и *g*₂₂.

Некоторые из полученных численных результатов представлены на рис. 1–3. Для лучшей наглядности, в первом и втором примерах конфигурации выбраны симметричными относительно плоскости y == 0. Профили суммарной плотности в указанной плоскости ясно свидетельствуют о наличии вблизи поверхности относительно более плотной капли, а также переходного слоя между компонентами.

Рисунок 1 иллюстрирует случай, когда устойчивыми положениями капли на эллипсоиде оказываются полюса. Здесь она совершает медленные колебания относительно верхней точки (см. видео [50]). Следует упомянуть, что капля с большей массой $(n_2 = 45)$ уже не способна держаться на поверхности и вместо этого совершает сложные движения внутри эллипсоида, иногда ненадолго задерживаясь вблизи поверхности (см. видео [51]).

Рисунок 2 соответствует меньшей по сравнению с первым примером относительной разнице в плот-



Рис. 1. (Цветной онлайн) Численный пример плавающей тяжелой капли. Показана отнормированная на μ суммарная плотность двух конденсатов в плоскости симметрии y = 0 в моменты времени: (a) – t = 500; (b) – t = 600; (c) – t = 700. В данном случае капля совершает медленные колебания около полюса, причем рисункам (a) и (c) соответствуют примерно крайние ее отклонения. Значения параметров: $\lambda = 1.4$, $g_{11} = 1.0$, $g_{22} = 0.7$, $g_{12} = 1.4$, $n_1 = 1282.4$, $n_2 = 37.1$, $\mu = 30$

ностях двух фаз. Здесь имеет место ситуация, когда эффективная потенциальная энергия плавучей капли достигает локального минимума на экваторе (см.



Рис. 2. (Цветной онлайн) Численный пример более крупной и подвижной, чем на рис. 1, но не столь плотной капли, совершающей колебания около экватора. Моменты времени: (а) – t = 680; (b) – t = 700; (c) – t = 720. Рисункам (а) и (с) соответствуют примерно крайние отклонения. Значения параметров: $\lambda = 1.4$, $g_{11} = 1.0, g_{22} = 0.8, g_{12} = 1.6, n_1 = 1270.8, n_2 = 50.2, \mu = 30$

видео [52]). В этом примере капля довольно большая и при своем движении заметно деформируется. Надо сказать, что в случае вытянутого эллипсоида с анизотропией $\lambda = 0.7$ подобная капля имеет свои-

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021



Рис. 3. (Цветной онлайн) Численный пример плавучей капли с присоединенным к ней квантованным вихрем (в момент времени t = 300). Значения параметров: $\lambda = 1.4, g_{11} = 1.0, g_{22} = 0.8, g_{12} = 1.6, n_1 = 1275.5, n_2 = 28.9, \mu = 30$

ми устойчивыми положениями полюса (этот случай здесь не представлен). По всей видимости, разница в поведении обусловлена другим характером зависимостей кривизны поверхности Томаса–Ферми и локальной "силы тяжести" от полярного угла. Этот вопрос, однако, не столь прост и ясен, поскольку, например, при значении $g_{22} = 0.7$ (как на рис. 1) вытянутый эллипсоид по прежнему притягивает каплю к полюсу (не проиллюстрировано). В данном пункте требуется дополнительное исследование.

Интересно отметить, что капля может оставаться на плаву также и в случае наличия присоединенного к ней квантованного вихря, пронизывающего первую компоненту (ср. с результатами недавней работы [43], где достаточно большая плотная капля находится в центре системы и своей массой стабилизирует несколько присоединенных к ней вихревых нитей). В примере, показанном на рис. 3, капля не тонет даже несмотря на то, что вихрь создает дополнительную тянущую "вниз" силу (см. видео [53]). Более массивная капля с $n_2 = 49.0$ в аналогичных обстоятельствах совершает повторяющиеся движения вверх-вниз вдоль вихря от полюса к полюсу сквозь весь конденсат (см. видео [54]).

Заключение. Таким образом, по аналогии с обыкновенными каплями, способными за счет поверхностного натяжения плавать на поверхности менее плотной жидкости в поле тяжести, в данной работе численно обнаружены плавучие квантовые капли в системе двух захваченных ловушкой несмешивающихся Бозе-конденсатов. Существенным отличием от повседневной практики является отсутствие нейтрального равновесия квантовой капли по координатам вдоль поверхности Томаса–Ферми. Очевидно, что этот эффект связан с конечностью отношения размера капли по сравнению с размером основной фазы. Приближенное аналитическое вычисление соответствующей зависимости потенциальной энергии капли и ее равновесной геометрической формы остается интересной задачей на будущее.

- T.-L. Ho and V.B. Shenoy, Phys. Rev. Lett. 77, 3276 (1996).
- H. Pu and N.P. Bigelow, Phys. Rev. Lett. 80, 1130 (1998).
- B. P. Anderson, P. C. Haljan, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Phys. Rev. Lett. 85, 2857 (2000).
- S. Coen and M. Haelterman, Phys. Rev. Lett. 87, 140401 (2001).
- G. Modugno, M. Modugno, F. Riboli, G. Roati, and M. Inguscio, Phys. Rev. Lett. 89, 190404 (2002).
- J. P. Burke, Jr., J. L. Bohn, B. D. Esry, and C. H. Greene, Phys. Rev. Lett. 80, 2097 (1998).
- G. Thalhammer, G. Barontini, L. De Sarlo, J. Catani, F. Minardi, and M. Inguscio, Phys. Rev. Lett. 100, 210402 (2008).
- S. B. Papp, J. M. Pino, and C. E. Wieman, Phys. Rev. Lett. 101, 040402 (2008).
- S. Tojo, Y. Taguchi, Y. Masuyama, T. Hayashi, H. Saito, and T. Hirano, Phys. Rev. A 82, 033609 (2010).
- C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, Rev. Mod. Phys. 82, 1225 (2010).
- 11. E. Timmermans, Phys. Rev. Lett. 81, 5718 (1998).
- 12. P. Ao and S. T. Chui, Phys. Rev. A 58, 4836 (1998).
- 13. B. van Schaeybroeck, Phys. Rev. A 78, 023624 (2008).
- A. A. Svidzinsky and S. T. Chui, Phys. Rev. A 68, 013612 (2003).
- S. Gautam and D. Angom, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43, 095302 (2010).
- R. W. Pattinson, T. P. Billam, S. A. Gardiner, D. J. McCarron, H. W. Cho, S. L. Cornish, N. G. Parker, and N. P. Proukakis, Phys. Rev. A 87, 013625 (2013).
- K. Suthar, A. Roy, and D. Angom, Phys. Rev. A 91, 043615 (2015).
- K. Suthar and D. Angom, Phys. Rev. A 93, 063608 (2016).
- K. Suthar and D. Angom, Phys. Rev. A 95, 043602 (2017).
- K. Sasaki, N. Suzuki, and H. Saito, Phys. Rev. A 83, 033602 (2011).
- H. Takeuchi, N. Suzuki, K. Kasamatsu, H. Saito, and M. Tsubota, Phys. Rev. B 81, 094517 (2010).

- N. Suzuki, H. Takeuchi, K. Kasamatsu, M. Tsubota, and H. Saito, Phys. Rev. A 82, 063604 (2010).
- K. Sasaki, N. Suzuki, D. Akamatsu, and H. Saito, Phys. Rev. A 80, 063611 (2009).
- S. Gautam and D. Angom, Phys. Rev. A 81, 053616 (2010).
- T. Kadokura, T. Aioi, K. Sasaki, T. Kishimoto, and H. Saito, Phys. Rev. A 85, 013602 (2012).
- K. Sasaki, N. Suzuki, and H. Saito, Phys. Rev. A 83, 053606 (2011).
- D. Kobyakov, V. Bychkov, E. Lundh, A. Bezett, and M. Marklund, Phys. Rev. A 86, 023614 (2012).
- D.K. Maity, K. Mukherjee, S.I. Mistakidis, S. Das, P.G. Kevrekidis, S. Majumder, and P. Schmelcher, Phys. Rev. A **102**, 033320 (2020).
- K. Kasamatsu, M. Tsubota, and M. Ueda, Phys. Rev. Lett. 91, 150406 (2003).
- K. Kasamatsu and M. Tsubota, Phys. Rev. A 79, 023606 (2009).
- P. Mason and A. Aftalion, Phys. Rev. A 84, 033611 (2011).
- K. J. H. Law, P. G. Kevrekidis, and L. S. Tuckerman, Phys. Rev. Lett. **105**, 160405 (2010); Erratum: Phys. Rev. Lett. **106**, 199903 (2011).
- M. Pola, J. Stockhofe, P. Schmelcher, and P. G. Kevrekidis, Phys. Rev. A 86, 053601 (2012).
- S. Hayashi, M. Tsubota, and H. Takeuchi, Phys. Rev. A 87, 063628 (2013).
- 35. A. Richaud, V. Penna, R. Mayol, and M. Guilleumas, Phys. Rev. A **101**, 013630 (2020).
- A. Richaud, V. Penna, and A.L. Fetter, Phys. Rev. A 103, 023311 (2021).
- 37. В.П. Рубан, Письма в ЖЭТФ **113**, 539 (2021).
- K. Kasamatsu, M. Tsubota, and M. Ueda, Phys. Rev. Lett. 93, 250406 (2004).
- H. Takeuchi, K. Kasamatsu, M. Tsubota, and M. Nitta, Phys. Rev. Lett. **109**, 245301 (2012).
- M. Nitta, K. Kasamatsu, M. Tsubota, and H. Takeuchi, Phys. Rev. A 85, 053639 (2012).
- K. Kasamatsu, H. Takeuchi, M. Tsubota, and M. Nitta, Phys. Rev. A 88, 013620 (2013).
- S. B. Gudnason and M. Nitta, Phys. Rev. D 98, 125002 (2018).
- 43. V.P. Ruban, arXiv:2104.05296.
- Г. Е. Воловик, Успехи физических наук 185, 970 (2015).
- D. S. Agafontsev, E. A. Kuznetsov, and A. A. Mailybaev, Phys. Fluids **30**, 095104 (2018).
- Е. А. Кузнецов, Е. В. Серещенко, Письма в ЖЭТФ 109, 231 (2019).
- 47. A. Migdal, Intl. J. Mod. Phys. A, 36, 2150062 (2021).

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

- M. M. Salomaa and G. E. Volovik, Rev. Mod. Phys. 59, 533 (1987).
- 49. В.П. Рубан, Письма в ЖЭТ
Ф ${\bf 108},\,638$ (2018).
- 50. http://home.itp.ac.ru/~ruban/20MAY2021/V1Y.avi.
- 51. http://home.itp.ac.ru/~ruban/20MAY2021/V1N.avi.
- 52. http://home.itp.ac.ru/~ruban/20MAY2021/V2Y.avi.
- 53. http://home.itp.ac.ru/~ruban/20MAY2021/V3Y.avi.
- 54. http://home.itp.ac.ru/~ruban/20MAY2021/V3N.avi.

Комментарий к статье "Связанные состояния отталкивающихся адсорбированных атомов" (Письма в ЖЭТФ 113(8), 523 (2021))

 $A. C. Иоселевич^{1)}$

Лаборатория физики конденсированного состояния, Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики", 101000 Москва, Россия

Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 119334 Москва, Россия

Поступила в редакцию 16 апреля 2021 г. После переработки 16 апреля 2021 г. Принята к публикации 13 мая 2021 г.

DOI: 10.31857/S1234567821120119

В недавней работе [1] были рассмотрены связанные состояния двух точечных частиц, взаимодействующих друг с другом через потенциал нулевого радиуса, характеризуемый длиной рассеяния a. Частицы находятся во внешнем поле, ограничивающем их движение в одном из направлений. Авторы показали, что в этой ситуации образуется связанное состояние при любом знаке a, в то время как в отсутствие поля связанное состояние образуется только при a > 0.

Этот – правильный – вывод неправильно интерпретируется авторами как образование связанного состояния *отталкивающимися* частицами в присутствии внешнего поля, и подается как удивительный и парадоксальный квантовый эффект. На самом деле он легко объясняется в терминах элементарной квантовой механики, если иметь в виду, что в условиях применимости модели потенциала нулевого радиуса частицы не отталкиваются, а *притягиваются при любом знаке а*. Хотя последнее утверждение хорошо известно, ниже я воспроизведу его краткий вывод.

Низкоэнергетические свойства любого короткодействующего потенциала описываются длиной рассеяния a. В том случае, когда радиус действия потенциала $r_0 \ll |a|$, применима модель потенциала нулевого радиуса, в которой действие последнего сводится к условию $d \ln(r\psi)/dr|_{r\to 0} = -1/a$ на волновую функцию. Для вычисления наблюдаемых величин этого условия достаточно, однако для лучшего понимания результатов полезно разобраться в том, каково "микроскопическое" устройство потенциала нулевого радиуса на масштабах $r \sim r_0$. Для простоты ограничимся потенциалами вида $V(r) = V_0 \theta(r_0 - r)$. Как известно, длина рассеяния в таком потенциале описывается следующими точными формулами (см. [2], с. 662):

$$a = -r_0 + \frac{1}{\kappa} \operatorname{th}(\kappa r_0), \quad \kappa = \sqrt{2mV_0}/\hbar \quad (V_0 > 0),$$

$$a = -r_0 + \frac{1}{\kappa} \operatorname{tg}(\tilde{\kappa} r_0), \quad \tilde{\kappa} = \sqrt{2m|V_0|}/\hbar \quad (V_0 < 0).$$

Из них следует, что для отталкивающего потенциала всегда a < 0 и $|a| < r_0$, поэтому при любом $V_0 > 0$ невозможно устремить r_0 к нулю так, чтобы величина a при этом осталась конечной. Это означает, что модель потенциала нулевого радиуса с конечной длиной рассеяния не может быть реализована с помощью отталкивающего потенциала.

Напротив, для притягивающего потенциала величина *а* может иметь как положительный (когда $|V_0| > V_c = \frac{1}{2m} (\pi \hbar/2r_0)^2$ и существует связанное состояние, см. [2], с. 144), так и отрицательный (если $|V_0| < V_c$ и связанного состояния нет) знак. Величину V_0 удобно выразить в терминах длины рассеяния:

$$V_0 \approx -V_c \left(1 + \frac{8}{\pi^2} \frac{r_0}{a} + \cdots \right) \quad (r_0 \ll |a|).$$
 (1)

Итак, потенциал нулевого радиуса всегда отвечает притяжению – как при a > 0, так и при a < 0, только в первом случае притяжение достаточно сильно для того, чтобы образовать связанное состояние, а во втором – недостаточно. Относительное отклонение глубины потенциальной ямы от порогового значения, отвечающего моменту образования связанного состояния, при $r_0 \rightarrow 0$ также стремится к нулю, но с разных сторон, в зависимости от знака a (как и должно быть).

¹⁾e-mail: iossel@itp.ac.ru

Уже само название работы вводит читателя в заблуждение. По сути дела ни о каких "отталкивающихся атомах" в статье речь не идет: как показано выше, потенциал нулевого радиуса всегда отвечает притяжению: атомы притягиваются.

А почему возникает связанное состояние? Известно, что любой (даже очень слабый) притягивающий потенциал в двумерной задаче обязательно образует связанное состояние (см. [2], с. 207). Если в исходной трехмерной системе с притягивающим, но не связывающим потенциалом, ограничить движение частицы по какой-то координате, то задача сразу становится эффективно двумерной и в потенциале возникает связанное состояние. Например, незаряженный (но слабо притягивающий электроны) дефект в массивном полупроводнике не образует связанного состояния, но оно образуется, если дефект находится внутри двумерной квантовой ямы.

- 1. А.В. Максимычев, Л.И. Меньшиков, П.Л. Меньшиков, Письма в ЖЭТФ **113**, 523 (2021).
- Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Курс теоретической физики, Квантовая механика, Физматлит, М. (2004).

Информация для авторов

Журнал "Письма в ЖЭТФ" (и его англоязычная версия "JETP Letters") публикует:

- Краткие оригинальные статьи, требующие срочной публикации и представляющие общий интерес для широкого круга читателей-физиков. К категории срочных публикаций относятся первые наблюдения новых физических явлений и теоретические работы, содержащие принципиально новые результаты.
- Миниобзоры на наиболее актуальные "горячие" темы, по результатам недавних исследований выполненных авторами.
- Краткие комментарии к статьям, появившимся ранее в нашем журнале.

"Письма в ЖЭТФ" является двуязычным журналом, принимая и публикуя статьи на русском и на английском языках¹⁾. Все статьи на английском языке, принятые к публикации, направляются на лингвистическую экспертизу. Если английский текст признается недостаточно ясным, то редакция оставляет за собой право попросить авторов улучшить качество языка или представить для опубликования русскую версию статьи.

В "JETP Letters" все статьи публикуются на английском языке. Авторы принятых к печати статей могут (и это приветствуется), сразу же после извещения о принятии, прислать в редакцию предлагаемый ими самостоятельный перевод своей русскоязычной статьи на англ. язык. Наличие такого перевода, хотя и не гарантирует его безусловное принятие переводчиками Издателя, но зачастую облегчает авторам взаимодействие с ними. Перевод русских и редактирование английских статей осуществляется в издательстве МАИК "Наука/Интерпериодика". Русская и англоязычная версии должны быть идентичны, поскольку статья, опубликованная в обеих версиях, является одной публикацией. Хотя английская версия окончательно редактируется на месяц позже русской, в ней не должно быть дополнительных ссылок, рисунков, формул и т.п., и все утверждения должны быть одинаковы.

Размер оригинальной статьи, как правило, не должен превышать 7 страниц русского издания (двухколоночный формат, соответствующий стилевому файлу), включая 5–6 рисунков. Размер миниобзора, как правило, не должен превышать 12 страниц, включая 8–10 рисунков. Типичный размер комментария и ответа на комментарий – до 1 стр.

Образец статьи²⁾, с использованием стилевого файла jetpl.cls (кодировка UTF-8³⁾, кодировка KOI8-R⁴⁾).

Статьи в редакцию можно направлять

- по электронной почте letters@kapitza.ras.ru направлять текст в формате TeX, LaTeX (для статей на русском языке допускается MS Word), рисунки в формате PostScript (..ps), EncapsulatedPostScript (..eps) или PaintBrush (..pcx), каждый рисунок отдельным файлом. Необходимо также приложить pdf файл статьи с встроенными рисунками.
- о по почте по адресу: 117334 Москва, ул. Косыгина 2, "Письма в ЖЭТФ" − два экземпляра статьи с рисунками на отдельных страницах (для полутоновых рисунков еще один дополнительный экземпляр).

К рукописи нужно приложить электронный адрес (e-mail) и почтовый адрес с индексом, фамилию, полное имя и отчество того автора, с которым предпочтительно вести переписку, а также номера его служебного и домашнего телефонов; для статей на английском языке – дополнительно CD диск или флеш карту с текстом в формате LATEX; для статей из России и других стран СНГ, в случае необходимости, может быть представлено направление от учреждения, которое будет фигурировать в титуле статьи как основное.

¹⁾http://www.jetpletters.ru/ru/info.shtml#sub1

 $^{^{2)}} http://www.jetpletters.ru/tex/utf8/example.tex$

 $^{^{3)}} http://www.jetpletters.ru/tex/utf8/jetpl.cls$

 $^{{}^{4)}} http://www.jetpletters.ru/tex/koi/jetpl.cls$

Представленные в редакцию рукописи предварительно рассматриваются Редакторами. Не все рукописи направляются на отзыв рецензентам. Редколлегия на основании заключения Редактора может отклонить статьи, которые явно не соответствуют правилам и не подходят для журнала. С другой стороны, ни одна статья не принимается в печать без отзыва рецензентов или членов Редколлегии.

Решение о публикации или отклонении статей принимается на заседании редколлегии по представлению члена редколлегии по соответствующему разделу, с учетом мнения рецензентов. Основанием для отклонения статьи может быть ее недостаточная актуальность, отсутствие существенного продвижения по сравнению с другими публикациями в этой области, слишком специальная тематика и др. Рецензии на отклоненные статьи могут и не посылаться авторам. Авторы могут прислать отклоненную статью на повторное рассмотрение, сопроводив ее аргументированным разъяснительным письмом. В этом случае статья будет направлена на дополнительное рецензирование.

В связи с требованиями издателя и распространителя журнала "JETP Letters", наш журнал "Письма в ЖЭТФ" с середины 2016 года лишен возможность публиковать полные тексты статей, исходно написанных на английском языке. Чтобы выполнить это требование, но не лишать российских читателей части информации, редакцией журнала принято следующее решение: для статей, представленных на английском языке и удовлетворяющих всем требованиям журнала, публиковать в "Письмах в ЖЭТФ" распиренные аннотации на английском языке (объемом не более 1–2 стр. журнального текста, или 5600–11200 знаков текста, включая один рисунок и список литературы). В конце аннотации будет приведена ссылка на полный текст статьи в журнале "JETP Letters".

Оформление рукописи

Первая страница рукописи должна выглядеть следующим образом.

ЗАГЛАВИЕ

Инициалы и фамилии авторов Обязательно — Учреждения, где работают авторы (включая город и почтовый индекс; e-mail одного из авторов) Дата поступления Текст аннотации

Далее следует основной текст.

Фамилии иностранных авторов пишутся в русской транскрипции, но в сноске дополнительно указывается оригинальная транскрипция. Названия мест работы за рубежом пишутся по-английски.

Обращаем внимание авторов статей на русском языке на то, что перевод фамилий с русского языка на английский производится по жестким правилам (см. Письма в ЖЭТФ, т. 58, вып. 8, с. 699). Если авторы по каким-то причинам предпочитают иную транскрипцию своей фамилии, об этом следует написать на отдельном листе. Поскольку аннотации сейчас распространяются и отдельно от статей (базы данных, системы – On-line. и т.п.), текст аннотации должен быть самодостаточным: без ссылок на список литературы, с понятными обозначениями, без аббревиатур.

Сокращения словосочетаний должны даваться заглавными буквами (без точек) и поясняться при первом их употреблении. В тексте подстрочные примечания должны иметь сплошную нумерацию по всей статье.

Цитируемая литература должна даваться общим списком в конце статьи с указанием в тексте статьи ссылки порядковой цифрой, например, [1]. Литература дается в порядке упоминания в статье. Для журнальных статей указываются сначала инициалы, затем фамилии всех авторов, название журнала, номер тома (полужирным шрифтом), первая страница и год в круглых скобках. В случае, если цитируемая статья имеет более 4-х авторов, то только 3 первых должны быть перечислены явно, например

1. A. B. Ivanov, V. G. Petrov, I. M. Sergeev et al., JETP 71, 161 (1990).

Для книг надо указывать инициалы и фамилии всех авторов, полное название книги, издатель, год, том, номер издания, часть, глава, страница (если ссылка на переводное издание, то обязательно в скобках нужно указать данные оригинала), например

2. L. M. Blinov, Structure and Properties of Liquid Crystals, Springer, Heidelberg (2011).

Письма в ЖЭТФ том 113 вып. 11-12 2021

Цитирование двух или более произведений под одним номером, одного и того же произведения под разными номерами не допускается.

В обозначениях и индексах не должно быть русских букв. Например, следует писать P_{opt}, а не P_{ont}.

В десятичных дробях вместо запятой нужно использовать точку. Векторы должны выделяться в тексте статьи полужирным шрифтом (без стрелки над ними).

Поскольку рисунки переносятся без изменений из "Писем в ЖЭТФ" в "JETP Letters" все надписи на рисунках должны быть только на английском языке. Авторов, использующих при подготовке рисунков компьютерную графику, просим придерживаться следующих рекомендаций: графики делать в рамке; штрихи на осях направлять внутрь; по возможности использовать шрифт Times; высота цифр и строчных букв должна быть в пределах (3-4) % от максимального размера (высоты или ширины) рисунков, это относится и к цифрам на осях вставки; единицы измерения на осях графиков приводить в скобках. При подготовке рисунка имейте в виду, что, как правило, ширина рисунка при печати не превышает 82 мм; в исключительных случаях рисунок размещается на всей ширине листа (до 160 мм).

Рисунки публикуются "on-line" в цвете. На авторов возлагается обязанность проверить, что цветные рисунки читаемы, достаточно контрастны и в черно-белом печатном варианте. Образцы оформления статьи и рисунков, а также стилевой файл можно найти на WWW-странице "Писем в ЖЭТФ" (http://www.jetpletters.ru/).

Дополнительный материал

Журнал "Письма в ЖЭТФ" предоставляет авторам возможность публикации Дополнительного материала. Дополнительный материал, относящийся к статье, помещается на сайт одновременно с публикацией статьи в журнале. В Дополнительный материал помещаются сведения, существенные для узкого круга специалистов (например, детали сложных вычислений или мелкие детали экспериментальной техники), но не являющиеся критичными для понимания статьи широким кругом читателей журнала. Дополнительный материал не может быть использован для преодоления ограничения статьи по объему.

Объем дополнительного материала не должен превышать 4 страниц текста, с включением не более 4 рисунков.

В дополнительный материал нельзя включать:

- Дополнительный список литературы
- Сведения о вкладе авторов в работу
- Благодарности
- Комментарии, отклики или поправки.

Как прислать Дополнительный материал в редакцию

Дополнительный материал принимается на английском языке в виде TeX, doc и eps файлов одновременно со статьей по электронной почте по адресу letters@kapitza.ras.ru и рассматривается редакционной коллегией и рецензентами в совокупности со статьей. Файлы Дополнительного материала могут быть посланы в виде нескольких сообщений или могут быть включены в одно сообщение. В качестве темы этих сообщений должно быть указано "Дополнительный материал". В письме должно также быть приведено название статьи, фамилия первого автора и перечень всех прилагаемых файлов.

Правила оформления файлов Дополнительного материала и процедура рассмотрения

Правила оформления файла Дополнительного материала совпадают с правилами оформления основной статьи. В заголовке должно быть написано "Дополнительный материал к статье {название статьи}". Рисунки предпочтительны в цвете. Редакцией и рецензентами Дополнительный материал рассматривается как часть статьи и отдельно не рецензируется. За качество рисунков и качество английского языка Дополнительного материала ответственность ложится на авторов. Ссылка на Дополнительный материал в статье

В статье адрес **Дополнительного материала** приводится в последней ссылке списка литературы в следующем виде:

See Supplemental Material at {для принятой к печати статьи ссылка будет введена редакцией} Или в русском тексте

См. Дополнительный материал по адресу {для принятой к печати статьи ссылка будет введена редакцией}.

Право на воспроизведение

Дополнительный материал не является отдельным субъектом авторского права и входит в соглашение, подписанное автором для основного текста статьи. Любое воспроизведение Дополнительного материала должно подчиняться тем же правилам, что и текст основной статьи.

Комментарии в журнале "Письма в ЖЭТФ"

Журнал "Письма в ЖЭТФ" публикует краткие комментарии на ранее опубликованные в нем статьи. Авторы оригинальной статьи, на которую написан комментарий, могут на него ответить. Если и комментарий и ответ на него обоснованы и интересны, они принимаются в печать и публикуются в одном номере журнала. Отсутствие ответа авторов комментируемой статьи не является основанием для чрезмерной задержки или отказа в публикации комментария – если комментарий соответствует установленным критериям, он будет опубликован независимо от того, получен на него ответ авторов комментируемой работы или нет. Редакция не принимает комментарии, написанные кем-либо из авторов статьи. Комментарии и ответы ограничены по объему одной журнальной страницей (включая рисунки), аннотация не требуется. При желании авторы могут разместить на сайте журнала дополнительный материал, руководствуясь общими правилами (см. соответствующий раздел)⁵⁾.

Комментарий должен быть направлен на исправление или критику конкретной статьи. В первом абзаце комментария необходимо дать четкую ссылку на комментируемую статью, а также на то ее утверждение, которое комментируется. Комментарий должен касаться существа комментируемой статьи (не формы или стиля изложения) и быть непосредственно связанным с ней, а не просто содержать обсуждение общей темы. Формат комментария не предназначен для использования как инструмент для публикации дополнений к уже опубликованным статьям, он не предназначен также для установления приоритета или исправления библиографических неточностей. Критические замечания должны быть написаны в коллегиальном тоне; полемические комментарии отклоняются без рецензирования. Ответ авторов, чтобы быть пригодным для публикации, также должен быть написан в коллегиальном стиле и свободен от полемики.

Каждый комментарий отправляется авторам оригинальной статьи, у которых запрашиваются ответы на следующие вопросы:

- 1. Может ли комментарий быть опубликован без ответа?
- 2. Будет ли прислан ответ на комментарий для одновременной публикации?
- 3. Не кажется ли авторам, что комментарий слабо связан с оригинальной статьей? (В этом случае требуется подробная аргументация).

Автор оригинальной статьи не является анонимным рецензентом по отношению к комментарию. Редакция оставляет за собой право обратиться к анонимному рецензенту — независимому эксперту, у которого может быть запрошено мнение о комментарии и об ответе авторов. Авторам комментария рекомендуется вначале отправить свой комментарий первому автору комментируемой статьи для прямого ответа, однако редакция не рассматривает такой шаг в качестве обязательного. Ответ авторов комментируемой статьи будет предоставлен авторам комментария до публикации, однако последовавший за этим существенный пересмотр комментария будет интерпретирован как знак его опшбочности и может послужить причиной отказа в его публикации. Редакция не рассматривает комментарии на ответ авторов.

⁵⁾http://www.jetpletters.ru/ru/supp.shtml

Миниобзоры

Журнал "Письма в ЖЭТФ" в течение последних 10 лет в порядке опыта публиковал "заказные" миниобзоры по результатам избранных законченных проектов РФФИ и РНФ. Как показало время, такие обзоры пользуются популярностью и активно читаются. В связи с этим редколлегия журнала решила расширить данную практику и, начиная с июля 2020 г., принимает к рассмотрению миниобзоры не только заказные, но и представленные самими авторами в инициативном порядке.

Правила оформления рукописей, касающиеся статей и обзоров – см. на

http://www.jetpletters.ru/ru/info.shtml

Миниобзор, как и регулярная статья, будет рецензироваться, обсуждаться членами редколлегии и будет приниматься к публикации только в случае его соответствия требованиям, предъявляемым к статьям.

Содержание Том 113, выпуск 11 Оптика, лазерная физика

Чекалин С.В., Компанец В.О. Экспериментальное исследование самокомпрессии волнового пакета при полном внутреннем отражении в прозрачном диэлектрике	723
Конденсированное состояние	
Luchkin V.N., Mantsevich V.N., Maslova N.S. Non-stationary spin-polarized tunneling through a quantum dot coupled to noncollinearly polarized ferromagnetic leads	727
Niyazov R.A., Aristov D.N., Kachorovskii V.Yu. Aharonov–Bohm interferometry based on helical edge states (Mini-review)	729
Lebed A.G. Perpendicular upper critical magnetic field in a layered <i>d</i> -wave superconductor	731
Садовников С.И., Гусев А.И. Граница раздела в гетеронаноструктуре Ag ₂ S/ZnS	733
Зарезин А.М., Гусихин П.А., Андреев И.В., Муравьев В.М., Кукушкин И.В. Плазменные возбуждения в частично экранированных двумерных электронных системах (Миниобзор)	740
Макаров А.С., Гончарова Е.В., Цзиао Ц.Ч., Кобелев Н.П., Хоник В.А. Расчет фрагиль- ности высокоэнтропийных объемных аморфных сплавов на основе данных по релаксации сдвиговой упругости	751
Методы теоретической физики	
Миронов А., Мишняков В., Морозов А., Рашков Р. Связь Вирасоро и суперинтегрируемости. Гауссова матричная модель	757
Биофизика	
Бункин А.Ф., Давыдов М.А., Федоров А.Н., Архипенко М.В., Ошурко В.Б., Пер- шин С.М. Переключение моды собственных низкочастотных колебаний вируса табачной мозаики при изменении температуры его водной суспензии	763

Разное

Розенбаум В.М., Дехтярь М.Л., Шапочкина И.В., Трахтенберг Л.И. Фотоуправляемые	е
возвратно-поступательные молекулярные машины типа "гость-хозяин"	768

Содержание Том 113, выпуск 12

Поля, частицы, ядра

Волков М.К., Пивоваров А.А. Распад $\tau \to K^- \pi^0 \nu_{\tau}$ в модели Намбу–Иона-Лазинио с учетом взаимодействия мезонов в конечном состоянии	777
Бутенко А.В., Галимов А.Р., Мешков И.Н., Сыресин Е.М., Толстихина И.Ю., Тузи- ков А.В., Филиппов А.В., Ходжибагиян Г.Г., Шевелько В.П. Вакуумные условия и время жизни пучка однозарядных ионов гелия в Бустере NICA (Первый сеанс)	784
Астрофизика и космология	
Zaslavskii O.B. Super-Penrose process for nonextremal black holes	789
Оптика, лазерная физика	
Литвинов А.Н., Соколов И.М. Влияние движения атомов и столкновений с антирелаксационным покрытием стенок газовых ячеек на форму и сдвиг резонанса когерентного пленения населенностей	791
Волк Т.Р., Боднарчук Я.В., Гайнутдинов Р.В., Коханчик Л.С., Шандаров С.М. Микродоменная инженерия в волноводных и слоистых структурах на основе сегнетоэлектриков для применений в элементах фотоники (Миниобзор)	797
Пермяков Д.В., Кондратьев В.И., Пидгайко Д.А., Синев И.С., Самусев А.К. Измере- ние оптических потерь и дисперсии волноводных мод в геометрии критического эванесцентного возбуждения	809
Залозная Е.Д., Дормидонов А.Е., Компанец В.О., Чекалин С.В., Кандидов В.П. Пара- метры световой пули	817
Конденсированное состояние	
Коплак О.В., Дворецкая Е.В., Куницына Е.И., Королев Д.В., Палий А.В., Моргу- нов Р.Б. Спиновая релаксация в моно-ионных магнитах, замедленная полем рассеяния ферро- магнитных микрочастиц	825
Лобанов И.С., Поткина М.Н., Уздин В.М. Устойчивость и времена жизни магнитных состо- яний нано- и микроструктур (Миниобзор)	833
Рубан В.П. Капиллярная плавучесть в системе двух несмешивающихся Бозе-конденсатов	848
Иоселевич А.С. Комментарий к статье "Связанные состояния отталкивающихся адсорбированных атомов" (Письма в ЖЭТФ 113 (8), 523 (2021))	854